



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0001641
(43) 공개일자 2020년01월07일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) C07D 405/14 (2006.01)
C07D 409/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0071 (2013.01)
C07D 405/14 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0073189
(22) 출원일자 2018년06월26일
심사청구일자 없음

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

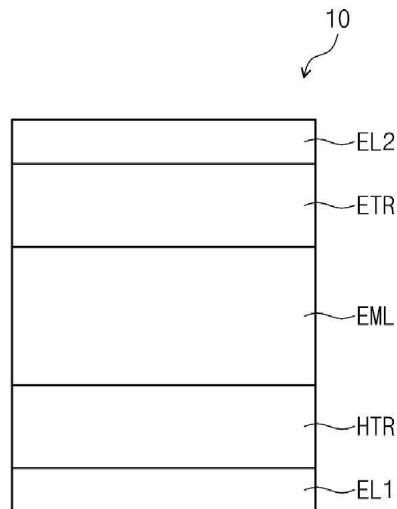
전체 청구항 수 : 총 23 항

(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 헤테로환 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, 발광층은 함질소 단환 고리, 링커, 및 2개 이상의 카바졸 모이어티를 포함하는 헤테로환 화합물을 포함하며, 링커는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고, 카바졸 모이어티 중 적어도 하나와 상기 함질소 단환 고리는 각각 상기 링커에 오르쏘(ortho) 관계로 치환되는 것인 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 409/14 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5024 (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 함질소 단환 고리, 링커, 및 2개 이상의 카바졸 모이어티를 포함하는 헤테로환 화합물을 포함하며,

상기 링커는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고,

상기 카바졸 모이어티 중 적어도 하나와 상기 함질소 단환 고리는 각각 상기 링커에 오르쏘(ortho) 관계로 치환되는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 함질소 단환 고리는 치환 또는 비치환된 피리딘기, 치환 또는 비치환된 피리미딘기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아진기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 헤테로환 화합물은 상기 링커를 1개 또는 2개를 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 함질소 단환 고리는 치환 또는 비치환된 페닐기로 1 이상 치환된 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고,

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

청구항 6

제5항에 있어서,

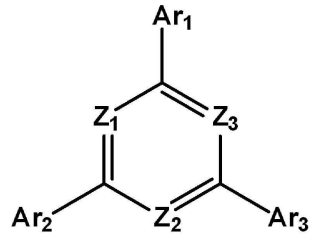
상기 도펀트는 열 활성 지연 형광 도펀트인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 7

제1항에 있어서,

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

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z_1 내지 Z_3 는 각각 독립적으로 CR_1 또는 N이고,

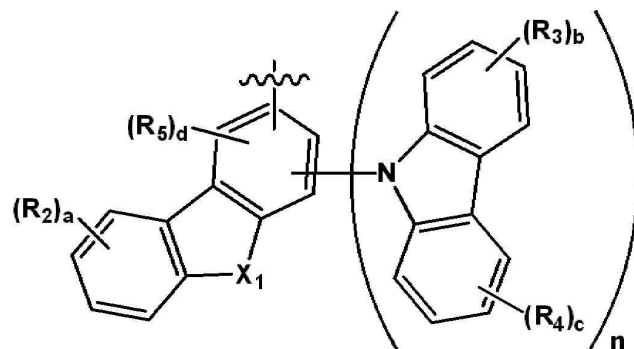
Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이며,

R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 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,

Ar_1 내지 Ar_3 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 헤테로아릴기이며,

Ar_1 내지 Ar_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X_1 은 0 또는 S이고,

n 은 1 이상 3 이하의 정수이며,

a 내지 c 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

d 는 0 이상 2 이하의 정수이며,

R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리

형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 8

제7항에 있어서,

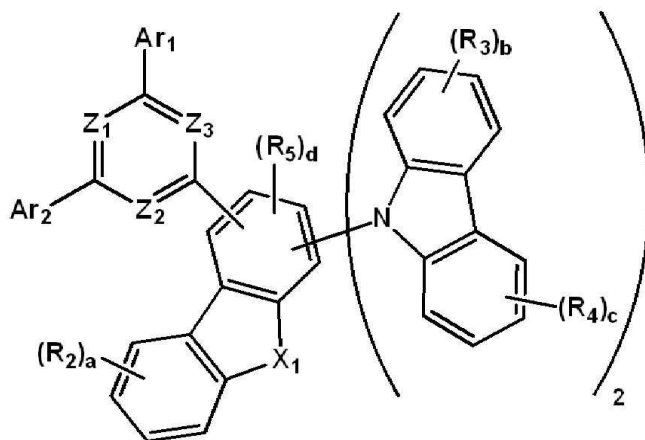
Z_1 내지 Z_3 는 각각 N인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제7항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-1]



상기 화학식 1-1에서,

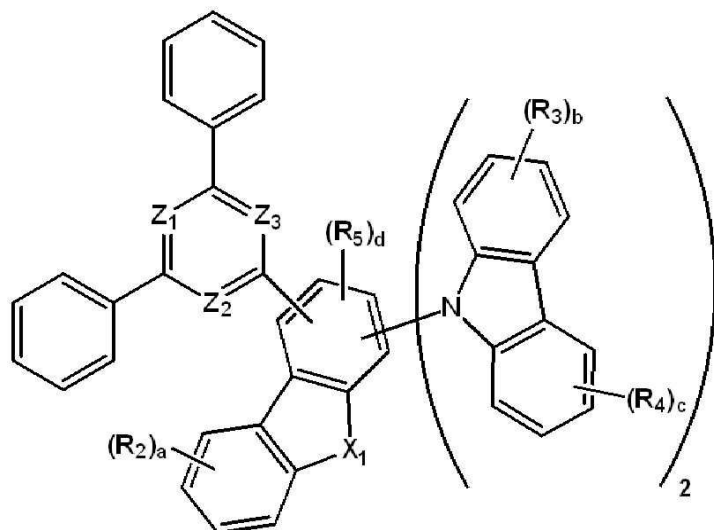
Z_1 내지 Z_3 , Ar₁, Ar₂, R₂ 내지 R₅, a 내지 d 및 X₁은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 10

제7항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-2]



상기 화학식 1-2에서,

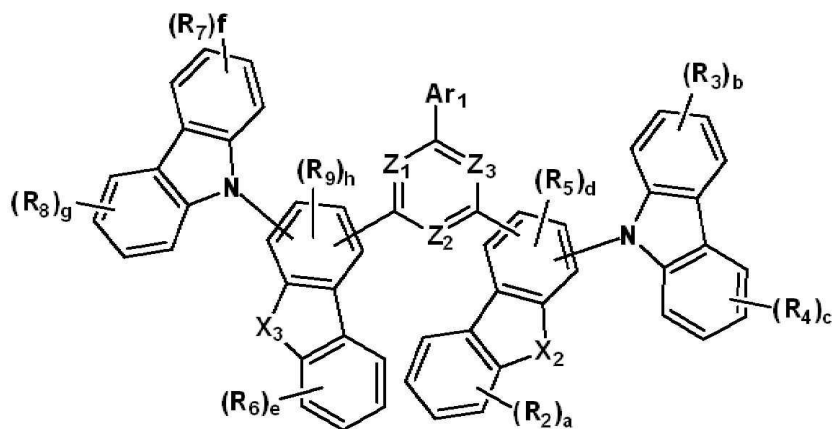
Z₁ 내지 Z₃, R₂ 내지 R₅, a 내지 d 및 X₁은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 11

제7항에 있어서,

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

[화학식 1-3]



상기 화학식 1-3에서,

X₂ 및 X₃은 각각 독립적으로 0 또는 S이고,

R₂ 내지 R₉는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

a 내지 c 및 e 내지 g는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

d 및 h는 각각 독립적으로 0 이상 2 이하의 정수이며,

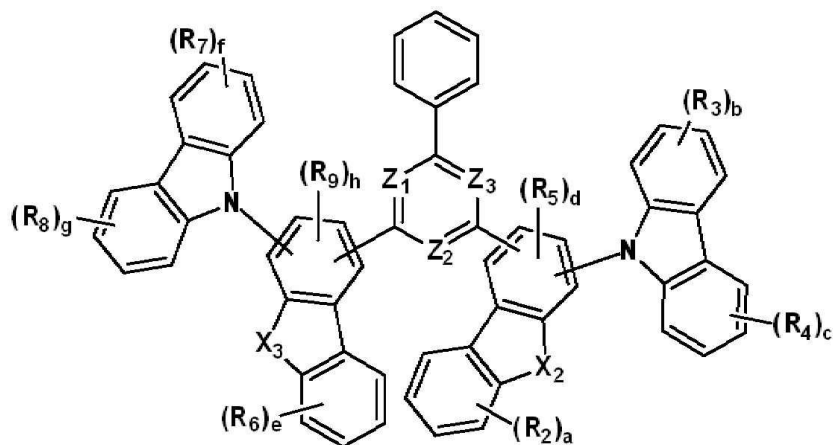
Z₁ 내지 Z₃, 및 Ar₁은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 12

제7항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-4로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-4]



상기 화학식 1-4에서,

X₂ 및 X₃은 각각 독립적으로 0 또는 S이고,

R₂ 내지 R₉은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

a 내지 c 및 e 내지 g는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

d 및 h는 각각 독립적으로 0 이상 2 이하의 정수이며,

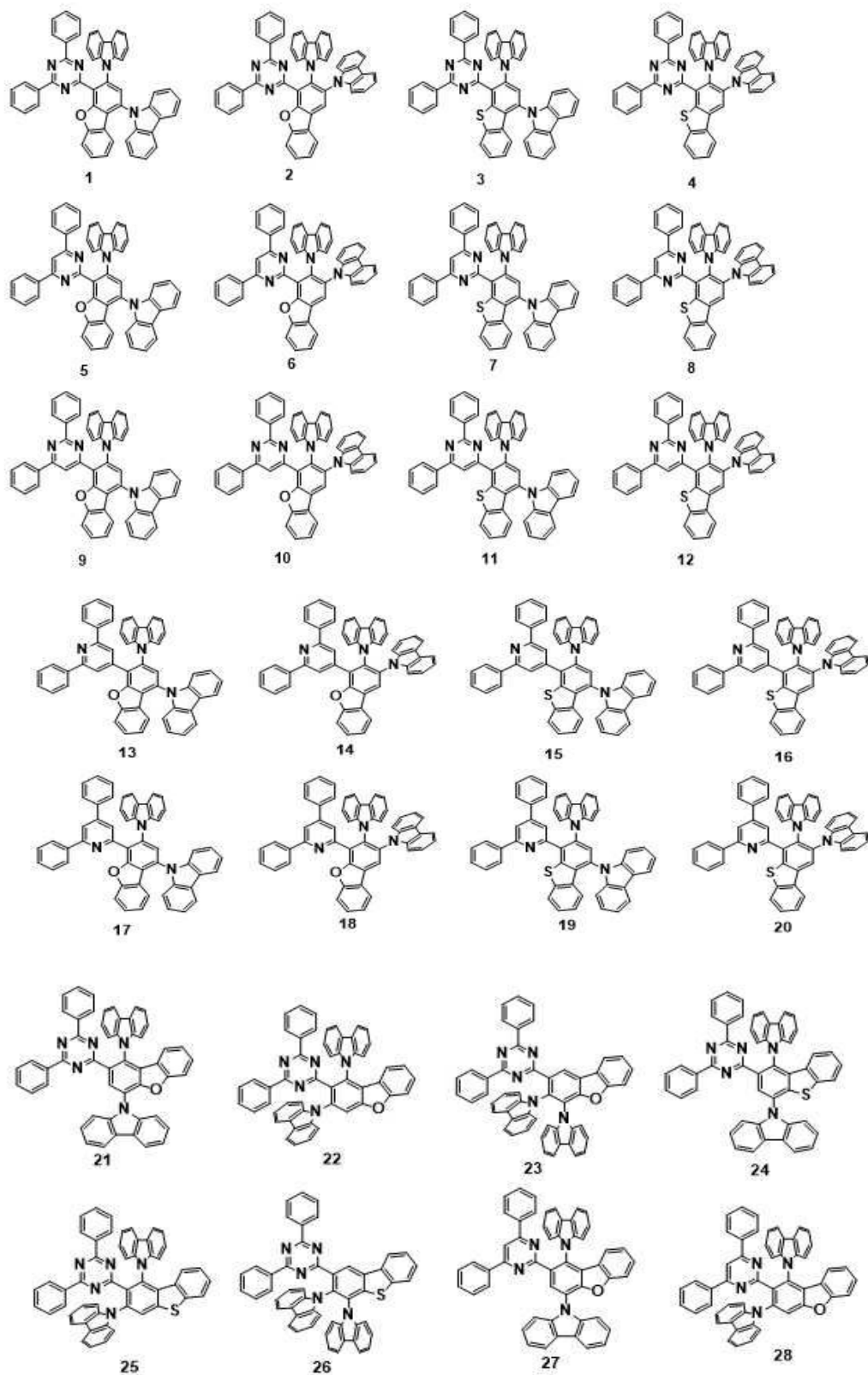
Z₁ 내지 Z₃은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

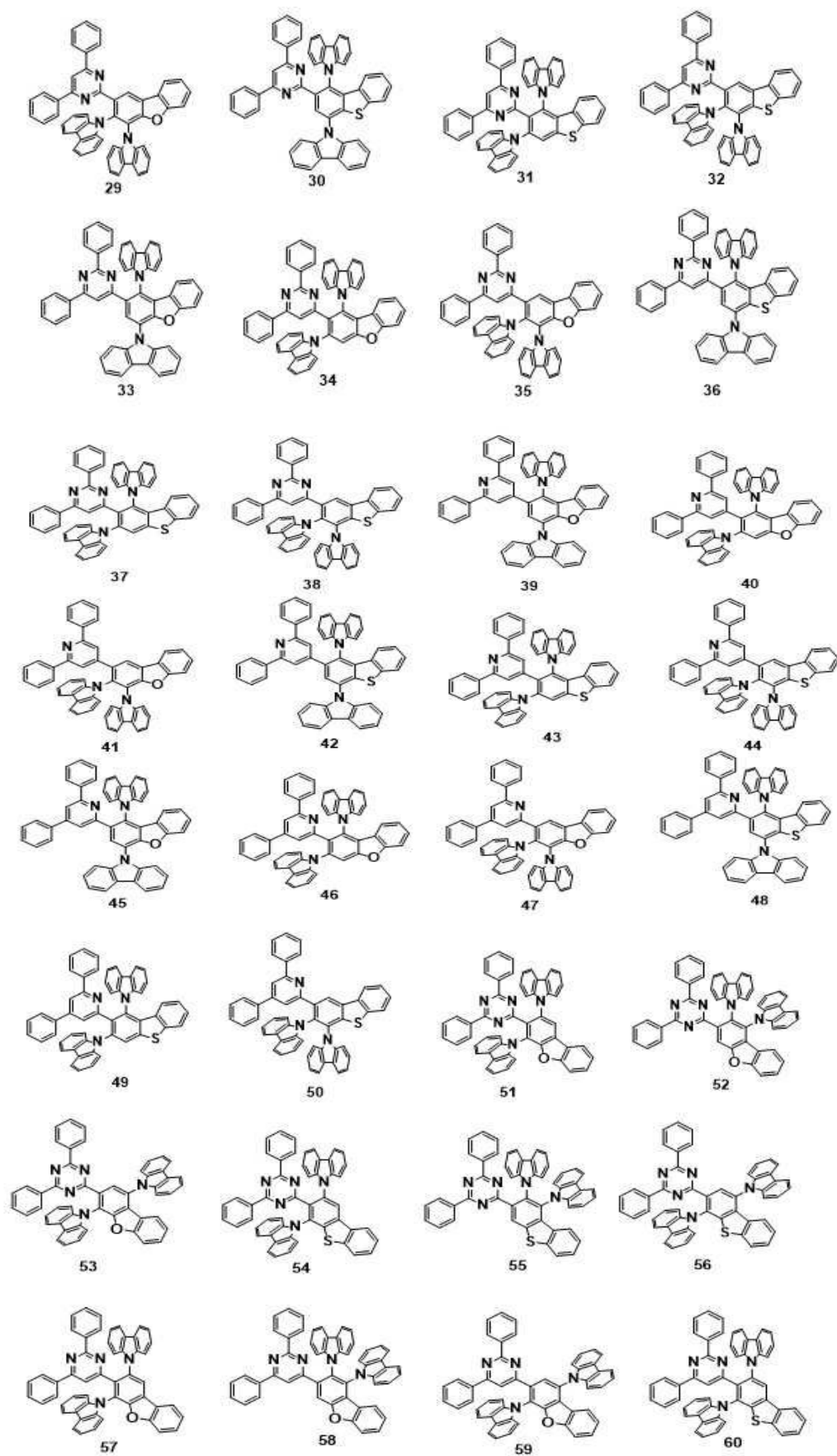
청구항 13

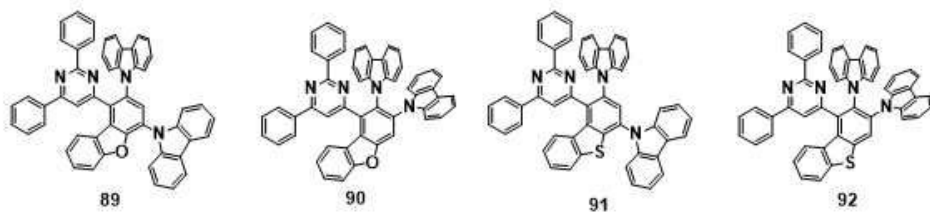
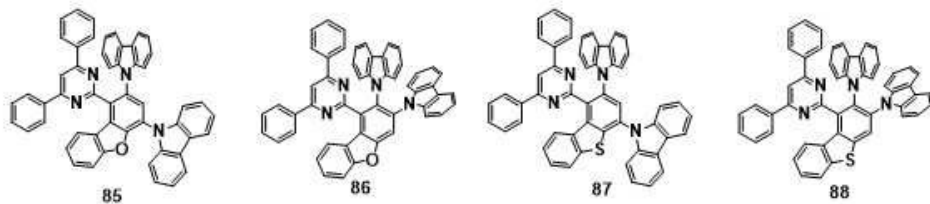
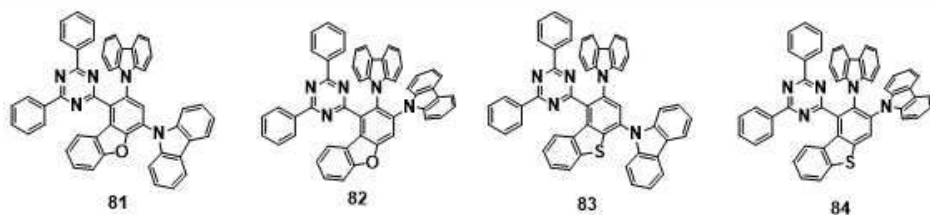
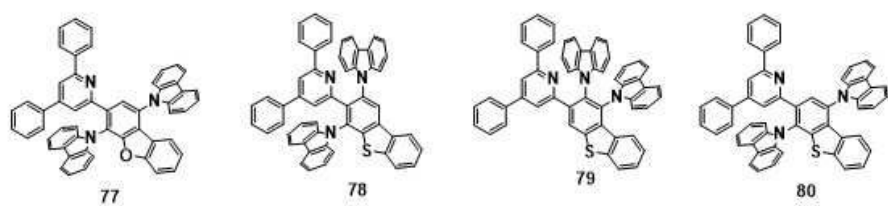
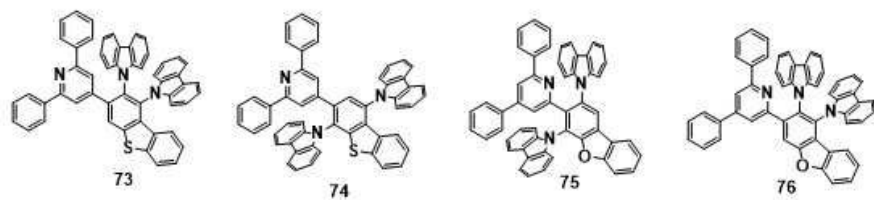
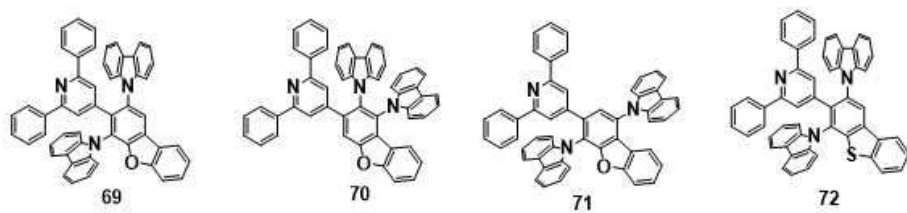
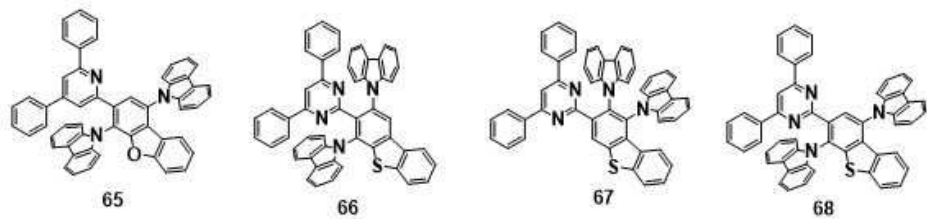
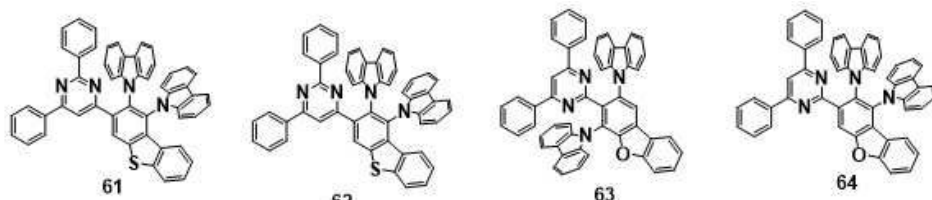
제1항에 있어서,

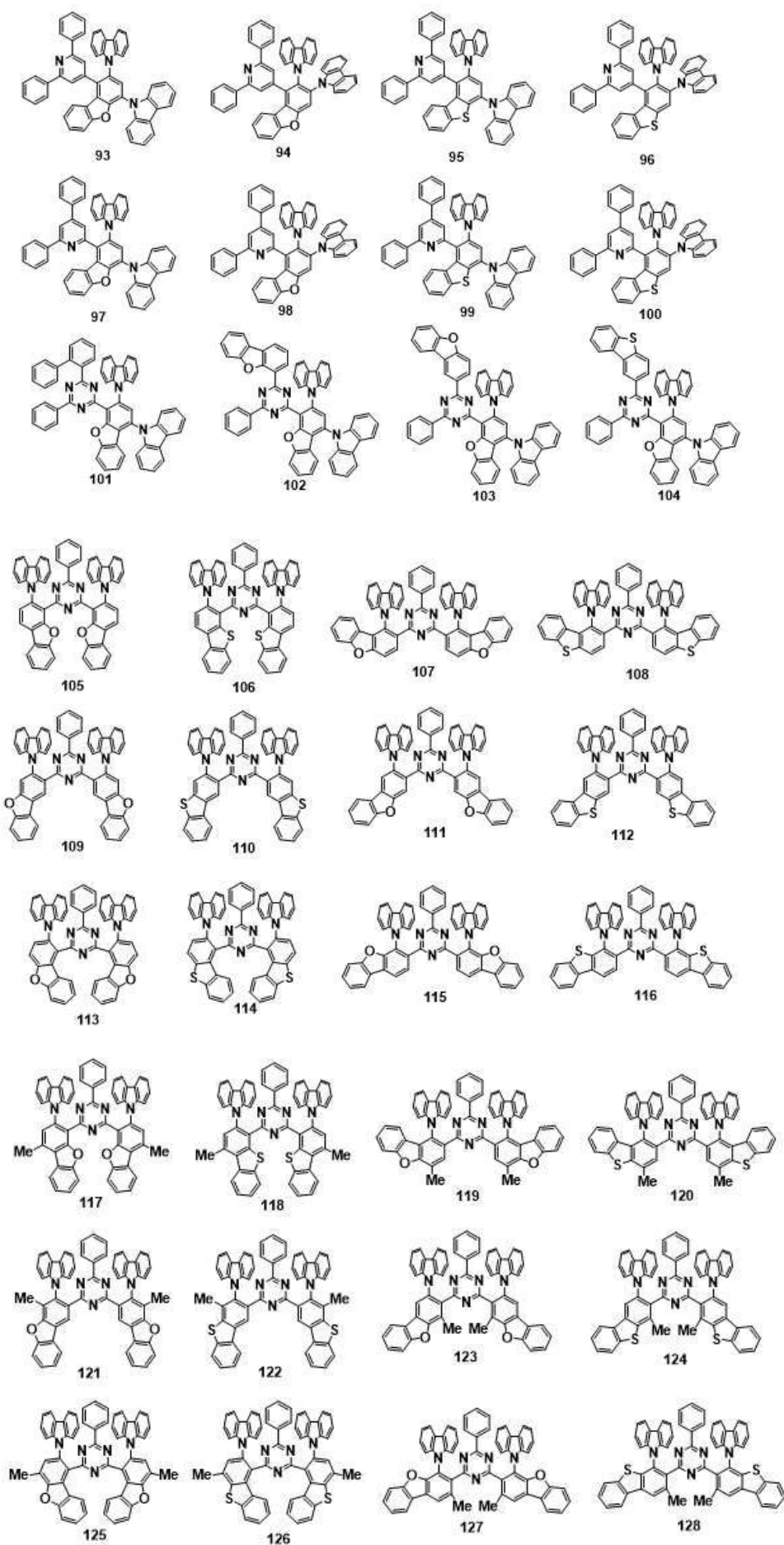
상기 헤테로환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것인 유기 전계 발광 소자:

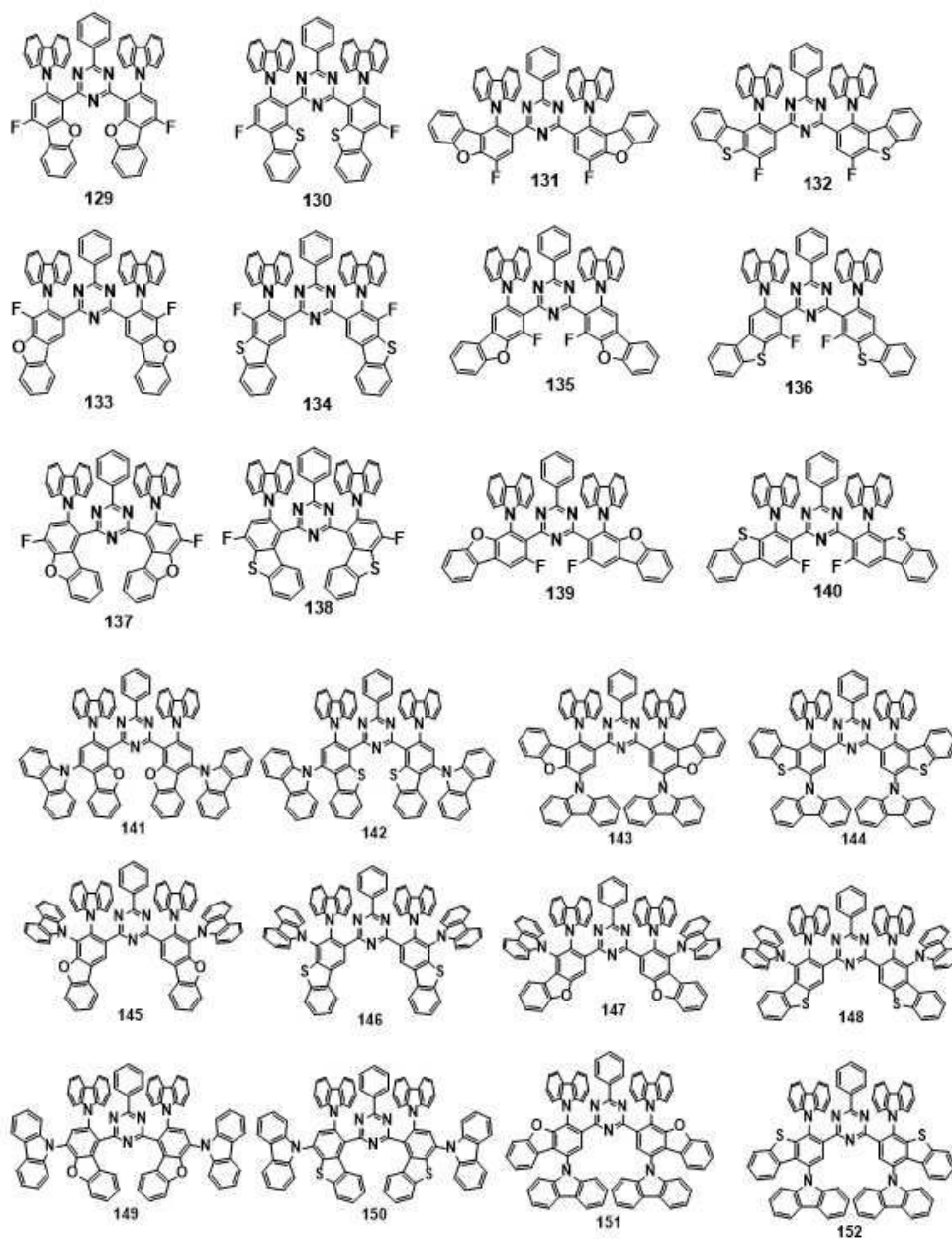
[화합물군 1]

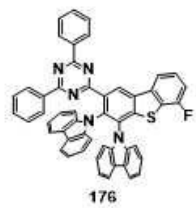
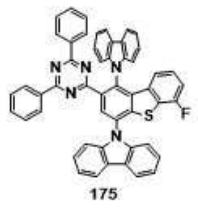
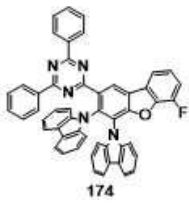
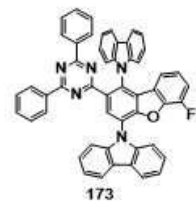
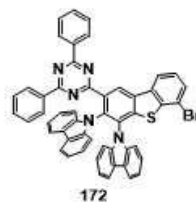
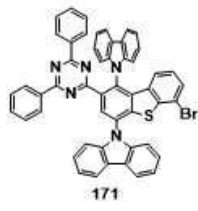
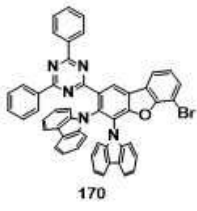
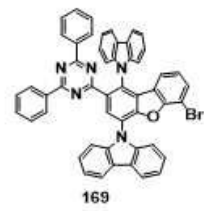
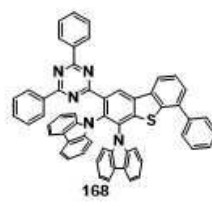
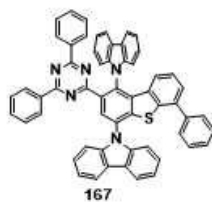
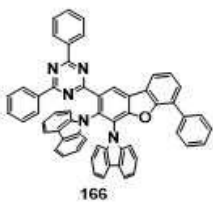
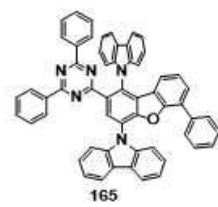
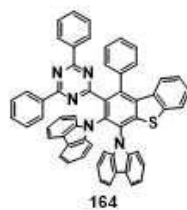
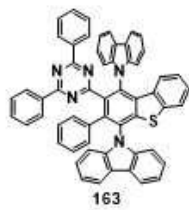
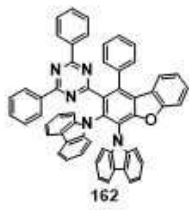
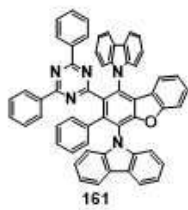
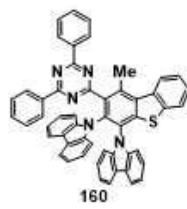
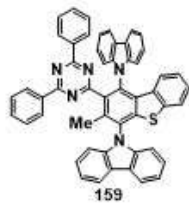
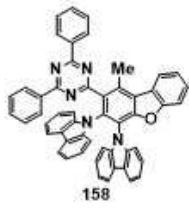
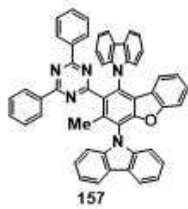
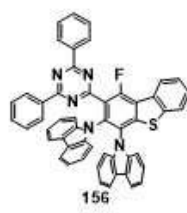
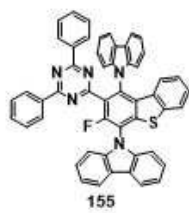
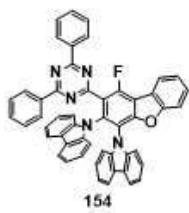
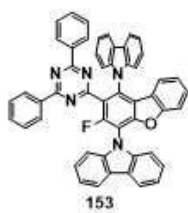


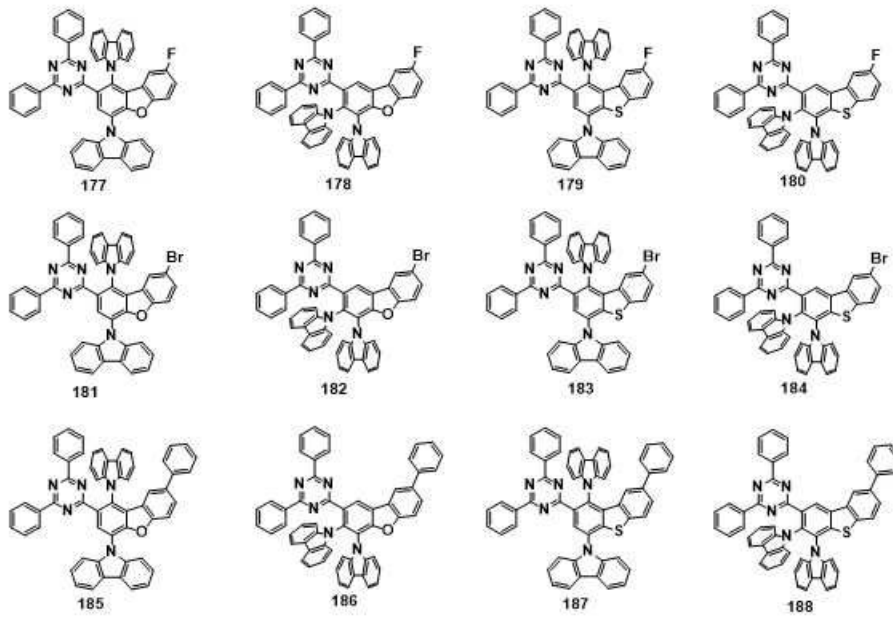












청구항 14

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

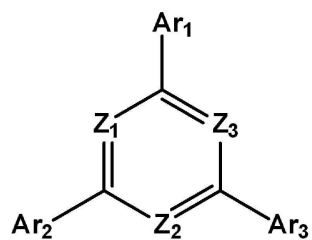
상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

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

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z_1 내지 Z_3 는 각각 독립적으로 CR_1 또는 N이고,

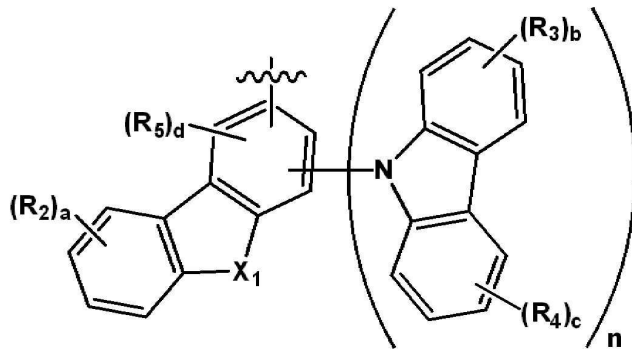
Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이며,

R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 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,

Ar_1 내지 Ar_3 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 헤테로아릴기이며,

Ar_1 내지 Ar_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X_1 은 0 또는 S이고,

n 은 1 이상 3 이하의 정수이며,

a 내지 c 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

d 는 0 이상 2 이하의 정수이며,

R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

Ar_1 내지 Ar_3 중 1개가 상기 화학식 2로 표시될 경우, n 은 2 또는 3이고,

상기 화학식 2의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 상기 화학식 1과 오르쏘(ortho) 관계로 치환된다.

청구항 15

제14항에 있어서,

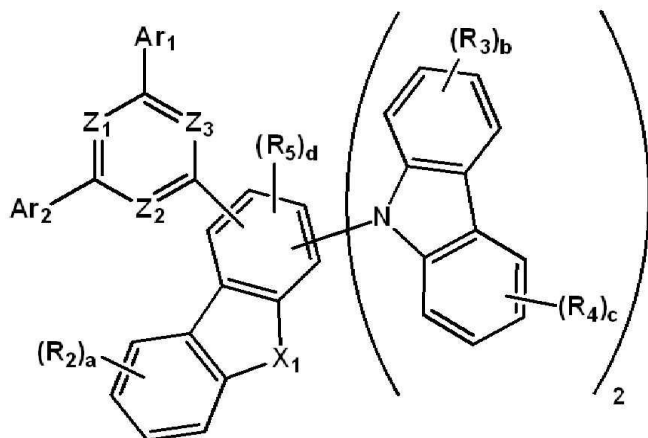
Z_1 내지 Z_3 는 각각 N인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 16

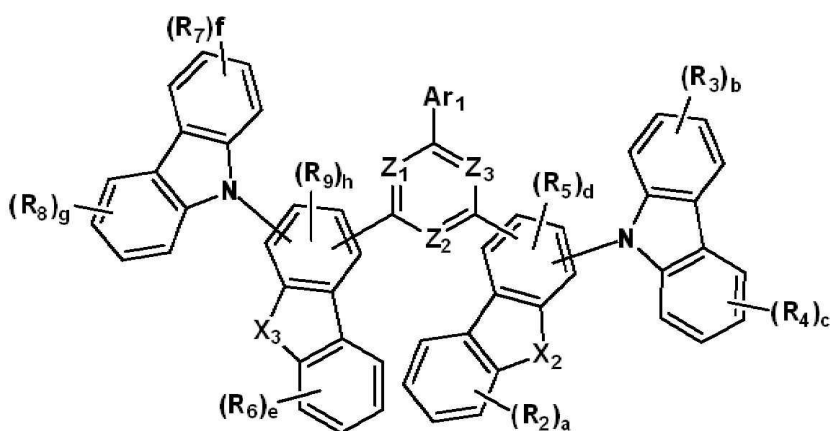
제14항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-3로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-1]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 및 1-3에서,

Z₁ 내지 Z₃, Ar₁, Ar₂, R₂ 내지 R₅, a 내지 d 및 X₁은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하고,

상기 화학식 1-3에서,

X₂ 및 X₃은 각각 독립적으로 0 또는 S이고,

R₆ 내지 R₉은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

e 내지 g는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

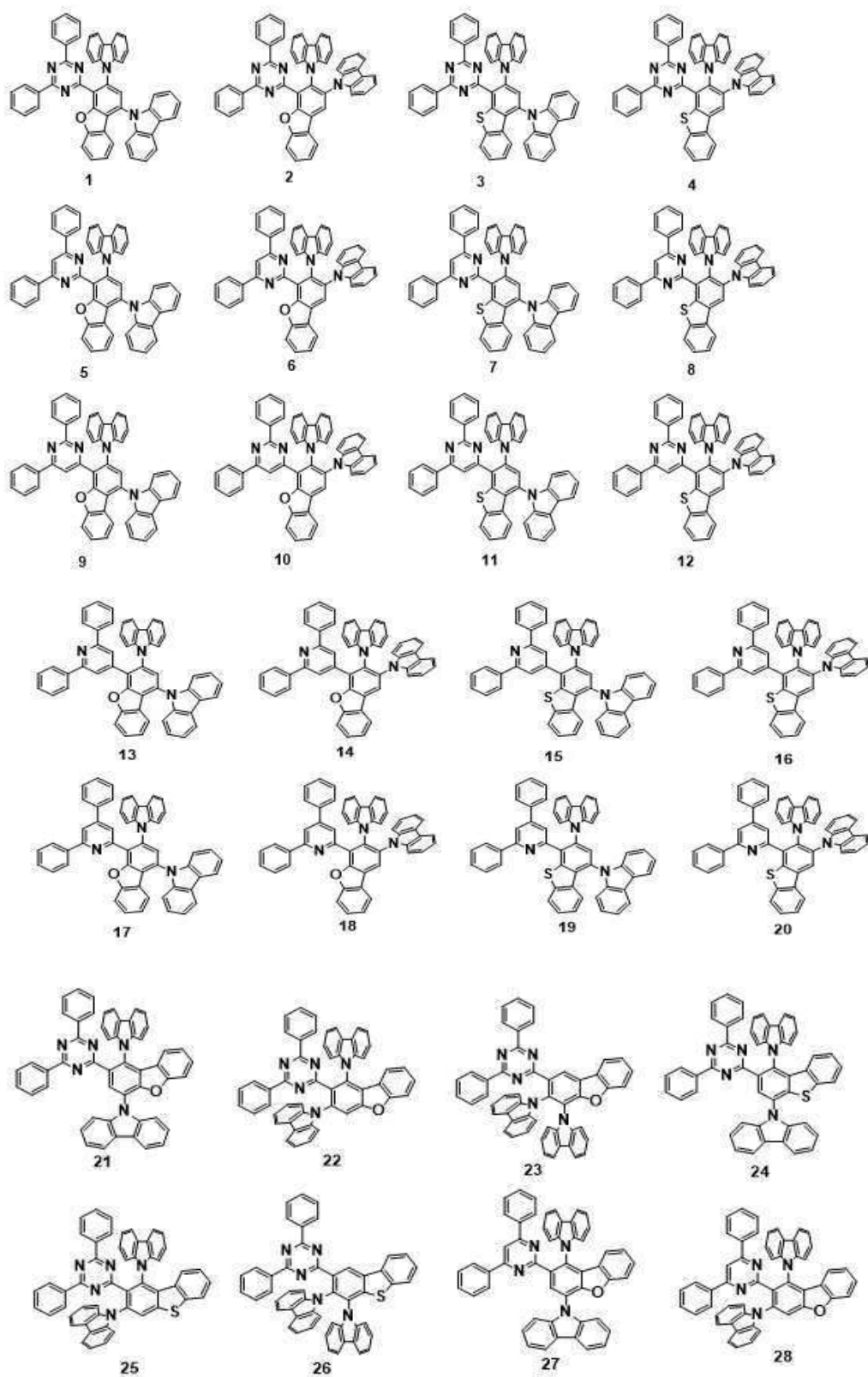
h는 0 이상 2 이하의 정수이다.

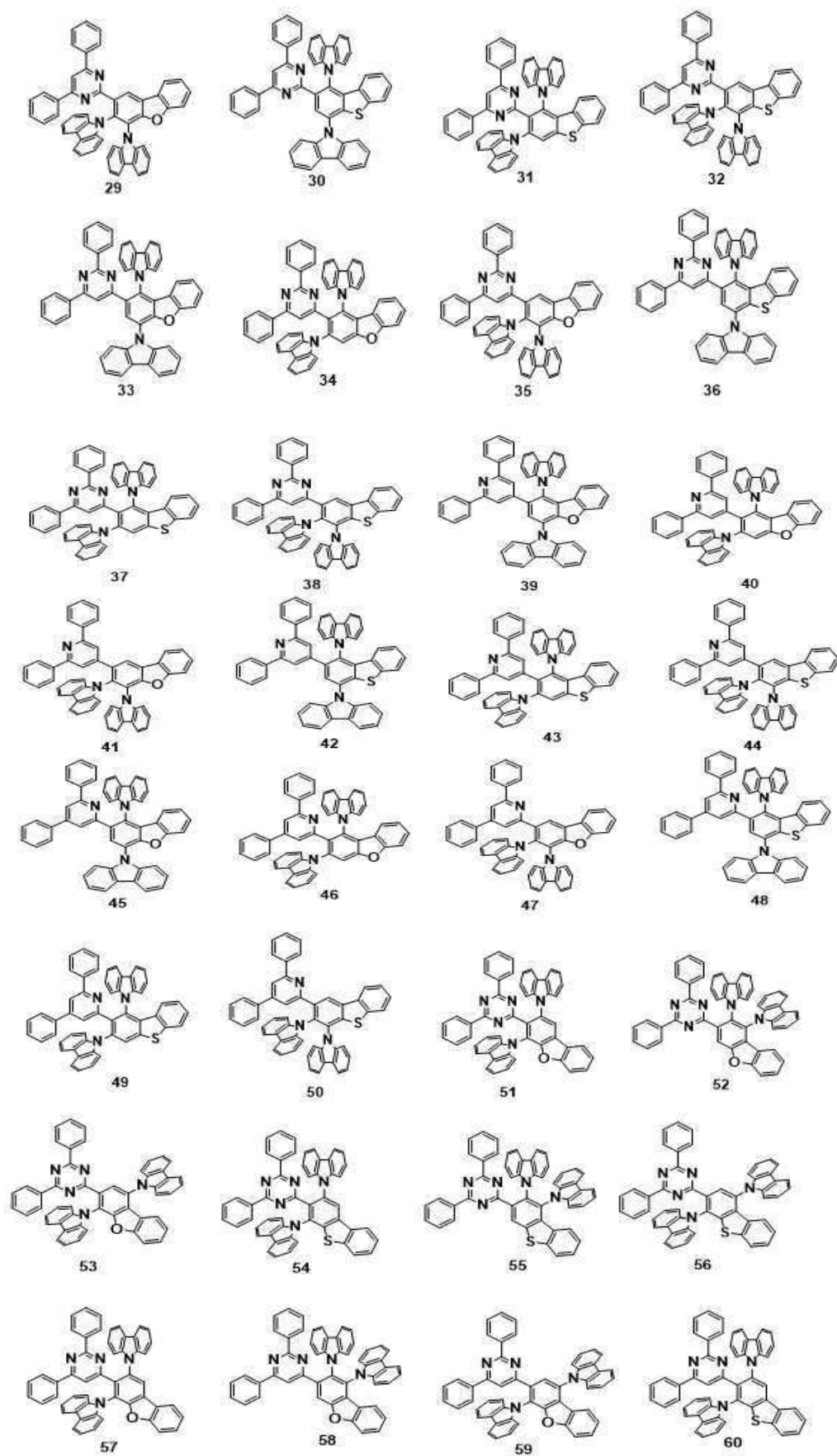
청구항 17

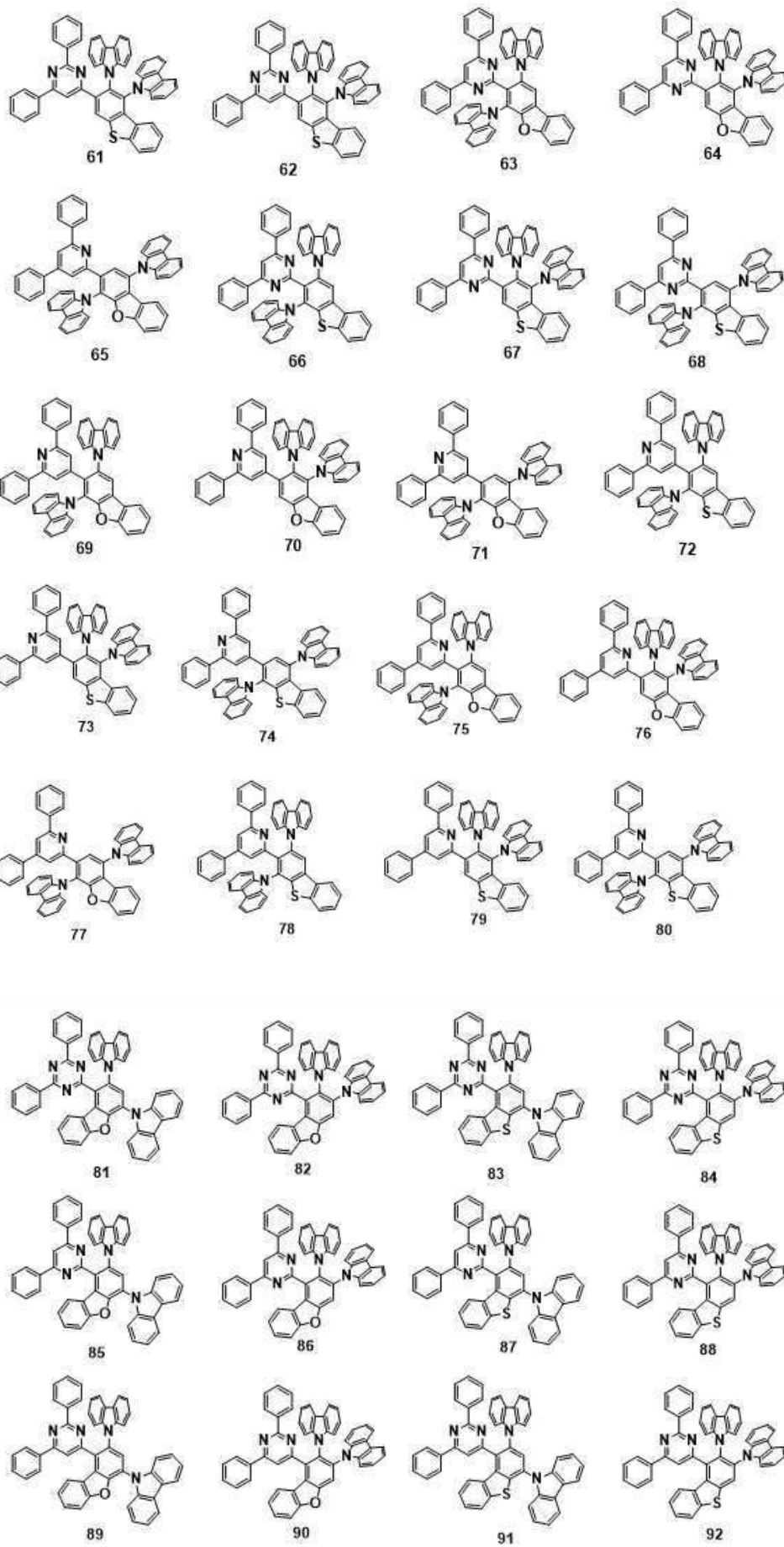
제14항에 있어서,

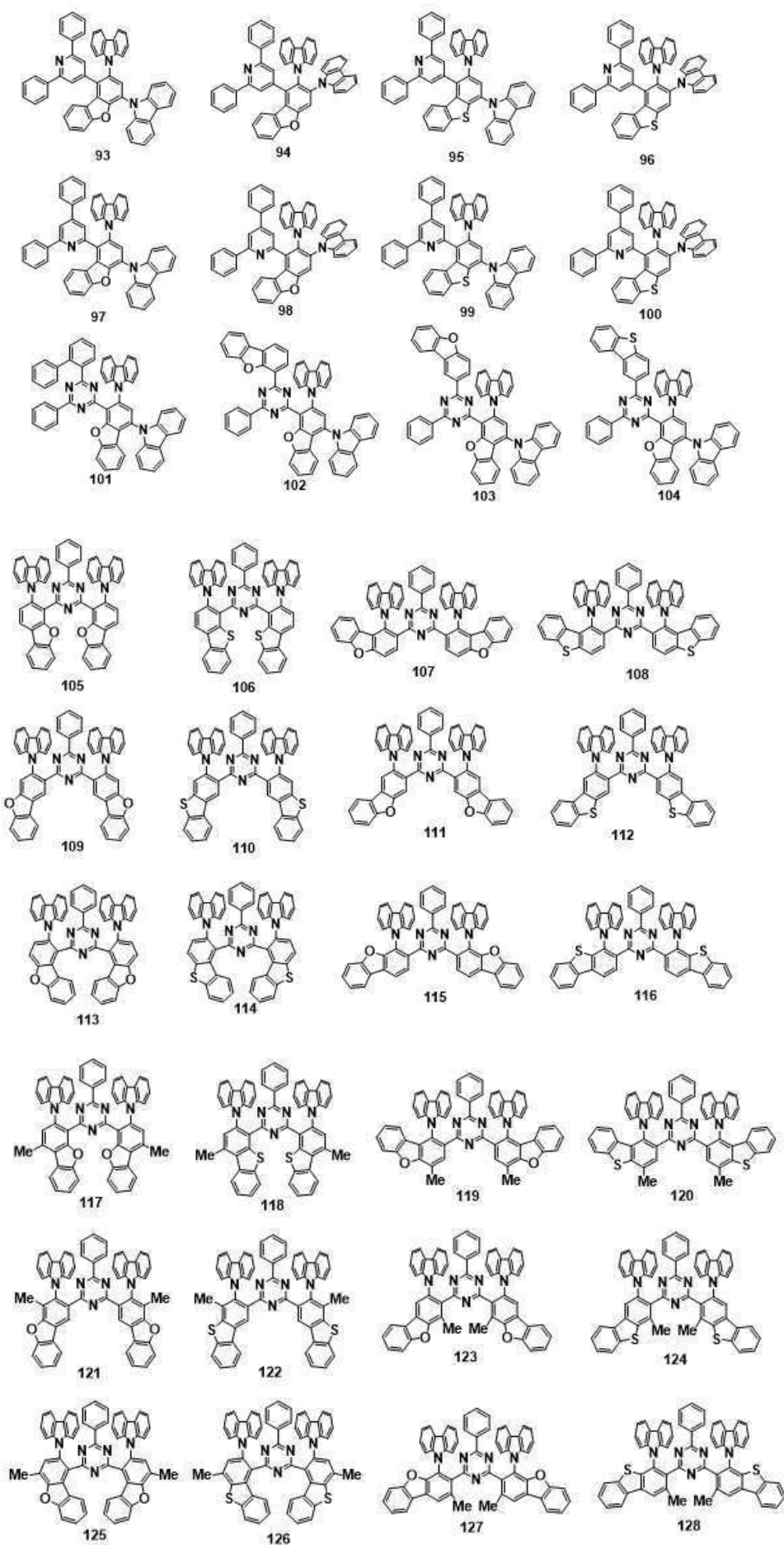
상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2 또는 1-4로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

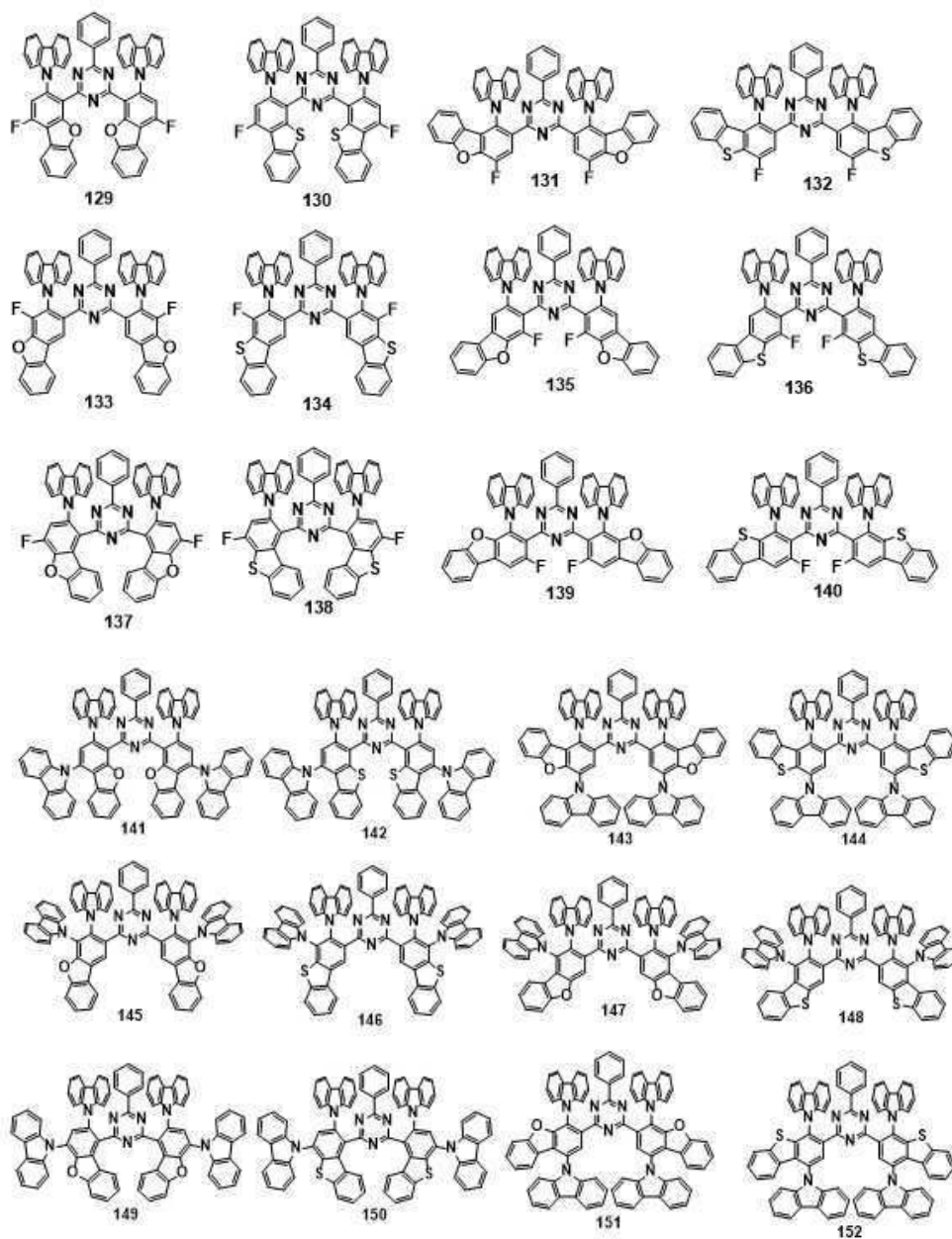
[화합물군 1]

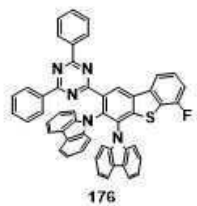
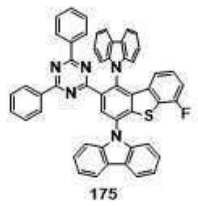
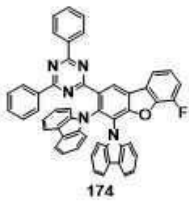
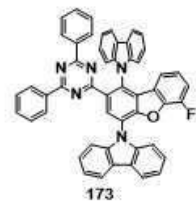
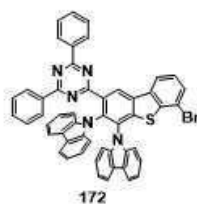
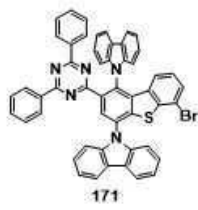
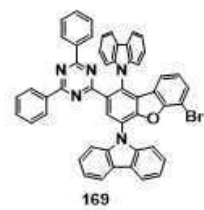
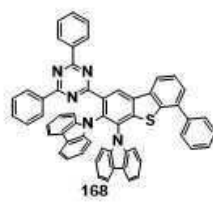
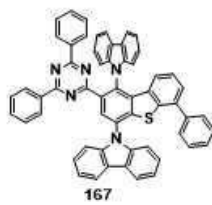
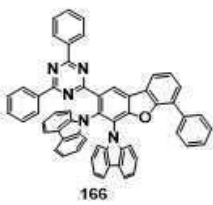
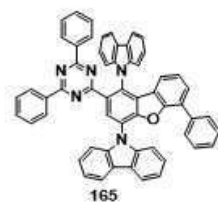
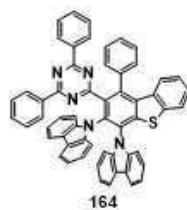
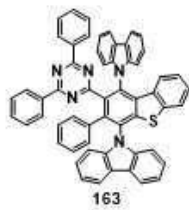
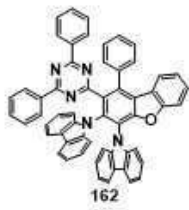
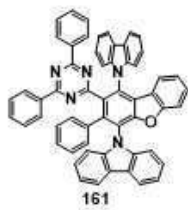
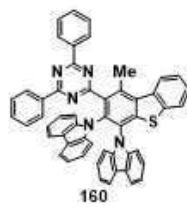
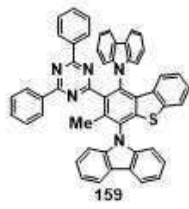
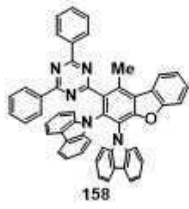
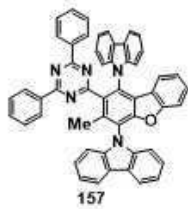
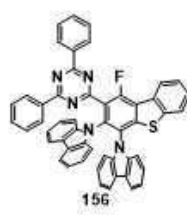
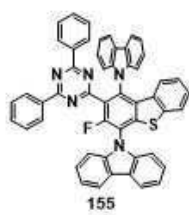
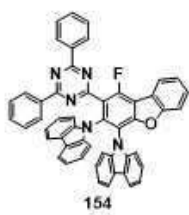
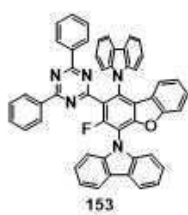


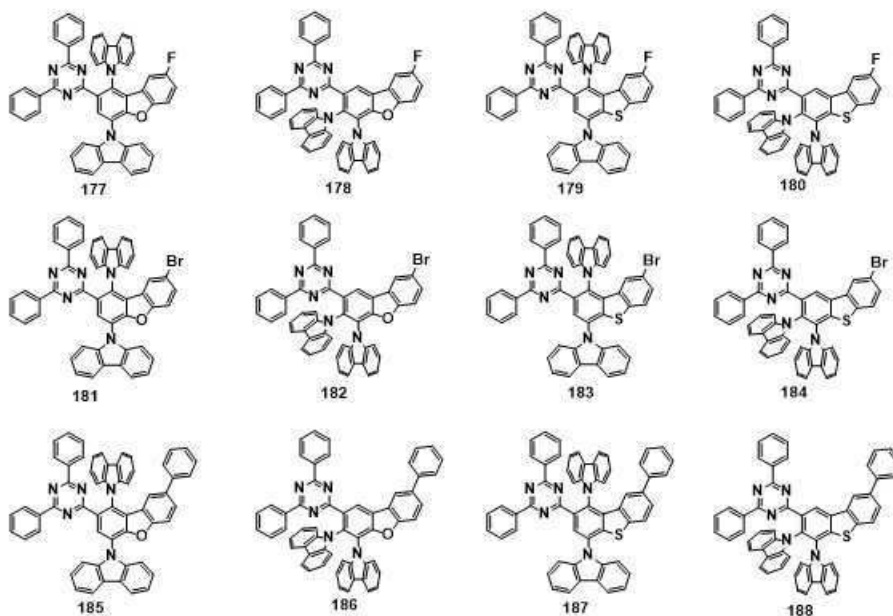








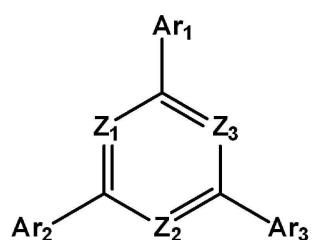




청구항 19

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z₁ 내지 Z₃는 각각 독립적으로 CR₁ 또는 N이고,

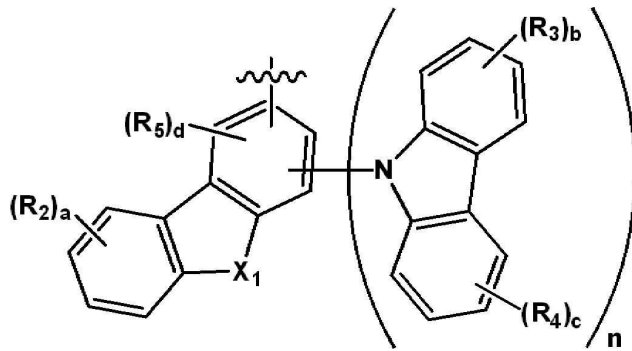
Z₁ 내지 Z₃ 중 적어도 하나는 N이며,

R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 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,

Ar₁ 내지 Ar₃는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

Ar₁ 내지 Ar₃ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X_1 은 0 또는 S이고,

n 은 1 이상 3 이하의 정수이며,

a 내지 c 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

d 는 0 이상 2 이하의 정수이며,

R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

Ar_1 내지 Ar_3 중 1개가 상기 화학식 2로 표시될 경우, n 은 2 또는 3이고,

상기 화학식 2의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 상기 화학식 1과 오르쏘(ortho) 관계로 치환된다.

청구항 20

제19항에 있어서,

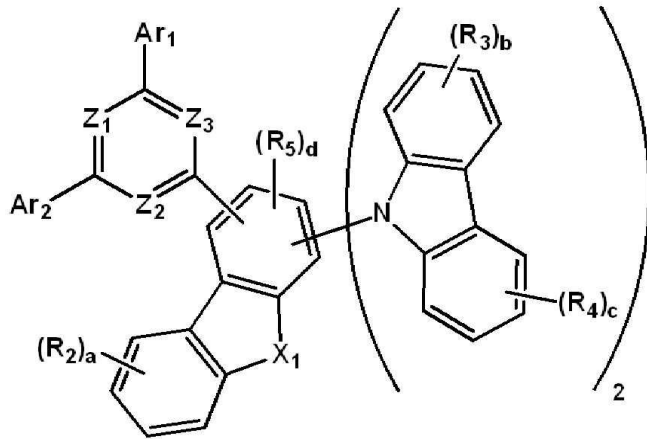
Z_1 내지 Z_3 는 각각 N인 것인 헤테로환 화합물.

청구항 21

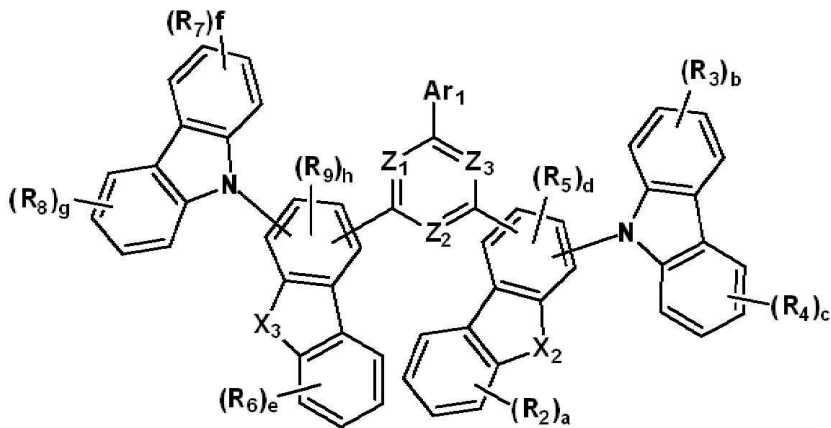
제19항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-3로 표시되는 것인 헤테로환 화합물:

[화학식 1-1]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 및 1-3에서,

Z₁ 내지 Z₃, Ar₁, Ar₂, R₂ 내지 R₅, a 내지 d 및 X₁은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하고,

상기 화학식 1-3에서,

X₂ 및 X₃은 각각 독립적으로 0 또는 S이고,

R₆ 내지 R₉은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

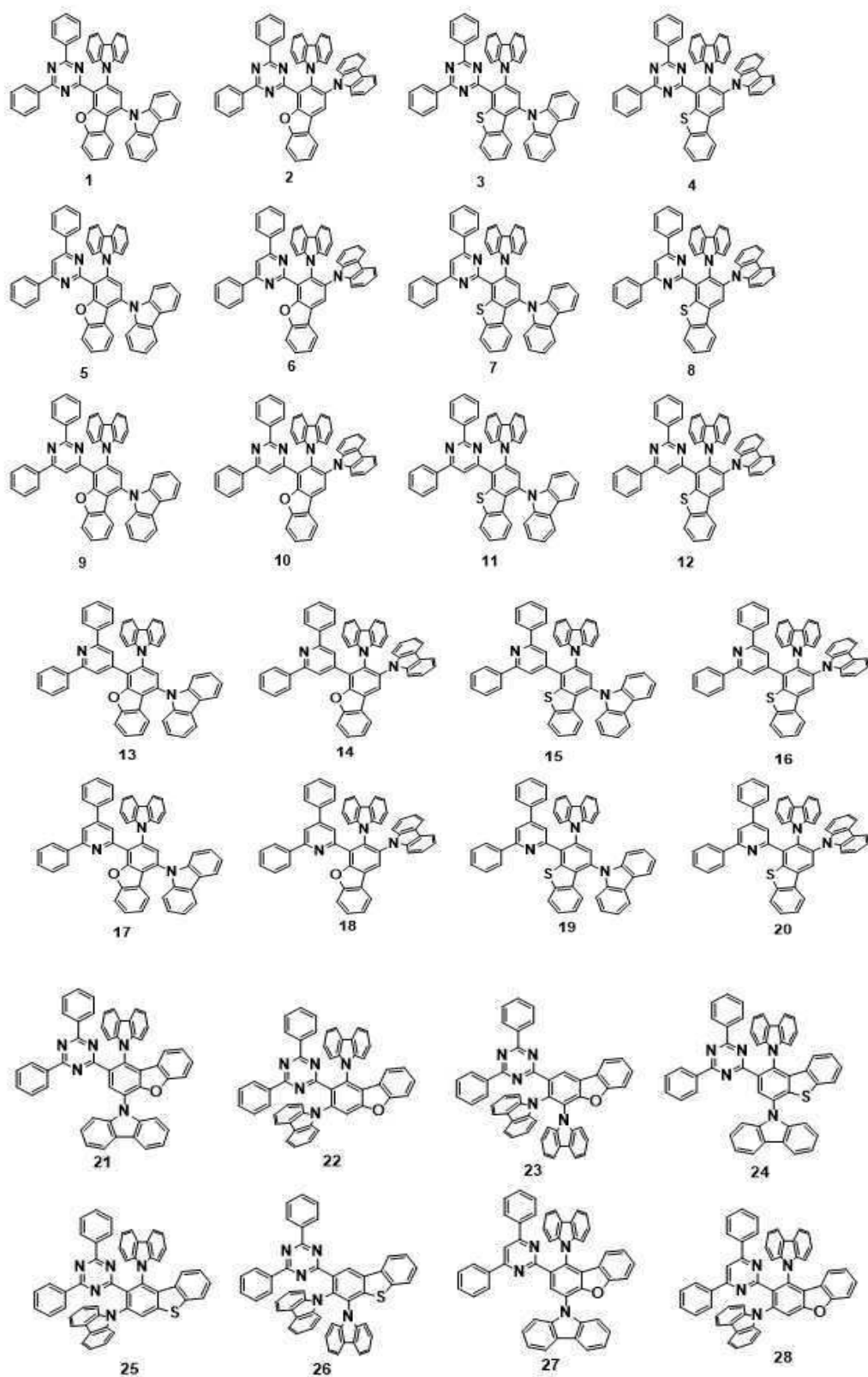
e 내지 g는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

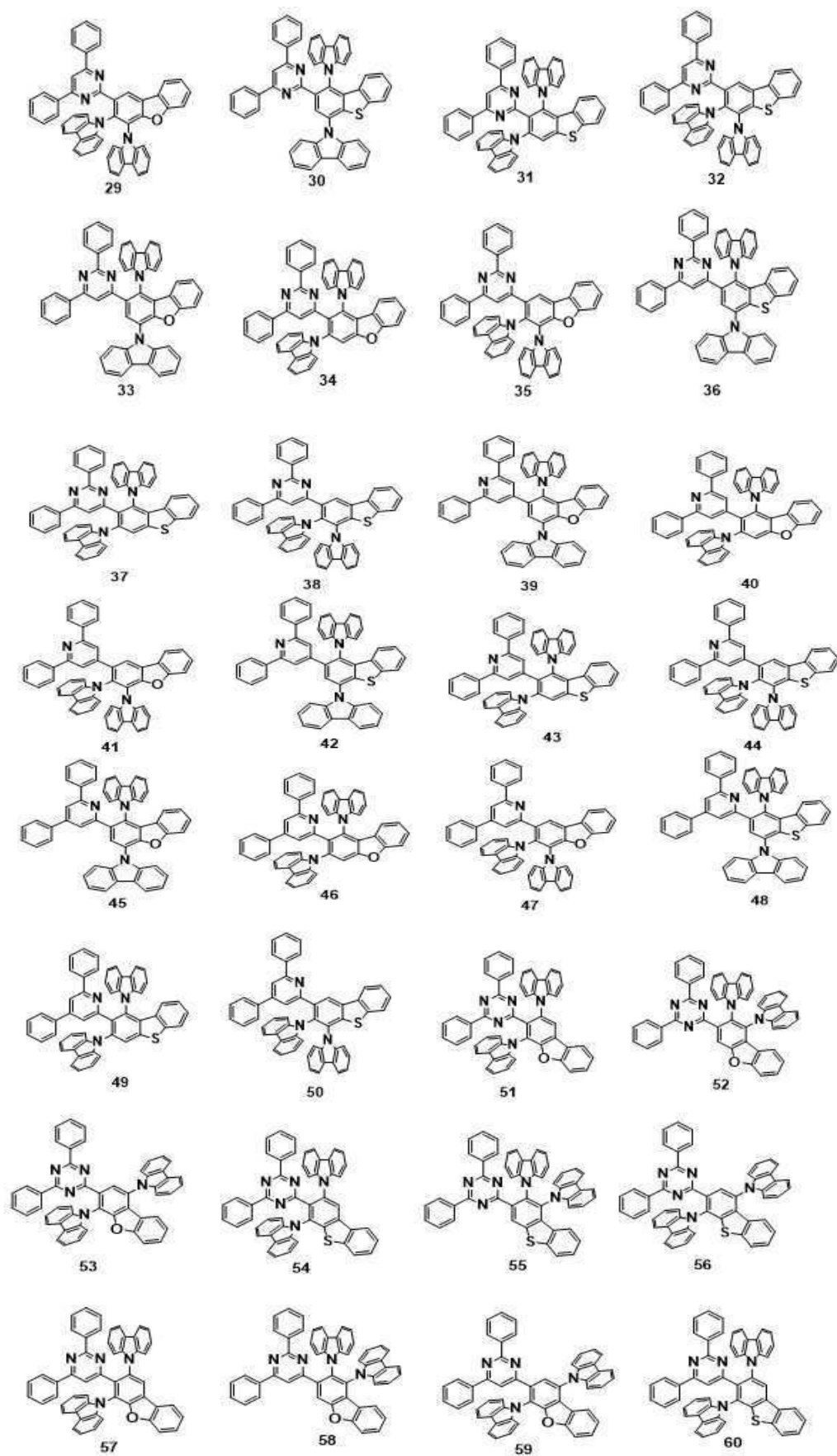
h는 0 이상 2 이하의 정수이다.

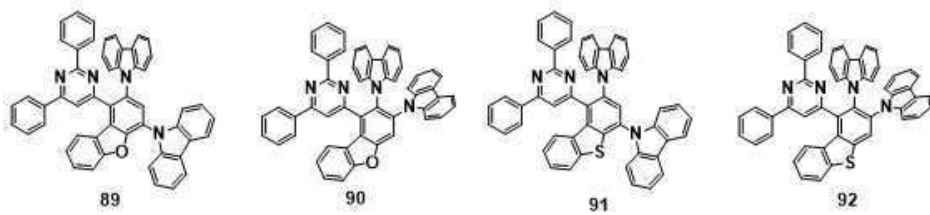
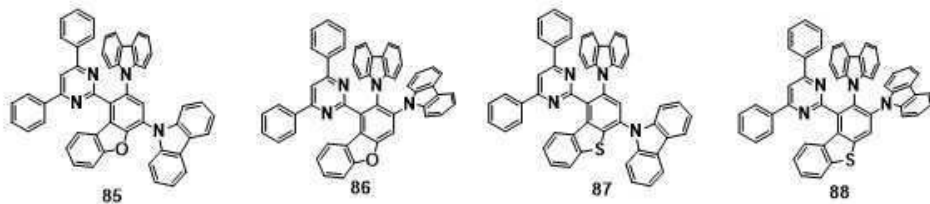
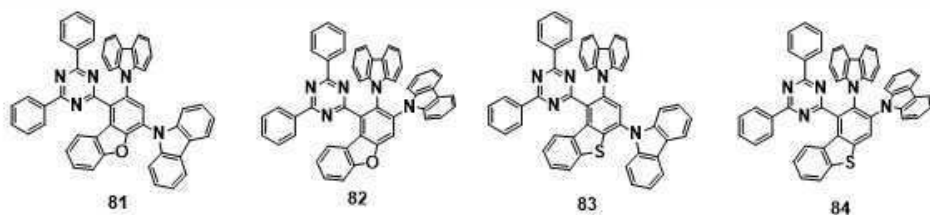
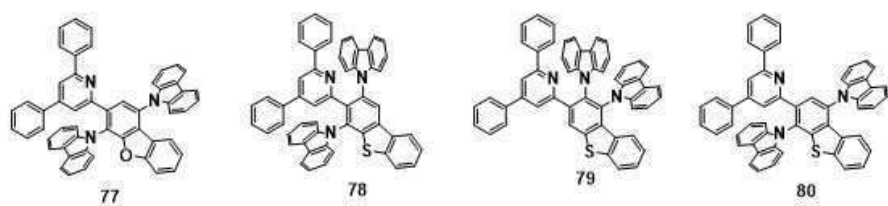
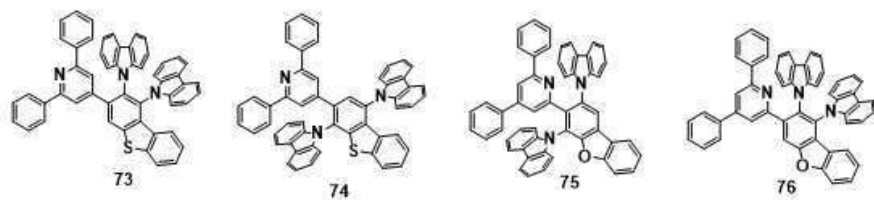
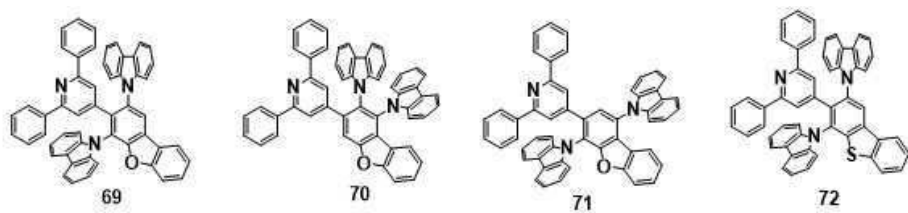
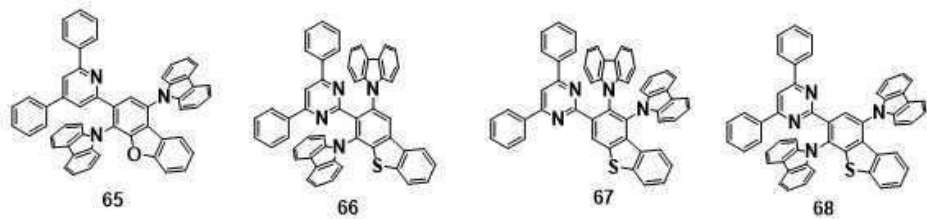
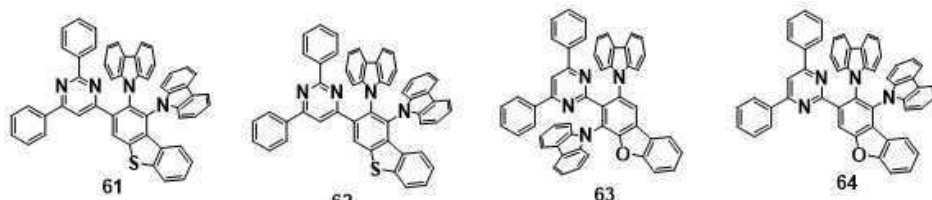
청구항 22

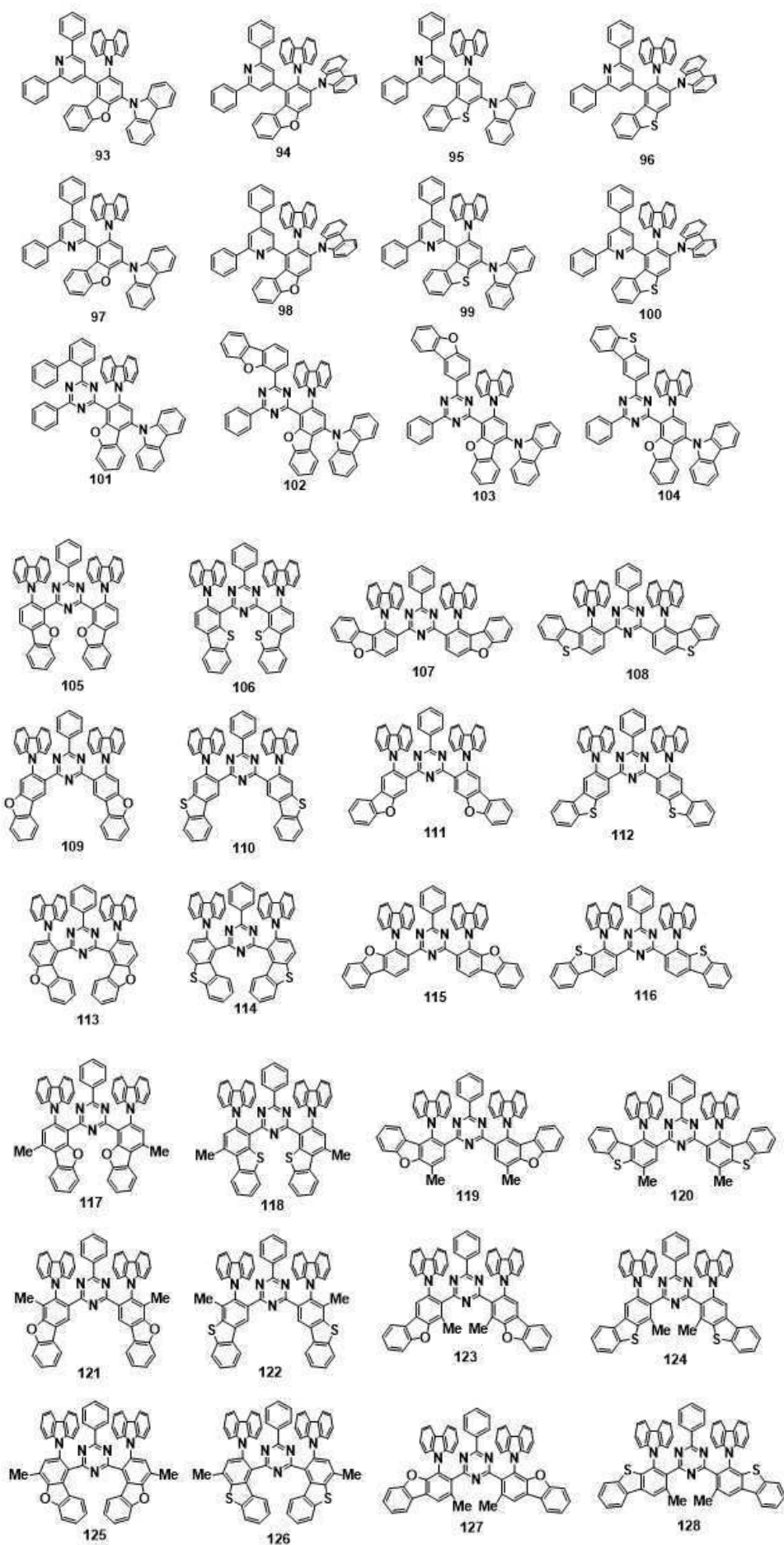
제19항에 있어서,

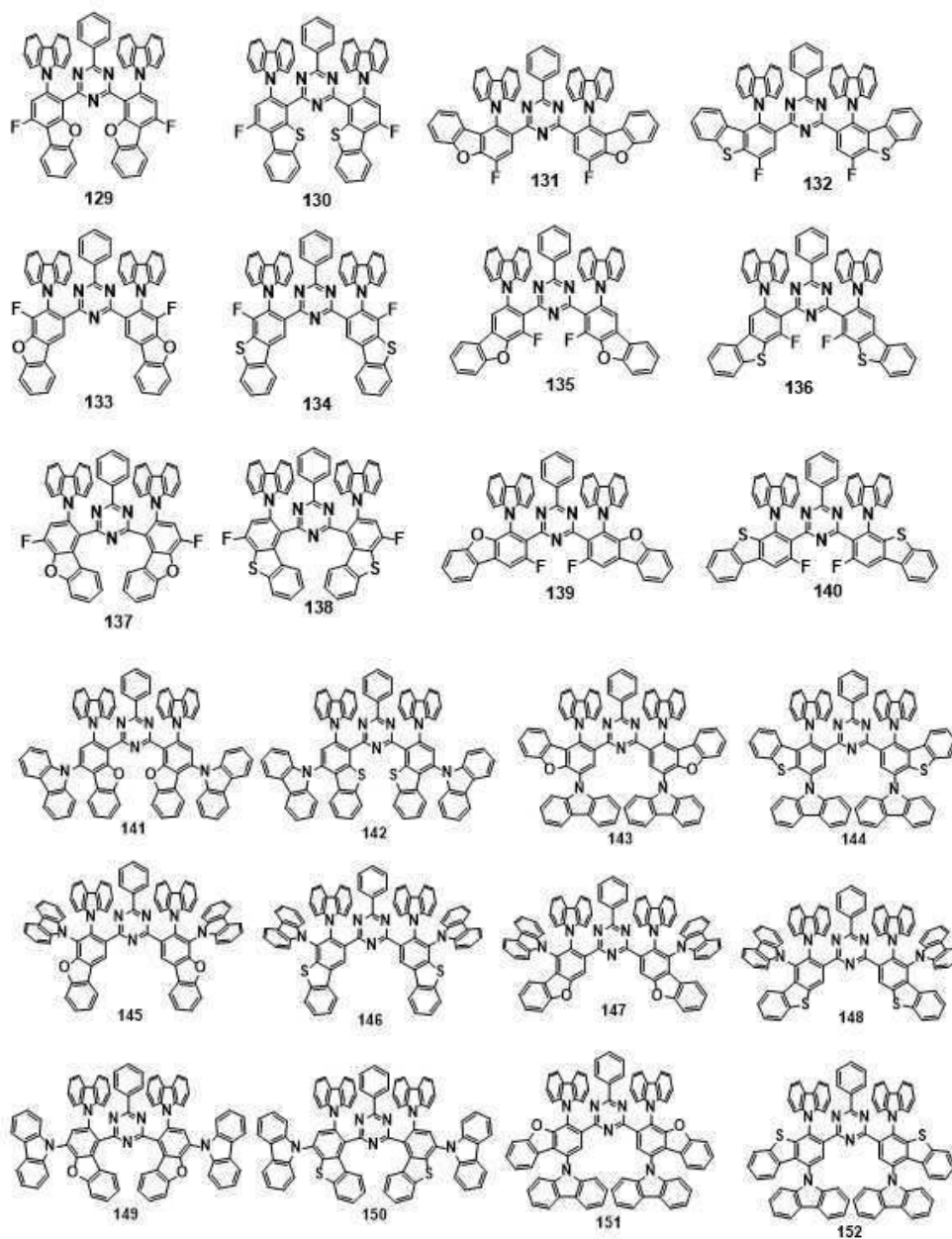
상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2 또는 1-4로 표시되는 것인 헤테로환 화합물:

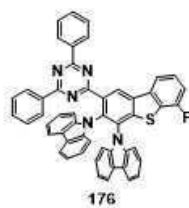
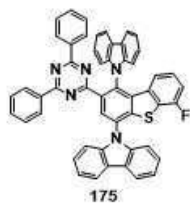
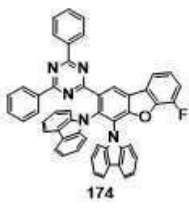
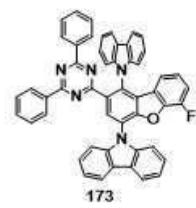
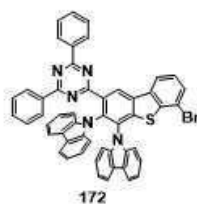
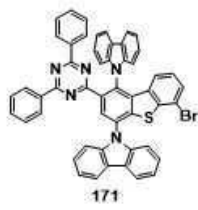
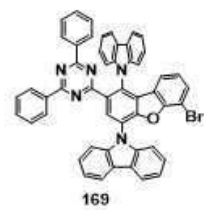
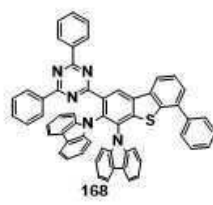
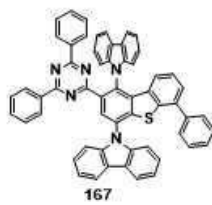
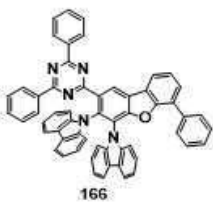
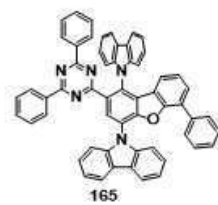
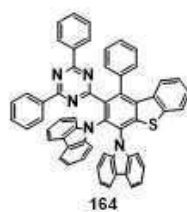
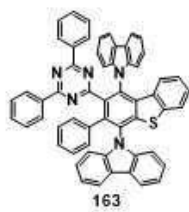
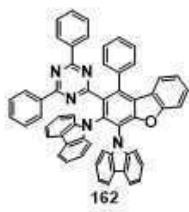
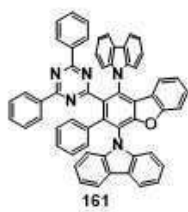
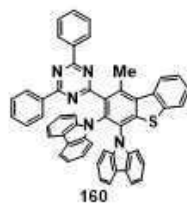
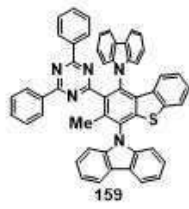
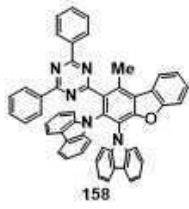
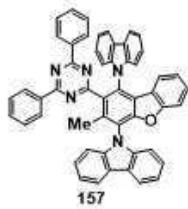
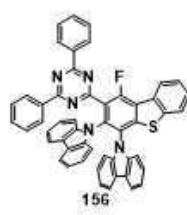
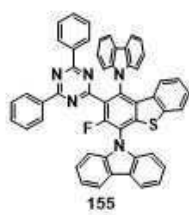
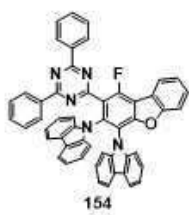
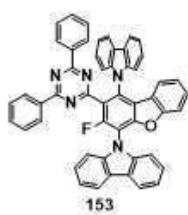


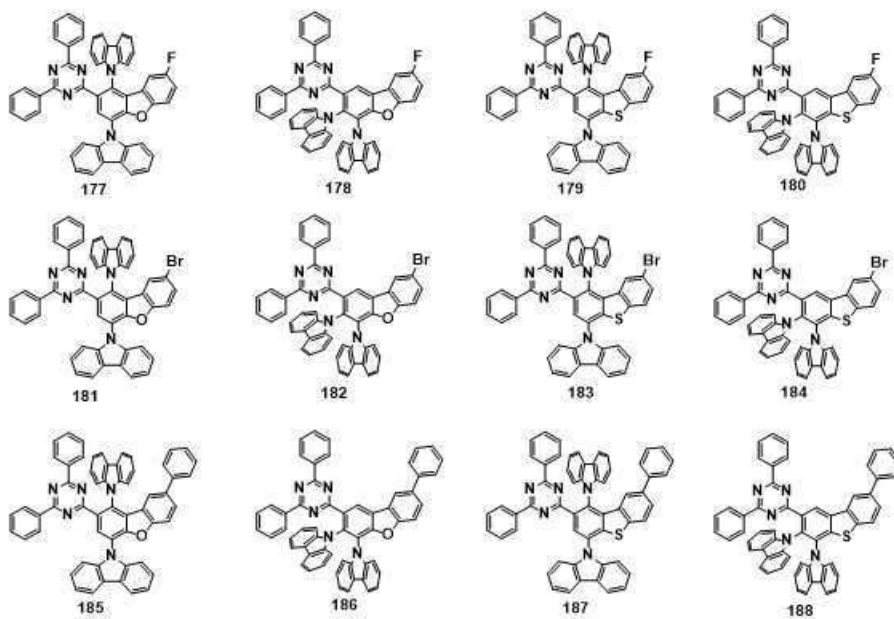












발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0002] 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 표시 장치(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 활발히 이루어지고 있다. 유기 전계 발광 표시 장치는 액정 표시 장치 등과는 다르게, 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. 또한, 유기 전계 발광 소자는 이상에 설명한 구성에 한정되지 않고, 여러 가지의 변형이 가능하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0004] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 헤테로환 화합물을 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0005] 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 함질소 단환 고리, 링커, 및 2개 이상의 카바졸 모이어티를 포함하는 헤테로환 화합물을 포함하며, 링커는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고, 카바졸 모이어티 중 적어도 하나와 함질소 단환 고리는 각각 링커에 오르쏘(ortho) 관계로 치환되는 것인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0006] 함질소 단환 고리는 치환 또는 비치환된 피리딘기, 치환 또는 비치환된 피리미딘기, 또는 치환 또는 비치환된

트리아진기일 수 있다.

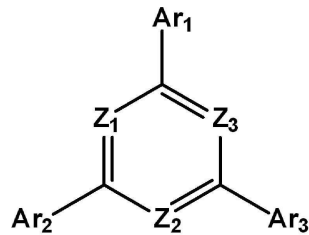
[0007] 헤테로환 화합물은 링커를 1개 또는 2개를 포함하는 것일 수 있다.

[0008] 함질소 단환 고리는 치환 또는 비치환된 페닐기로 1 이상 치환된 것일 수 있다.

[0009] 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 도펀트가 헤테로환 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 도펀트는 열 활성화 지연 형광 도펀트인 것일 수 있다.

[0010] 헤테로환 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것일 수 있다.

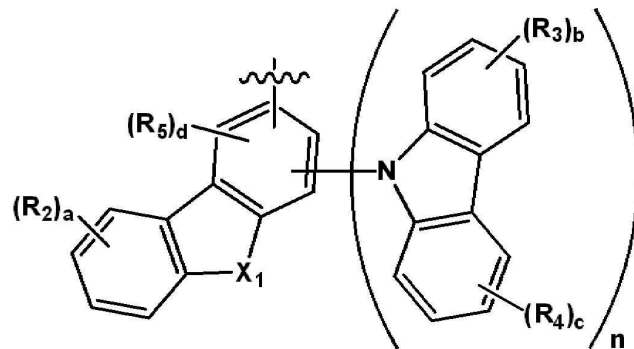
[0011] [화학식 1]



[0012]

[0013] 화학식 1에서, Z_1 내지 Z_3 는 각각 독립적으로 CR_1 또는 N이고, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이며, R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 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, Ar_1 내지 Ar_3 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 헤테로아릴기이며, Ar_1 내지 Ar_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다.

[0014] [화학식 2]



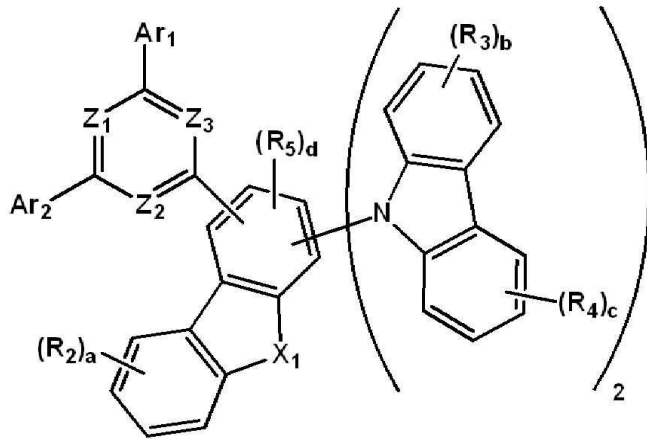
[0015]

[0016] 화학식 2에서, X_1 은 0 또는 S이고, n 은 1 이상 3 이하의 정수이며, a 내지 c 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d 는 0 이상 2 이하의 정수이며, R_2 내지 R_4 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0017] Z_1 내지 Z_3 는 각각 N인 것일 수 있다.

[0018] 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 것일 수 있다.

[0019] [화학식 1-1]

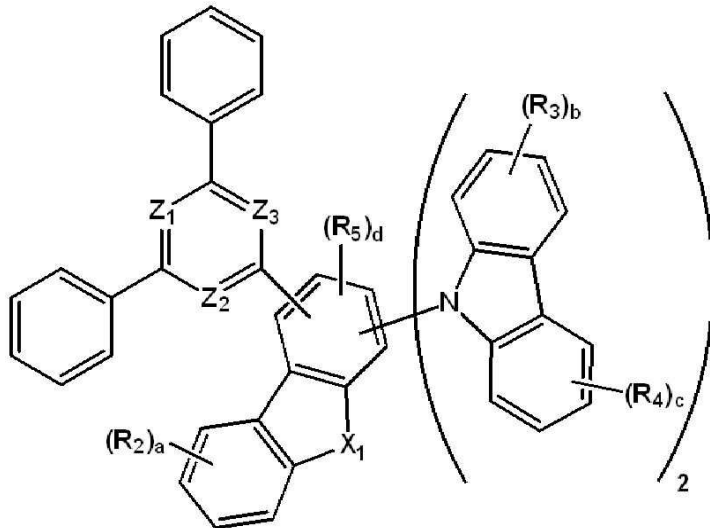


[0020]

[0021] 화학식 1-1에서, Z₁ 내지 Z₃, Ar₁, Ar₂, R₂ 내지 R₅, a 내지 d 및 X₁은 전술한 바와 동일하다.

[0022] 화학식 1은 하기 화학식 1-2로 표시되는 것일 수 있다.

[0023] [화학식 1-2]

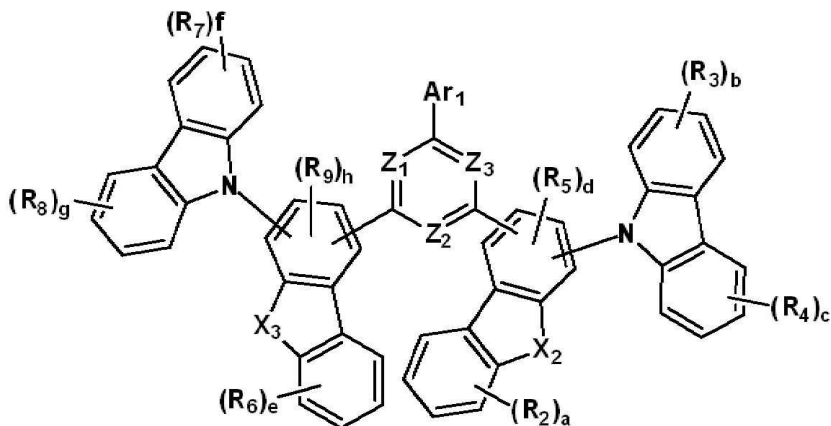


[0024]

[0025] 화학식 1-2에서, Z₁ 내지 Z₃, R₂ 내지 R₅, a 내지 d 및 X₁은 전술한 바와 동일하다.

[0026] 화학식 1은 하기 화학식 1-3으로 표시되는 것일 수 있다.

[0027] [화학식 1-3]

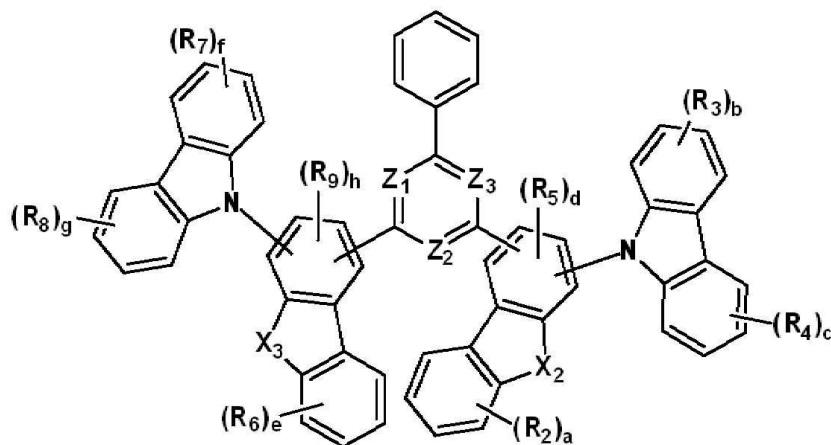


[0028]

[0029] 화학식 1-3에서, X_2 및 X_3 은 각각 독립적으로 0 또는 S이고, R_2 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, a 내지 c 및 e 내지 g는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d 및 h는 각각 독립적으로 0 이상 2 이하의 정수이며, Z_1 내지 Z_3 , 및 Ar_1 은 전술한 바와 동일하다.

[0030] 화학식 1은 하기 화학식 1-4로 표시되는 것일 수 있다.

[0031] [화학식 1-4]

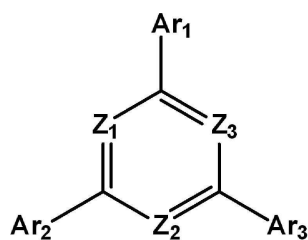


[0032]

[0033] 화학식 1-4에서, X_2 및 X_3 은 각각 독립적으로 0 또는 S이고, R_2 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, a 내지 c 및 e 내지 g는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d 및 h는 각각 독립적으로 0 이상 2 이하의 정수이며, Z_1 내지 Z_3 은 전술한 바와 동일하다.

[0034] 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 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

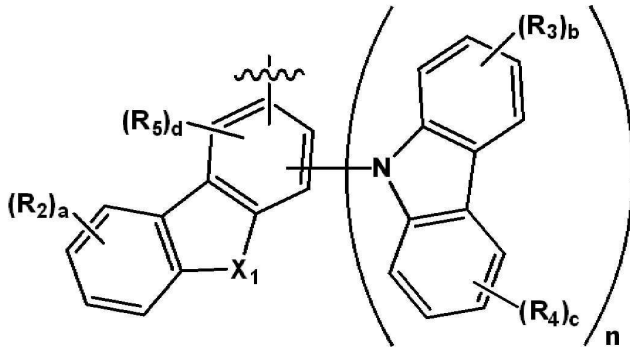
[0035] [화학식 1]



[0036]

[0037] 화학식 1에서, Z_1 내지 Z_3 는 각각 독립적으로 CR_1 또는 N이고, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이며, R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 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, Ar_1 내지 Ar_3 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 헤테로아릴기이며, Ar_1 내지 Ar_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다.

[0038] [화학식 2]

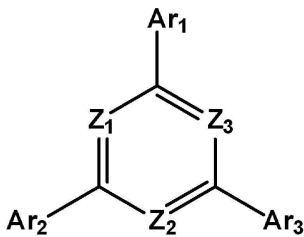


[0039]

[0040] 화학식 2에서, X_1 은 0 또는 S이고, n 은 1 이상 3 이하의 정수이며, a 내지 c 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d 는 0 이상 2 이하의 정수이며, R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, Ar_1 내지 Ar_3 중 1개가 상기 화학식 2로 표시될 경우, n 은 2 또는 3이고, 화학식 2의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 화학식 1과 오르쏘(ortho) 관계로 치환된다.

[0041] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 제공한다.

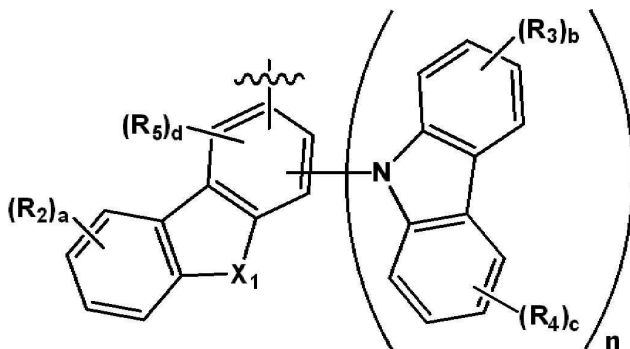
[0042] [화학식 1]



[0043]

[0044] 화학식 1에서, Z_1 내지 Z_3 는 각각 독립적으로 CR_1 또는 N이고, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이며, R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 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, Ar_1 내지 Ar_3 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 헤테로아릴기이며, Ar_1 내지 Ar_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다.

[0045] [화학식 2]



[0046]

[0047] 화학식 2에서, X_1 은 0 또는 S이고, n 은 1 이상 3 이하의 정수이며, a 내지 c 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d 는 0 이상 2 이하의 정수이며, R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원

자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, Ar₁ 내지 Ar₃ 중 1개가 상기 화학식 2로 표시될 경우, n은 2 또는 3이고, 화학식 2의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 화학식 1과 오르쏘(ortho) 관계로 치환된다.

발명의 효과

[0048] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 효율이 우수하다.

[0049] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 유기 전계 발광 소자에 적용되어 고효율화에 기여할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0050] 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

[0051] 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.

[0052] 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.

[0053] 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.

[0054] 먼저, 도 1 내지 도 3을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.

[0055] 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.

[0056] 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.

[0057] 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 구조

를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0058] 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.
- [0059] 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.
- [0060] 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.
- [0061] 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.
- [0062] 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.
- [0063] 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 폴리에테르케톤(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.
- [0064] 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'-diphenylbenzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl), mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene) 등을 포함할 수도 있다.
- [0065] 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.
- [0066] 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 폴리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0067] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층 및 전자 저지층 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 저지층은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

[0068] 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.

[0069] 발광층(EML)은 함질소 단환 고리, 링커, 및 2개 이상의 카바졸 모이어티를 포함하는 헤테로환 화합물을 포함한다. 링커는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이다.

[0070] 카바졸 모이어티 중 적어도 하나와 상기 함질소 단환 고리는 각각 상기 링커에 오르쏘(ortho) 관계로 치환된다. 다시 말해, 함질소 단환 고리와 카바졸 모이어티는 링커를 통해 서로 연결되며, 카바졸 모이어티 중 적어도 하나와 함질소 단환 고리는 오르쏘(ortho) 관계로 링커에 치환된다. 예를 들어, 2개의 카바졸 모이어티를 포함할 경우, 2개 중 하나만 함질소 단환 고리와 오르쏘(ortho) 관계로 치환되고, 나머지 하나는 함질소 단환 고리와 메타(meta) 또는 파라(para) 관계로 치환되는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 2개의 카바졸 모이어티 각각이 함질소 단환 고리와 오르쏘(ortho) 관계로 링커에 치환될 수 있으며, 이 경우, 헤테로환 화합물은 2개의 링커를 포함할 수 있다.

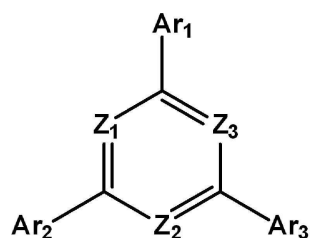
[0071] 헤테로환 화합물은 링커를 1개 또는 2개 포함할 수 있다. 헤테로환 화합물이 링커를 1개 포함할 경우, 2개 이상의 카바졸 모이어티는 각각 링커에 치환될 수 있다. 헤테로환 화합물이 링커를 2개 포함할 경우, 각각의 링커에 적어도 1개의 카바졸 모이어티가 치환되는 것일 수 있다.

[0072] 함질소 단환 고리는 치환 또는 비치환된 피리딘기, 치환 또는 비치환된 피리미딘기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아진기일 수 있다. 이에 한정되는 것은 아니나, 함질소 단환 고리는 치환 또는 비치환된 트리아진기일 수 있다.

[0073] 함질소 단환 고리는 치환 또는 비치환된 페닐기로 1 이상 치환된 것일 수 있다. 헤테로환 화합물이 1개의 링커를 포함할 경우, 함질소 단환 고리는 치환 또는 비치환된 페닐기로 2 치환된 것일 수 있다. 헤테로환 화합물이 2개의 링커를 포함할 경우, 함질소 단환 고리는 1개의 치환 또는 비치환된 페닐기로 치환된 것일 수 있다. 이에 한정되는 것은 아니나, 함질소 단환 고리는 1개 또는 2개의 비치환된 페닐기로 치환된 것일 수 있다.

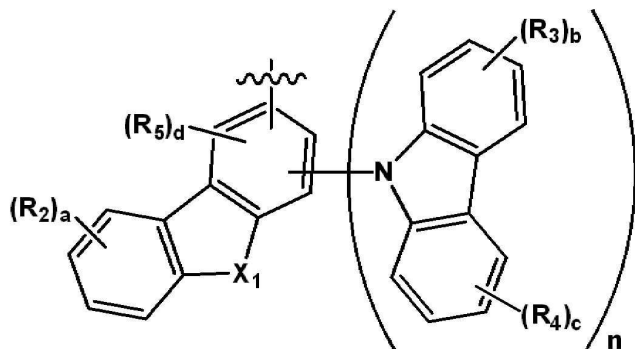
[0074] 헤테로환 화합물은 예를 들어, 하기 화학식 1로 표시될 수 있다.

[0075] [화학식 1]



[0076] 화학식 1에서, Z₁ 내지 Z₃는 각각 독립적으로 CR₁ 또는 N이고, Z₁ 내지 Z₃ 중 적어도 하나는 N이며, R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 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, Ar₁ 내지 Ar₃는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, Ar₁ 내지 Ar₃ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다.

[0078] [화학식 2]



[0079]

[0080] 화학식 2에서, X_1 은 0 또는 S이고, n 은 1 이상 3 이하의 정수이며, a 내지 c 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d 는 0 이상 2 이하의 정수이며, R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0081]

본 명세서에서,  는 연결되는 부위를 의미한다.

[0082]

본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 붕소기, 포스핀기, 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.

[0083]

본 명세서에서, 할로겐 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.

[0084]

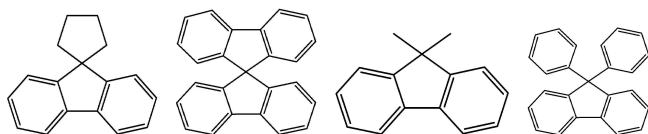
본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 4 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n -프로필기, 이소프로필기, n -부틸기, s -부틸기, t -부틸기, i -부틸기, 2-에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n -펜틸기, i -펜틸기, 네오펜틸기, t -펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n -헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 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.

[0085]

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, 퀴크페닐기, 섹시페닐기, 바이페닐렌기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0086]

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.



[0087]

- [0088] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 헤테로 원자로 O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기가 헤테로 원자를 2개 포함할 경우, 2개의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하이다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로아릴기 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, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 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, 디벤조실물기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0089] 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.
- [0090] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0091] 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.
- [0092] 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.
- [0093] R₁은 예를 들어 수소 원자일 수 있다. 다시 말해, Z₁ 내지 Z₃는 각각 독립적으로 CH 또는 N일 수 있다.
- [0094] Z₁ 내지 Z₃는 각각 N일 수 있다.
- [0095] Ar₁ 내지 Ar₃ 중 화학식 2로 표시되지 않는 기 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다. 예를 들어, Ar₁ 내지 Ar₃ 중 화학식 2로 표시되지 않는 기 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라센기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트렌기일 수 있다.
- [0096] Ar₁ 내지 Ar₃ 중 1개만 화학식 2로 표시될 경우, 화학식 2의 n은 2 또는 3이다.
- [0097] 화학식 2의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 화학식 1과 오르쏘(ortho) 관계로 치환된다.
- [0098] X₁은 0일 수 있다. X₁은 S일 수 있다.
- [0099] a가 2 이상일 경우, 복수의 R₂는 서로 동일하거나 상이하고, b가 2 이상일 경우, 복수의 R₃은 서로 동일하거나 상이하며, c가 2 이상일 경우, 복수의 R₄는 서로 동일하거나 상이하며, d가 2 이상일 경우, 복수의 R₅는 서로 동일하거나 상이하다.
- [0100] a가 1일 경우, R₂는 수소 원자가 아닐 수 있고, b가 1일 경우, R₃는 수소 원자가 아닐 수 있으며, c가 1일 경우, R₄는 수소 원자가 아닐 수 있고, d가 1일 경우, R₅는 수소 원자가 아닐 수 있다.
- [0101] a가 1 이상일 경우, R₂는 중수소, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 15 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0102] b가 1 이상일 경우, R₃는 중수소, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기, 치환 또는

비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 15 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

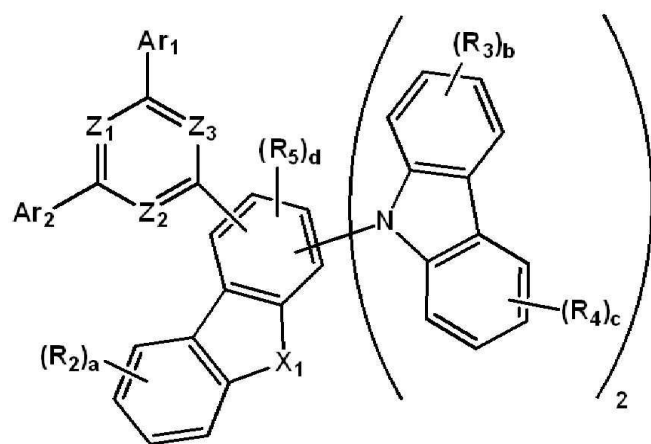
[0103] c가 1 이상일 경우, R₄는 중수소, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 15 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0104] d가 1 이상일 경우, R₅는 중수소, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 15 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0105] 이에 한정되는 것은 아니나, a 내지 d는 각각 0일 수 있다.

[0106] 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0107] [화학식 1-1]



[0108]

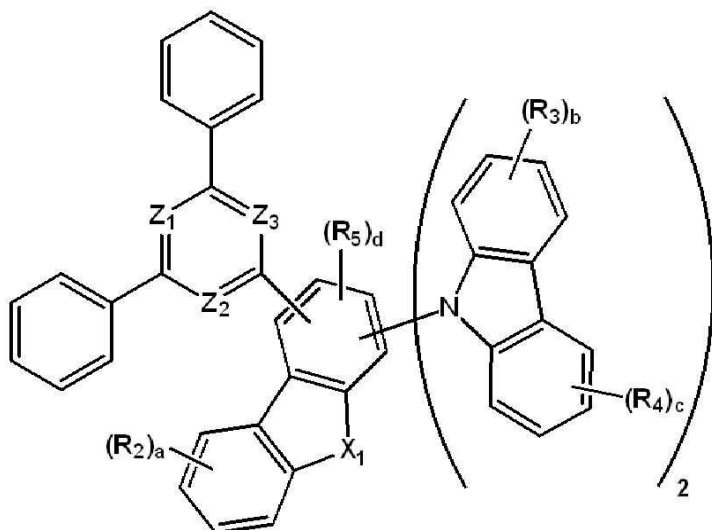
[0109] 화학식 1-1에서, Z₁ 내지 Z₃, Ar₁, Ar₂, R₂ 내지 R₅, a 내지 d 및 X₁은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하다.

[0110] 화학식 1-1에서, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 18 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 15 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 예를 들어, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라센기, 치환 또는 비치환된 페난트렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기일 수 있다.

[0111] 화학식 1-1의 2개의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 Z₁ 내지 Z₃를 포함하는 고리와 오르쏘 관계로 치환된다.

[0112] 화학식 1-1은 보다 구체적으로, 하기 화학식 1-2로 표시될 수 있다.

[0113] [화학식 1-2]



[0114]

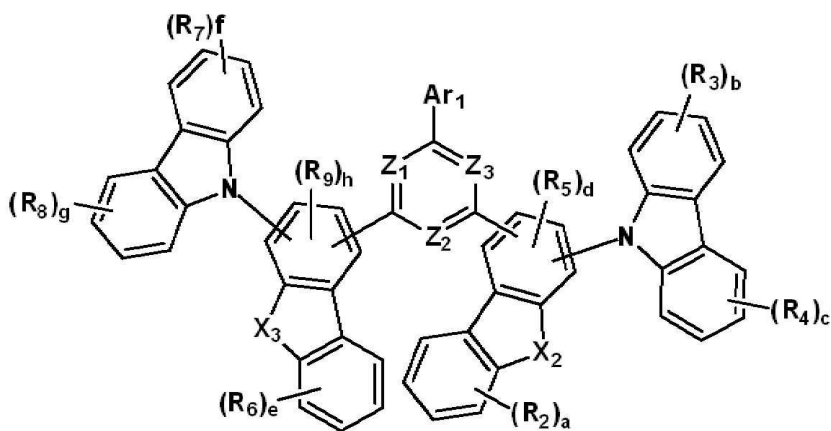
[0115] 화학식 1-2에서, Z_1 내지 Z_3 , R_2 내지 R_5 , a 내지 d 및 X_1 은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하다.

[0116] 화학식 1-2에서, a 내지 d 는 각각 0일 수 있다.

[0117] 화학식 1-2의 2개의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 Z_1 내지 Z_3 를 포함하는 고리와 오르쏘 관계로 치환된다.

[0118] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-3으로 표시될 수 있다.

[0119] [화학식 1-3]



[0120]

[0121] 화학식 1-3에서, X_2 및 X_3 는 각각 독립적으로 0 또는 S이고, R_2 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, a 내지 c 및 e 내지 g 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d 및 h 는 각각 독립적으로 0 이상 2 이하의 정수이며, Z_1 내지 Z_3 , 및 Ar_1 은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

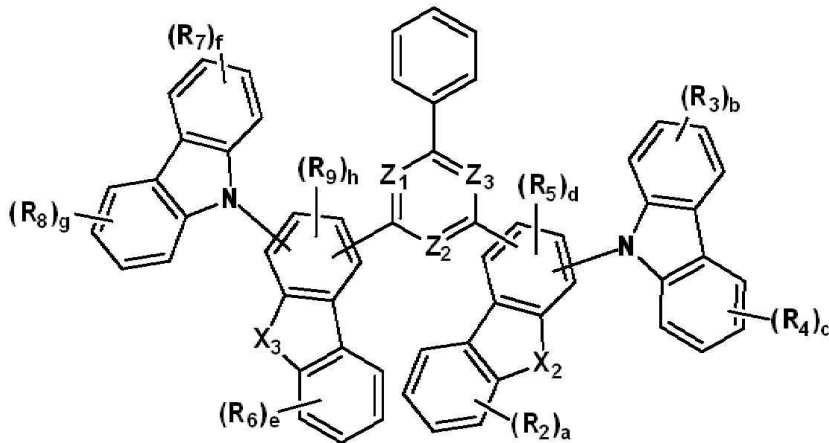
[0122] 화학식 1-3에서, X_2 및 X_3 는 서로 동일할 수 있다.

[0123] 화학식 1-3에서, Ar_1 은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 18 이하의 아릴기일 수 있다. 예를 들어, Ar_1 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 테페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라센기, 치환 또는 비치환된 페난트렌기일 수 있다.

[0124] 화학식 1-3의 2개의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 Z_1 내지 Z_3 를 포함하는 고리와 오르쏘 관계로 치환된다.

[0125] 화학식 1-3은 보다 구체적으로, 하기 화학식 1-4로 표시될 수 있다.

[0126] [화학식 1-4]



[0127]

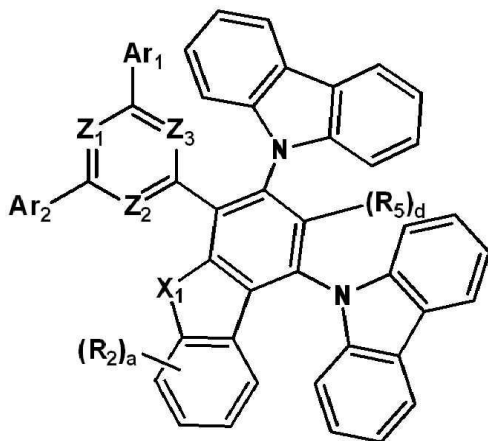
[0128] 화학식 1-4에서, X_2 및 X_3 은 각각 독립적으로 0 또는 S이고, R_2 내지 R_9 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, a 내지 c 및 e 내지 g는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d 및 h는 각각 독립적으로 0 이상 2 이하의 정수이며, Z_1 내지 Z_3 은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0129] 화학식 1-4에서, X_2 및 X_3 은 서로 동일할 수 있다.

[0130] 화학식 1-4의 2개의 카바졸기 중 적어도 하나는 Z_1 내지 Z_3 를 포함하는 고리와 오르쏘 관계로 치환된다.

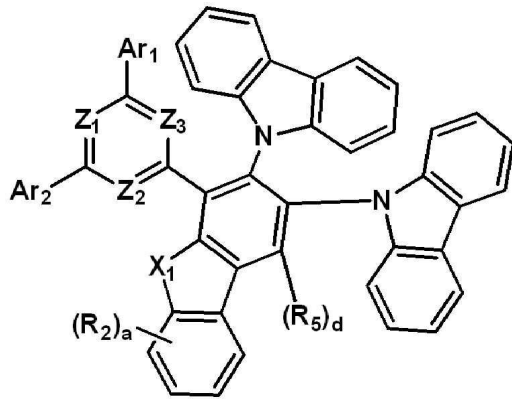
[0131] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-5 또는 1-6으로 표시될 수 있다.

[0132] [화학식 1-5]



[0133]

[0134] [화학식 1-6]

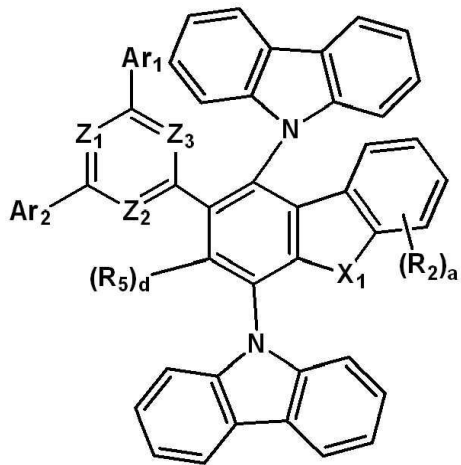


[0135]

[0136] 화학식 1-5 및 1-6에서, Z₁ 내지 Z₃, Ar₁, Ar₂, R₂, R₅, a, d, 및 X₁은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하다.

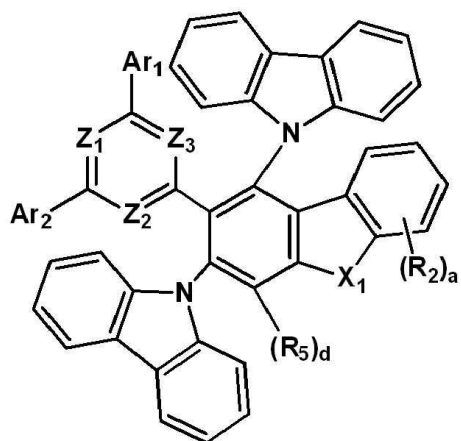
[0137] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-7 내지 1-9 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0138] [화학식 1-7]



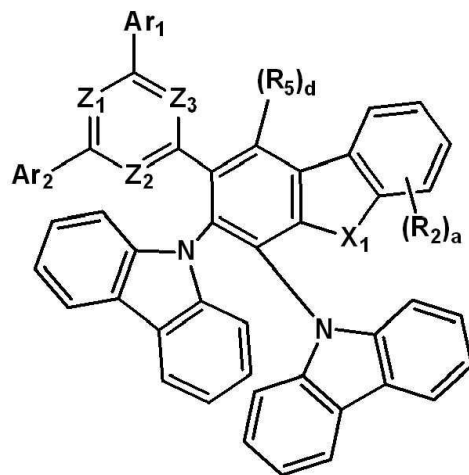
[0139]

[0140] [화학식 1-8]



[0141]

[0142] [화학식 1-9]

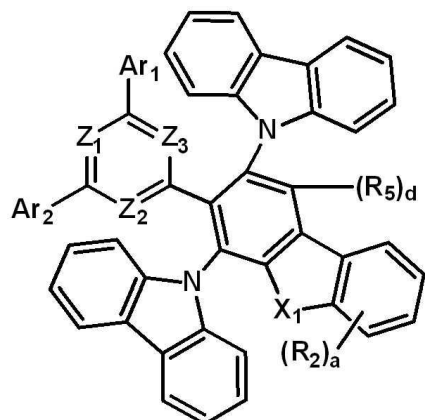


[0143]

[0144] 화학식 1-7 내지 1-9에서, Z_1 내지 Z_3 , Ar_1 , Ar_2 , R_2 , R_5 , a , d , 및 X_1 은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하다.

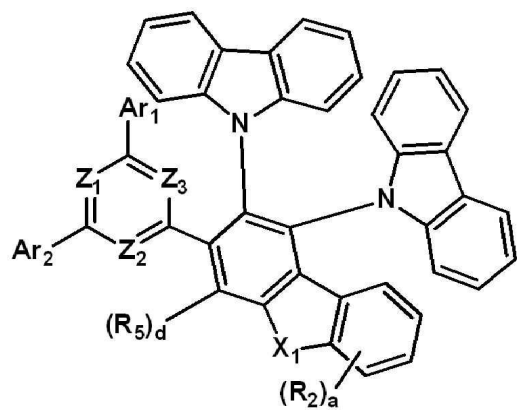
[0145] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-10 내지 1-12 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0146] [화학식 1-10]



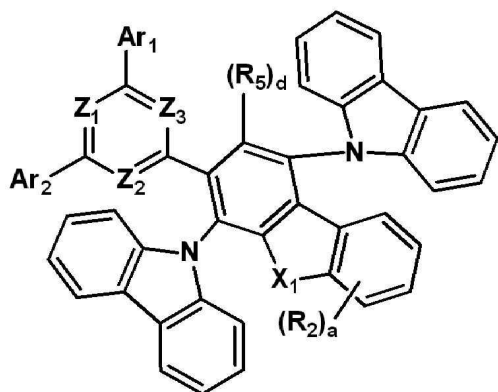
[0147]

[0148] [화학식 1-11]



[0149]

[0150] [화학식 1-12]

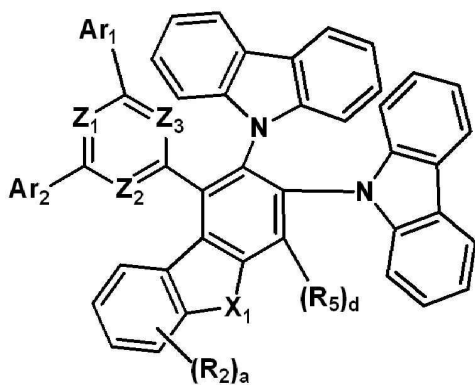


[0151]

[0152] 화학식 1-10 내지 1-12에서, Z_1 내지 Z_3 , Ar_1 , Ar_2 , Ar_2 , R_2 , R_5 , a , d , 및 X_1 은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하다.

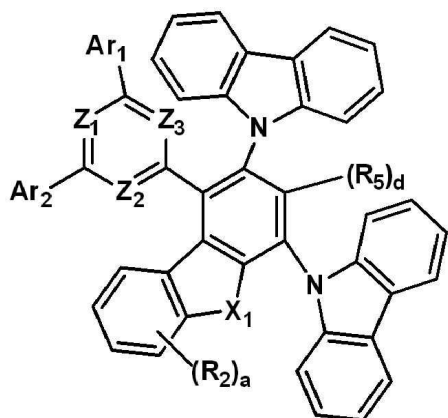
[0153] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-13 또는 1-14로 표시될 수 있다.

[0154] [화학식 1-13]



[0155]

[0156] [화학식 1-14]

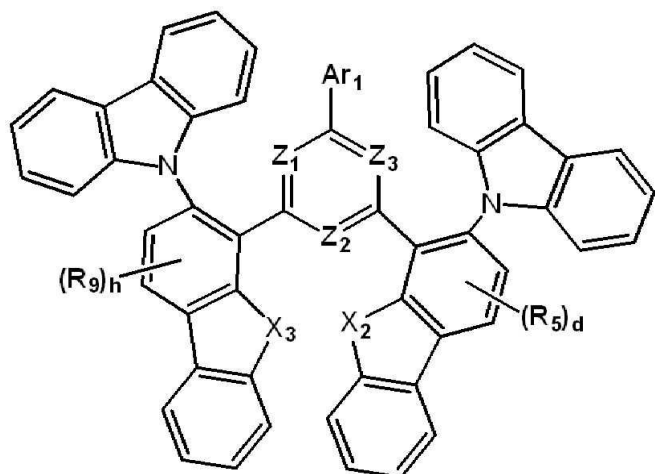


[0157]

[0158] 화학식 1-13 및 1-14에서, Z_1 내지 Z_3 , Ar_1 , Ar_2 , Ar_2 , R_2 , R_5 , a , d , 및 X_1 은 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 동일하다.

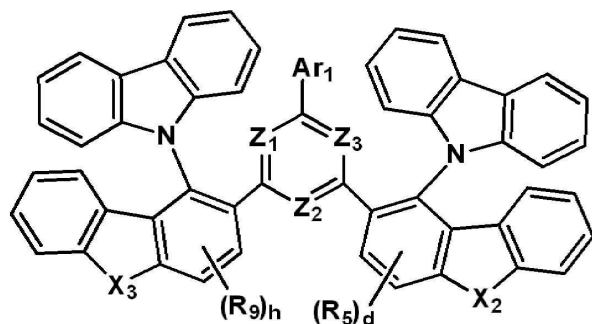
[0159] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-15 내지 1-17 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0160] [화학식 1-15]



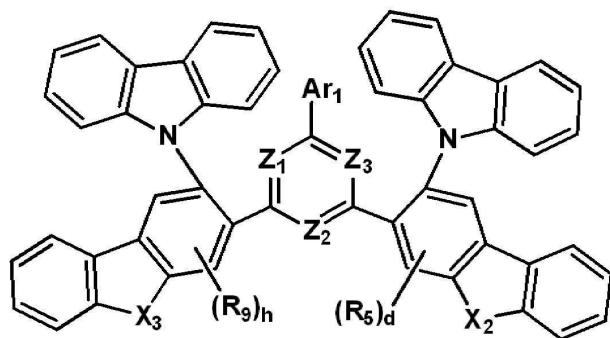
[0161]

[0162] [화학식 1-16]



[0163]

[0164] [화학식 1-17]

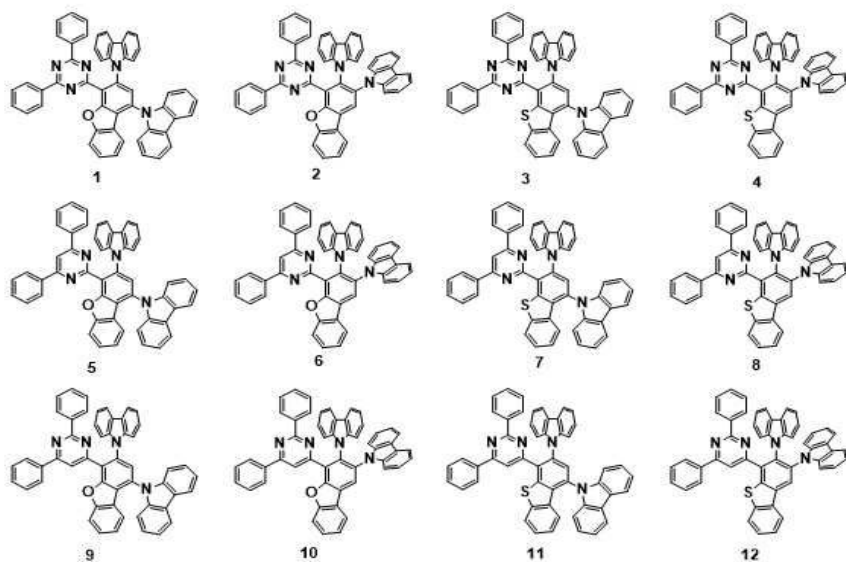


[0165]

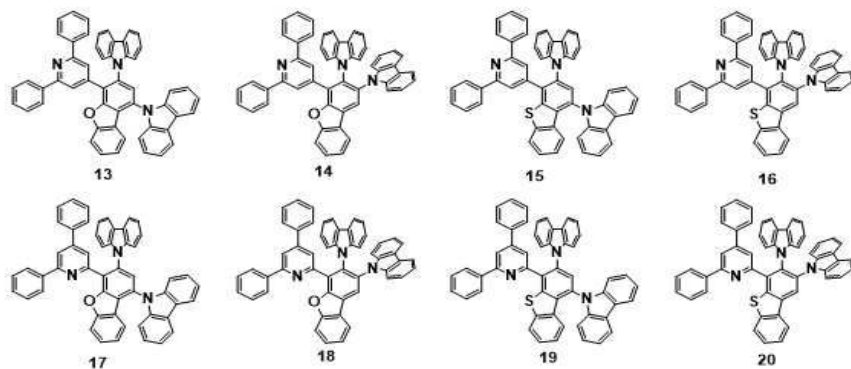
[0166] 화학식 1-15 내지 1-17에서, Z_1 내지 Z_3 , Ar_1 , Ar_2 , R_2 , R_5 , a , 및 d 는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고, X_2 및 X_3 은 0 또는 S이다.

[0167] 헤테로환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

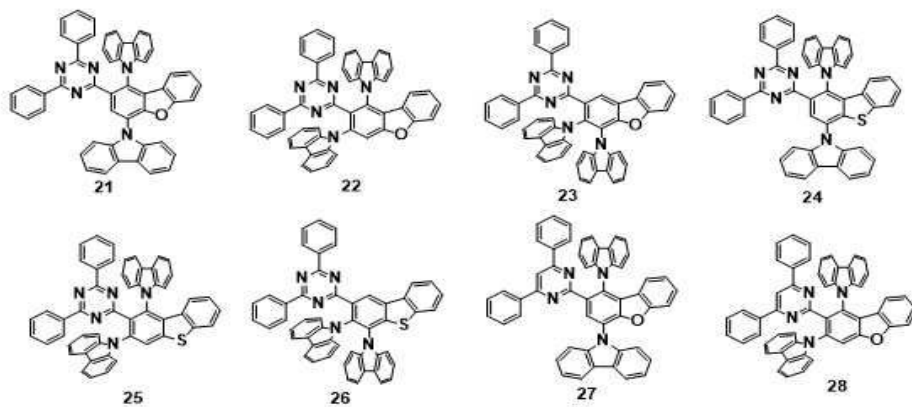
[0168] [화합물군 1]



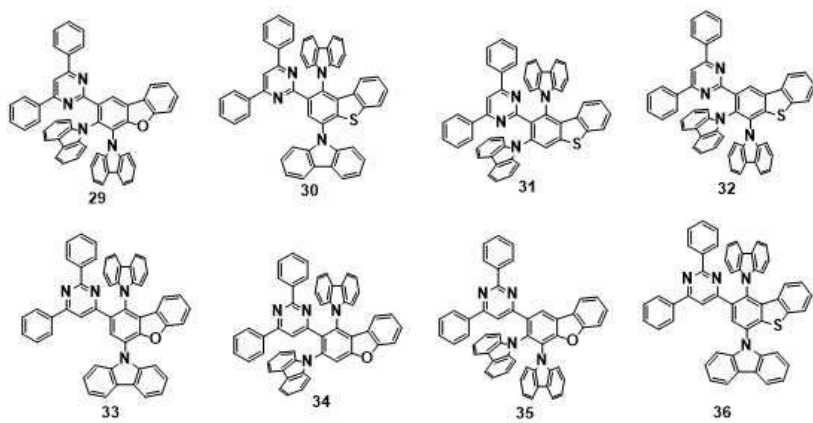
[0169]



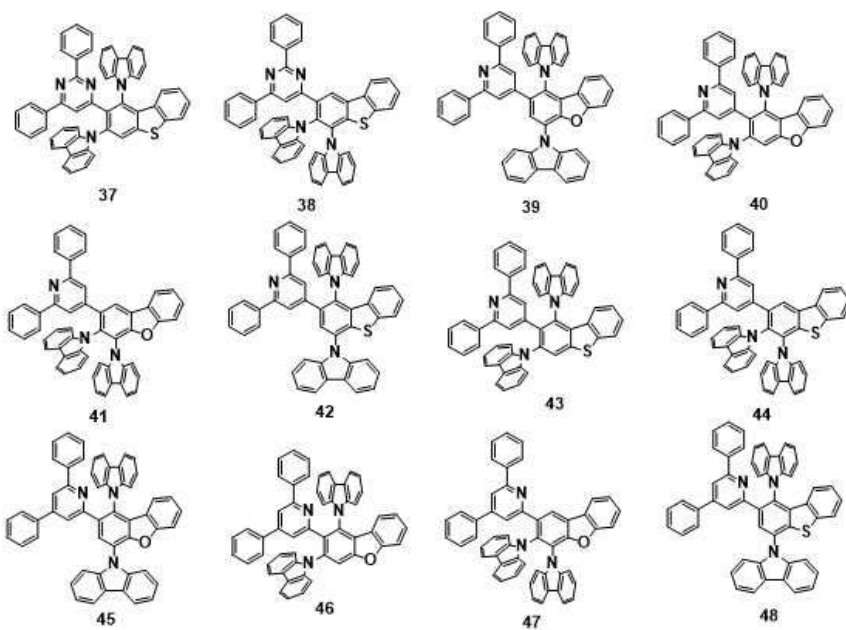
[0170]



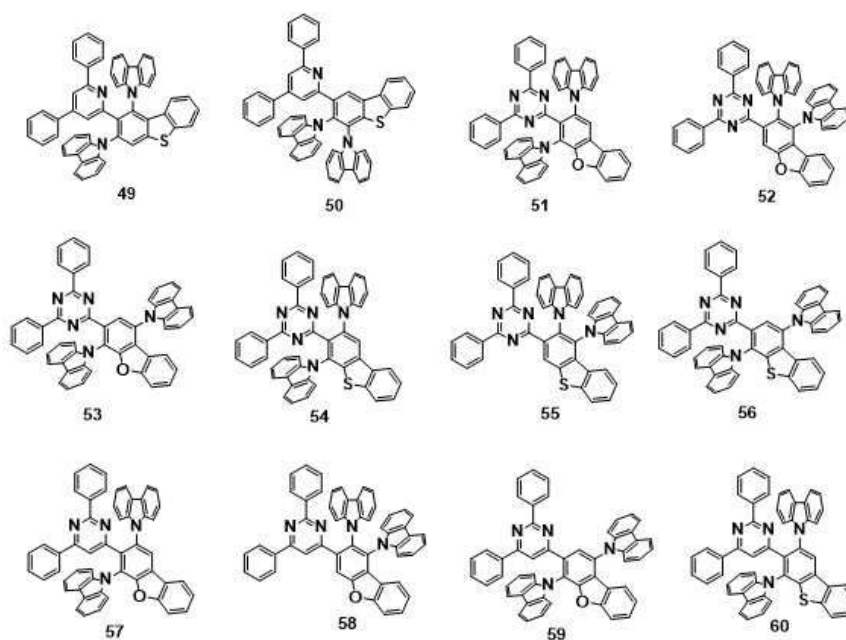
[0171]



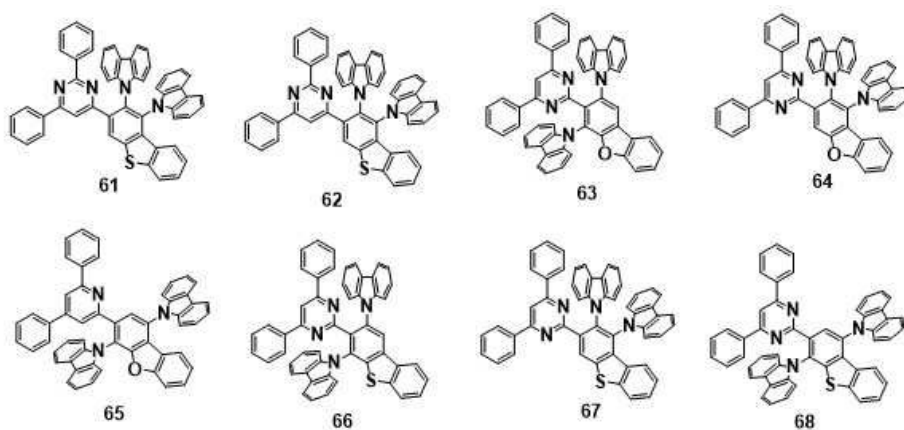
[0172]



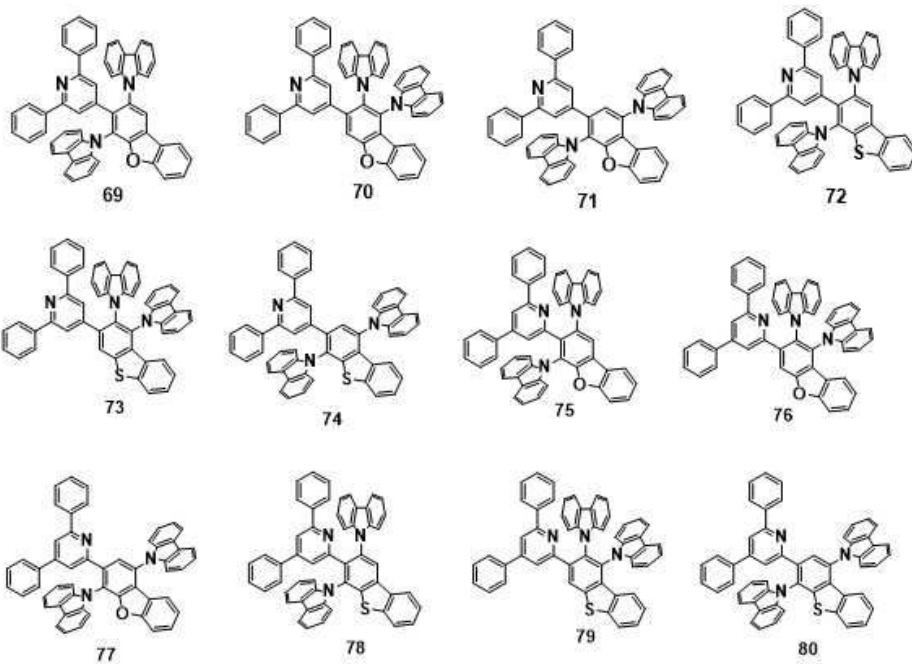
[0173]



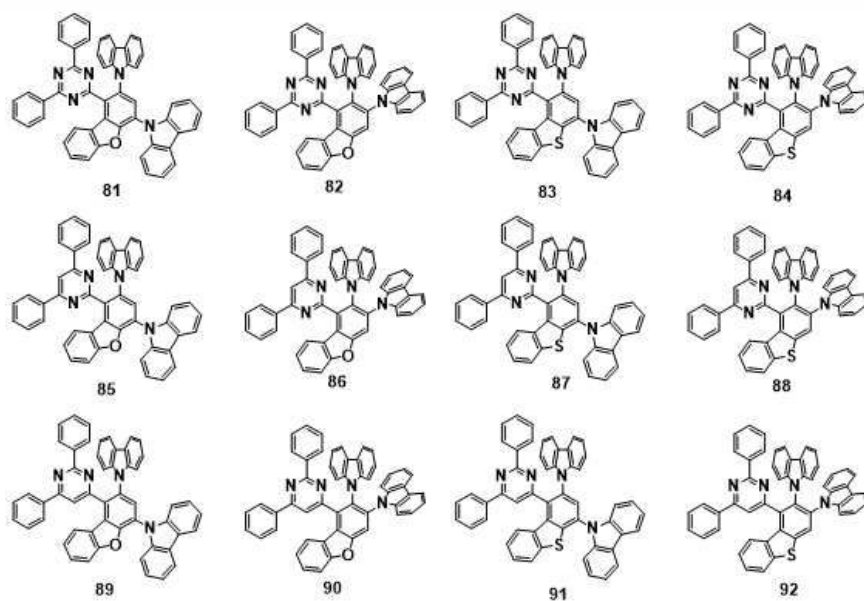
[0174]



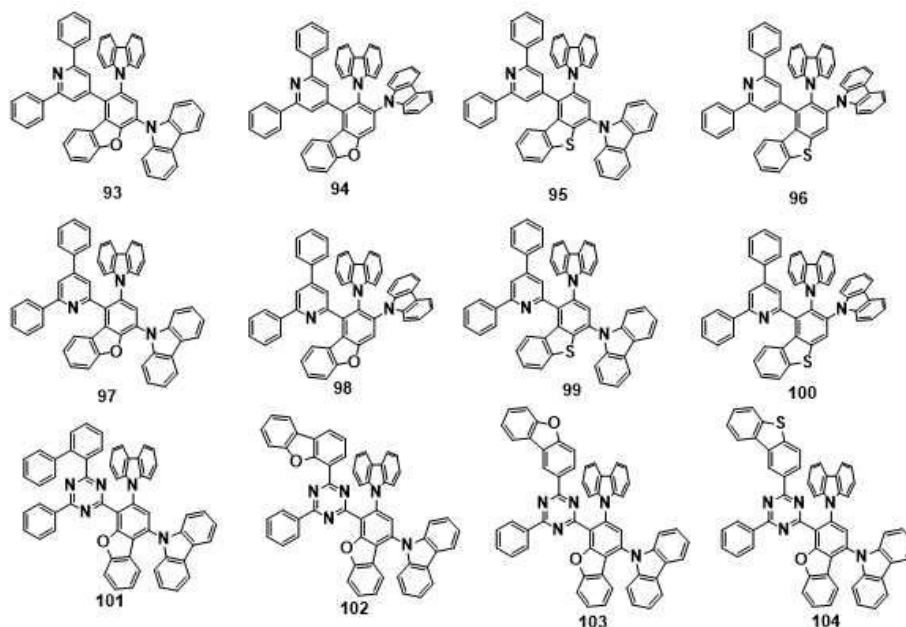
[0175]



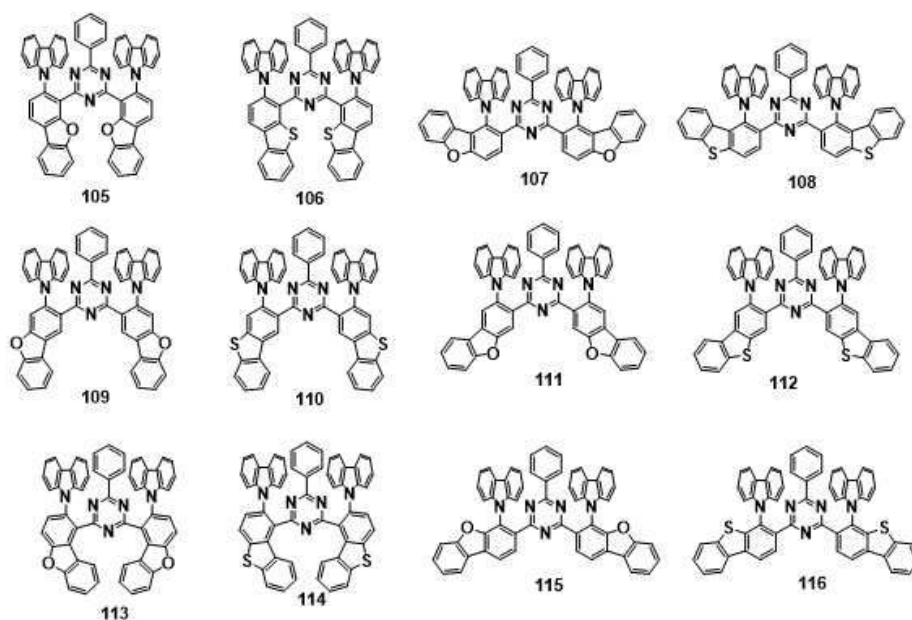
[0176]



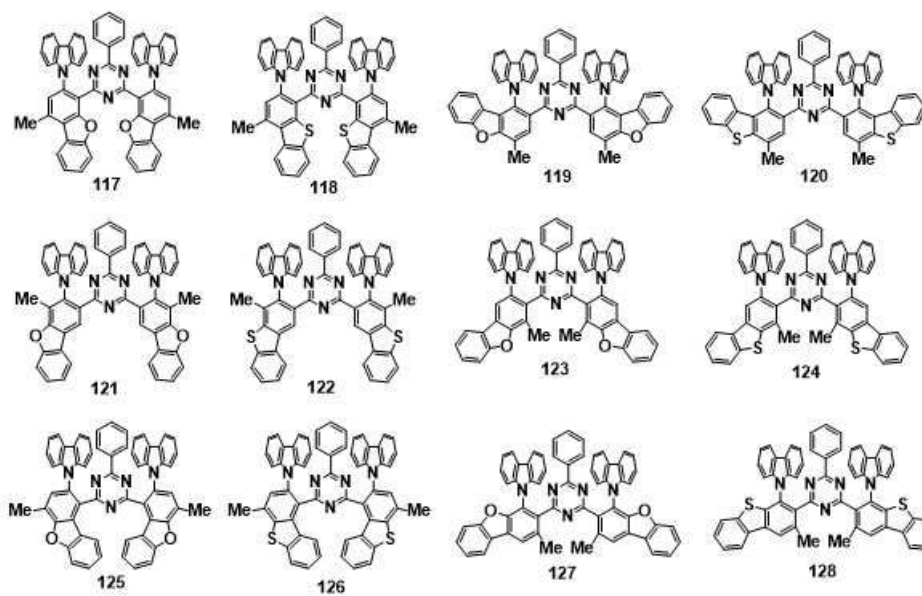
[0177]



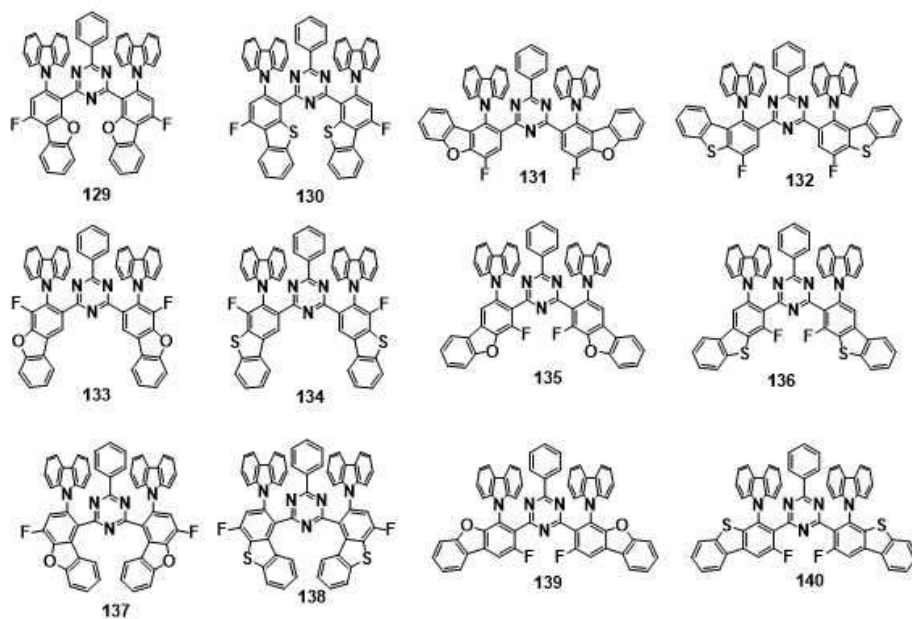
[0178]



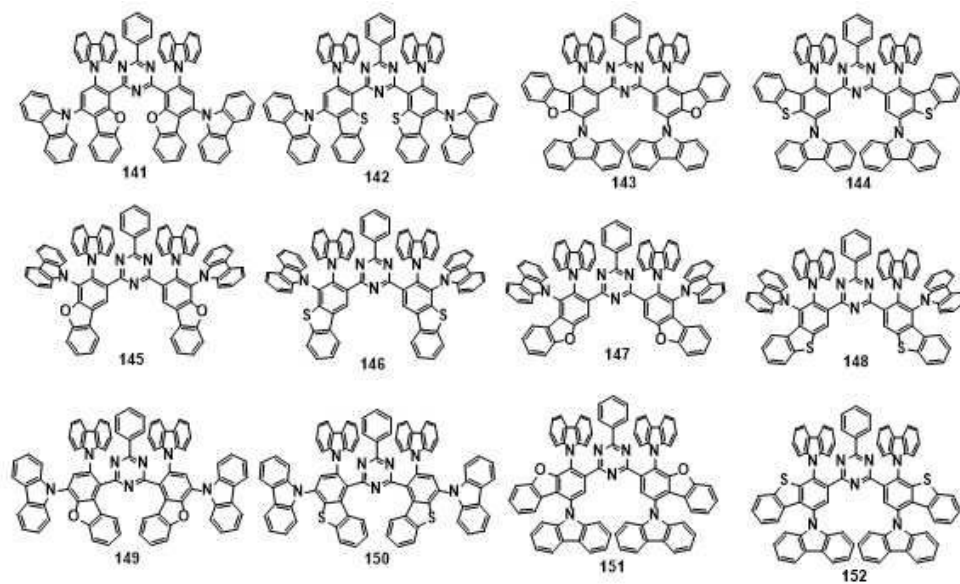
[0179]



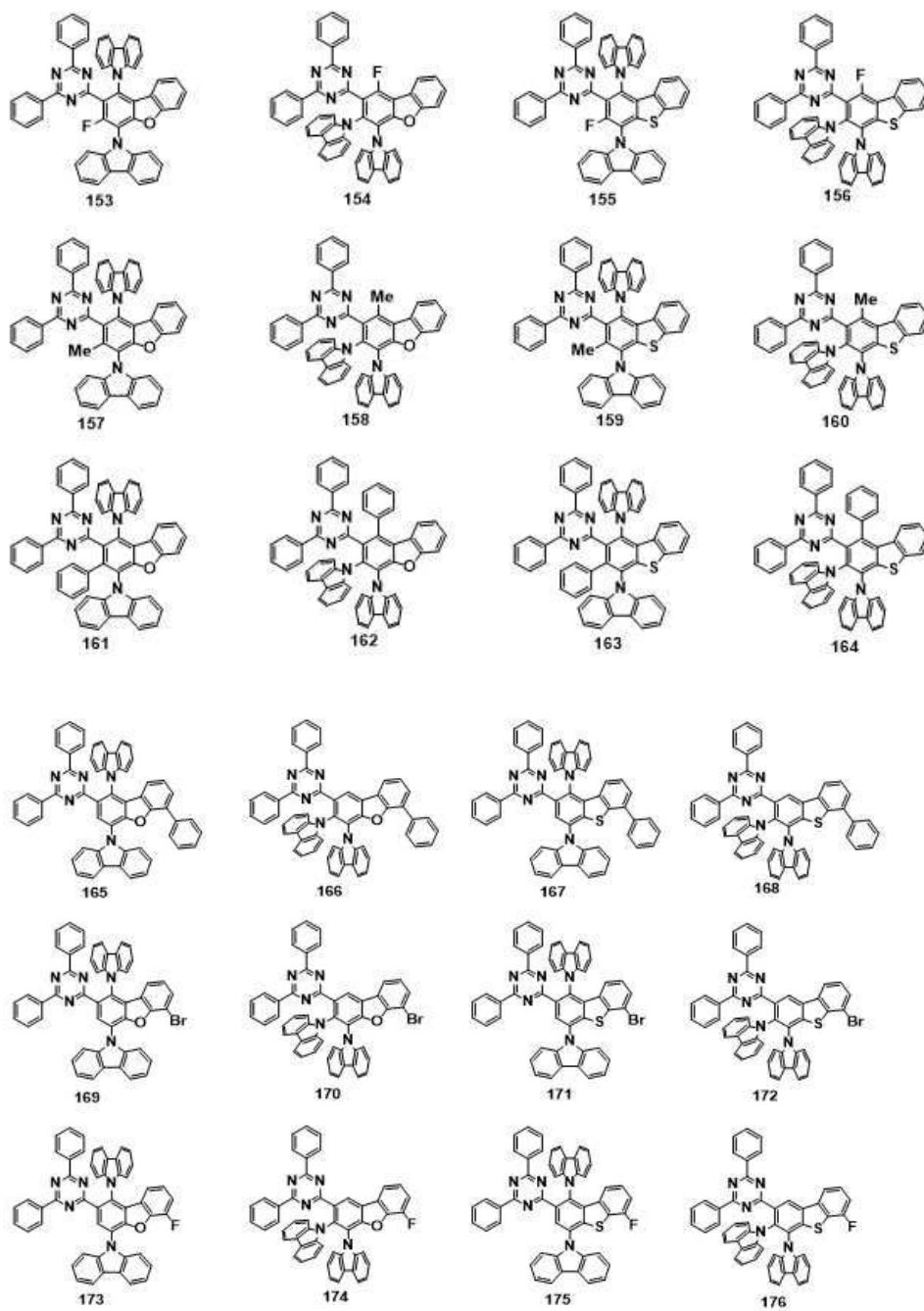
[0180]



[0181]

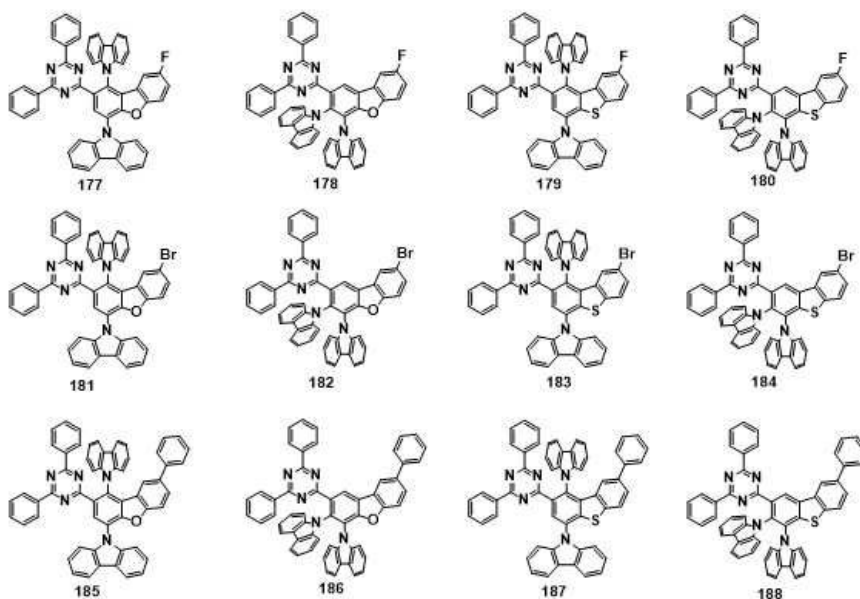


[0182]



[0183]

[0184]



[0185]

[0186]

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

[0187]

발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 도펀트가 헤테로환 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물이 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있다. 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물이 열 활성 지연 형광용 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있다. 발광층(EML)은 헤테로환 화합물을 포함함으로써 470nm 미만의 파장 영역을 갖는 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다. 예를 들어, 헤테로환 화합물은 440nm 내지 약 470nm 또는 약 450nm 내지 약 470nm의 파장 영역을 갖는 심청색(deep blue) 광 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있다.

[0188]

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 (Octaphenylcyclotetra siloxane), PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 호스트 재료로 사용할 수 있다.

[0189]

예를 들어, 발광층(EML)은 헤테로환 화합물 이외에 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(MEL)은 공지의 도펀트 재료로, 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-BDAVB), 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

더 포함할 수 있다.

- [0190] 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.
- [0191] 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.
- [0192] 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.
- [0193] 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 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.
- [0194] 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.
- [0195] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 Alq_3 (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, DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl)-1-ylphenyl)-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), BAQ(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq₂(beryllumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0196] 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.
- [0197] 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), Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), 또는 DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide) 등을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0198] 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.
- [0199] 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.

[0200] 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.

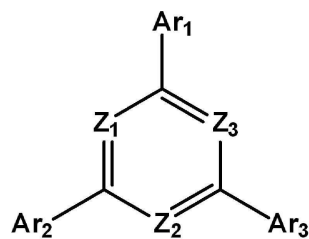
[0201] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTL)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETL)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.

[0202] 유기 전계 발광 소자(10)가 전면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 반사형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 배면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 반사형 전극일 수 있다.

[0203] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하며, 이로 인해 고효율화 및 청색 발광(예를 들어, 심청색 발광)을 동시에 구현할 수 있다는 효과가 있다.

[0204] 본 발명의 일 실시예는 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 제공한다. 화학식 1에 대한 구체적인 설명은 별도의 설명이 없는 한 전술한 내용이 동일하게 적용될 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

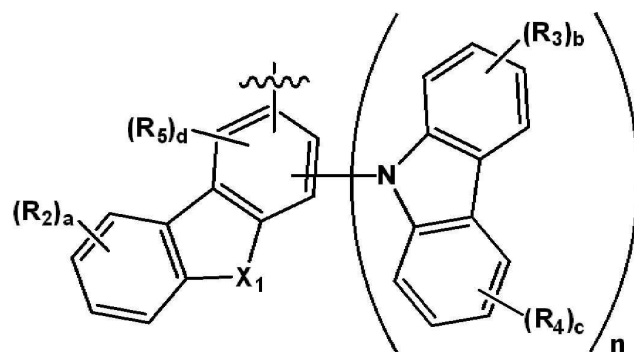
[0205] [화학식 1]



[0206]

[0207] 화학식 1에서, Z₁ 내지 Z₃는 각각 독립적으로 CR₁ 또는 N이고, Z₁ 내지 Z₃ 중 적어도 하나는 N이며, R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 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, Ar₁ 내지 Ar₃는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, Ar₁ 내지 Ar₃ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다.

[0208] [화학식 2]



[0209]

[0210] 화학식 2에서, X₁은 O 또는 S이고, n은 1 이상 3 이하의 정수이며, a 내지 c는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, d는 0 이상 2 이하의 정수이며, R₂ 내지 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원

자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, Ar₁ 내지 Ar₃ 중 1개가 상기 화학식 2로 표시될 경우, n은 2 또는 3이고, 화학식 2의 카바졸 모이어티 중 적어도 하나는 화학식 1과 오르쏘(ortho) 관계로 치환된다.

[0211] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 상기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0212] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 일중항 에너지 준위 및 삼중항 에너지 준위 차이가 0.2 eV 이하인 것일 수 있으며, 결과적으로 열 활성화 지연 형광용 재료로 활용 가능하다. 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 유기 전계 발광 소자용 재료로 적용되어 효율 향상에 기여할 수 있다.

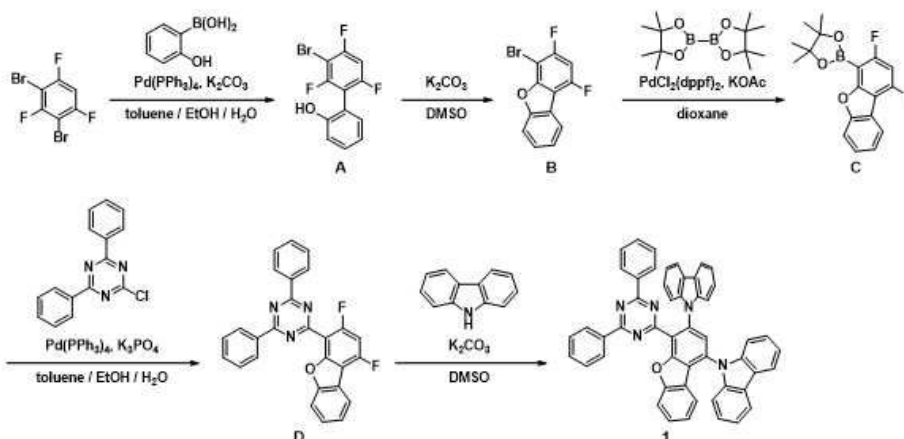
[0213] 이하, 구체적인 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 예시에 불과하며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0214] (합성예)

[0215] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0216] 1. 화합물 1의 합성

[0217] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물인 화합물 1은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



[0218]

[0219] (중간체 A의 합성)

[0220] 아르곤(Ar) 분위기 하, 500 mL의 삼구 플라스크에, 2,4-Dibromo-1,3,5-trifluorobenzene (10.00 g), (2-Hydroxyphenyl)boronic acid (4.76 g), Tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) (Pd(PPh₃)₄, 1.99 g), Potassium carbonate (K₂CO₃, 9.54 g) 를 탈기한 Toluene / Ethanol / 물의 혼합 용매 (10:1:2, 180 mL)에 용해하여, 80℃에서 10시간 동안 교반했다. 반응 후, 물을 더하여 CH₂Cl₂로 추출한 유기층을 모아 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 A를 8.57 g (수율 82%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 A의 분자량은 303이었다.

[0221] (중간체 B의 합성)

[0222] 아르곤(Ar) 분위기 하, 300 mL의 삼구 플라스크에, 중간체 A (8.50 g), K₂CO₃ (7.75 g) 를 탈수DMSO (100 mL)에 용해하여, 110℃에서 6시간동안 교반했다. 실온으로 돌려놓은 후, 반응 용액을 1000 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 흡수하여, CH₂Cl₂ (300 mL)에 용해하여, MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피 및 재결정으로 정제하여, 중간체 B를 3.57 g (수율 45%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 B의 분자량은 283이었다.

[0223] (중간체 C의 합성)

[0224] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 B (3.50 g), Bis(pinacolato)diboron (3.14 g), [1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium(II) Dichloromethane Adduct ($\text{PdCl}_2(\text{dppf})$, 1.01 g), Potassium acetate (KOAc, 2.43 g) 를 탈수1,4-Dioxane (70 mL) 에 용해하여, 90℃에서 8시간 동안 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 CH_2Cl_2 로 추출, 유기층을 모아 MgSO_4 로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 C를 3.18 g (수율 78%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 C의 분자량은 330이었다.

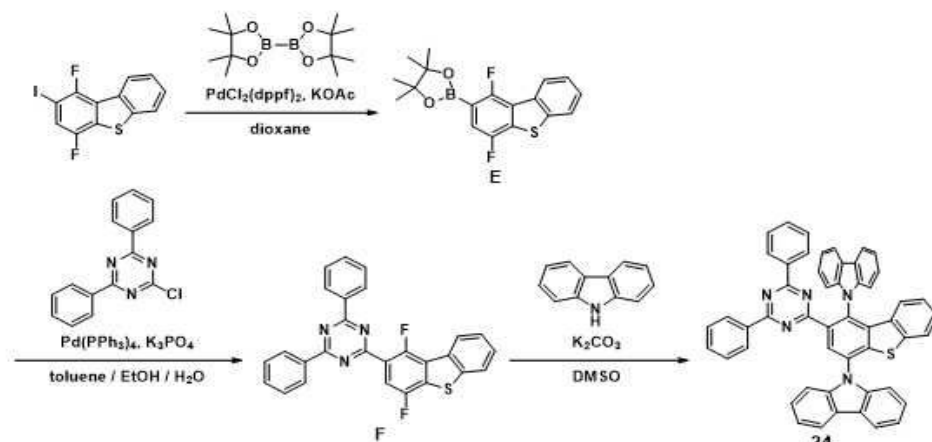
[0225] (중간체 D의 합성)

[0226] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 C (3.00 g), 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.43 g), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.53 g), Tripotassium phosphate (K_3PO_4 , 3.86 g) 를 탈기한 Toluene / Ethanol / 물의 혼합 용매 (10:1:2, 60 mL)에 용해하여, 80℃에서 10시간동안 교반했다. 반응 후, 물을 더하여 CH_2Cl_2 로 추출, 유기층을 모아 MgSO_4 로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 D를 2.85 g (수율 72%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 D의 분자량은 435이었다.

[0227] (화합물 1의 합성)

[0228] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 D (2.80 g), Carbazole (2.15 g), K_2CO_3 (4.45 g)를 탈수DMSO (30 mL)에 용해하여, 150℃에서 6시간 동안 교반했다. 실온으로 돌려놓은 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 흡수하여, CH_2Cl_2 (150 mL)에 용해하여, MgSO_4 로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제하여 화합물 1을 3.75 g (수율 80%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 1의 분자량은 729이었다.

[0230] 2. 화합물 24의 합성



[0231]

[0232] (중간체 E의 합성)

[0233] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 1,4-Difluoro-2-iododibenzo[b,d]thiophene (5.00 g), Bis(pinacolato)diboron (3.66 g), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (1.18 g), KOAc (2.84 g) 를 탈수1,4-Dioxane (80 mL) 에 용해하여, 90℃에서 8시간 동안 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 CH_2Cl_2 로 추출, 유기층을 모아 MgSO_4 로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 E를 3.10 g (수율 62%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 E의 분자량은 346이었다.

[0234] (중간체 F의 합성)

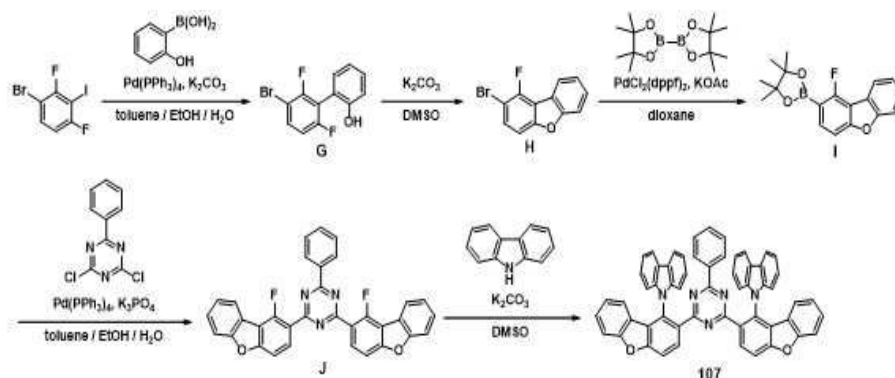
[0235] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 E (3.00 g), 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.32 g), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.50 g), K_3PO_4 (3.68 g) 를 탈기한 Toluene / Ethanol / 물의 혼합 용매 (10:1:2, 50 mL)에 용해하여, 80℃에서 10시간 동안 교반했다. 반응 후, 물을 더하여 CH_2Cl_2 로 추출, 유기층을 모아 MgSO_4 로

건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 F를 2.74 g (수율 70%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 F의 분자량은 451이었다.

[0236] (화합물 24의 합성)

[0237] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 F (2.70 g), Carbazole (2.61 g), K_2CO_3 (5.39 g) 를 탈수 DMSO (30 mL)에 용해하여, 150℃에서 6시간 동안 교반했다. 실온으로 돌려놓은 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 흡수하여, CH_2Cl_2 (150 mL)에 용해하여, $MgSO_4$ 로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제하여, 화합물 24를 4.94 g (수율 85%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 24의 분자량은 745이었다.

[0239] 3. 화합물 107의 합성



[0240]

[0241] (중간체 G의 합성)

[0242] 아르곤(Ar) 분위기 하, 500 mL의 삼구 플라스크에 1-Bromo-2,4-difluoro-3-iodobenzene (10.00 g), (2-Hydroxyphenyl)boronic acid (4.33 g), $Pd(PPh_3)_4$ (1.81 g), K_2CO_3 (8.69 g) 를 탈기한 Toluene / Ethanol / 물의 혼합 용매 (10:1:2, 160 mL)에 용해하여, 80℃에서 10시간 동안 교반했다. 반응 후, 물을 더하여 CH_2Cl_2 로 추출, 유기층을 모아 $MgSO_4$ 로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 G를 7.69 g (수율 86%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 G의 분자량은 285이었다.

[0243] (중간체 H의 합성)

[0244] 아르곤(Ar) 분위기 하, 300 mL의 삼구 플라스크에 중간체 G (7.60 g), K_2CO_3 (7.37 g) 를 탈수 DMSO (100 mL)에 용해하여, 110℃에서 6시간 동안 교반했다. 실온으로 돌려놓은 후, 반응 용액을 1000 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 흡수하여, CH_2Cl_2 (300 mL)에 용해하여, $MgSO_4$ 로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피 및 재결정으로 정제하여 중간체 H를 2.69 g (수율 38%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 H의 분자량은 265이었다.

[0245] (중간체 I의 합성)

[0246] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 H (2.60 g), Bis(pinacolato)diboron (2.49 g), $PdCl_2(dppf)$ (0.80 g), KOAc (1.93 g) 를 탈수 1,4-Dioxane (50 mL)에 용해하여, 90℃에서 8시간 동안 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 CH_2Cl_2 로 추출, 유기층을 모아 $MgSO_4$ 로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 I를 1.84 g (수율 60%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 I의 분자량은 312이었다.

[0247] (중간체 J의 합성)

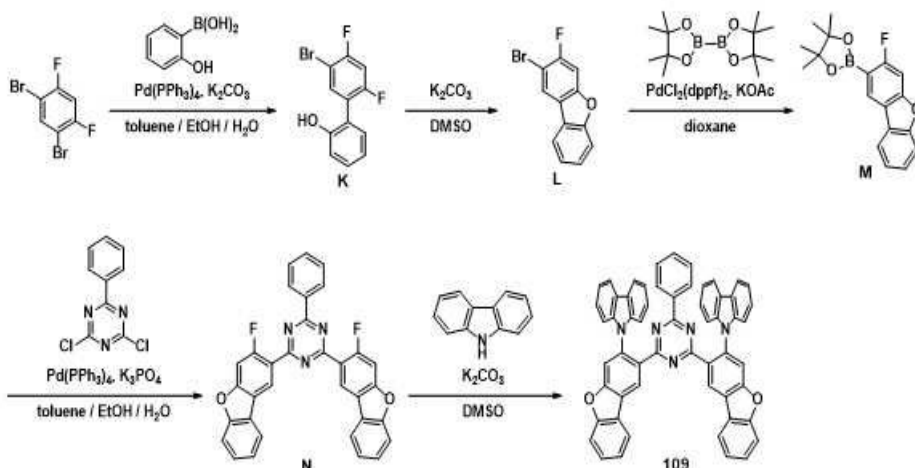
[0248] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 I (3.00 g), 2,4-Dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (0.65 g), $Pd(PPh_3)_4$ (0.33 g), K_3PO_4 (2.45 g) 를 탈기한 Toluene / Ethanol / 물의 혼합 용매 (10:1:2, 50

mL)에 용해하여, 80° C에서 10시간 동안 교반했다. 반응 후, 물을 더하여 CH₂Cl₂로 추출, 유기층을 모아 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 J를 2.27 g (수율 75%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 J의 분자량은 525이었다.

[0249] (화합물 107의 합성)

[0250] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 J (2.20 g), Carbazole (1.40 g), K₂CO₃ (2.89 g) 를 탈수 DMSO (30 mL)에 용해하여, 150℃에서 6시간 동안 교반했다. 실온으로 돌려놓은 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 흡수하여, CH₂Cl₂ (150 mL)에 용해하여, MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제하여 화합물 107을 2.75 g (수율 80%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 107의 분자량은 819이었다.

[0251] 4. 화합물 109의 합성



[0252]

[0253] (중간체 K의 합성)

[0254] 아르곤(Ar) 분위기 하, 500 mL의 삼구 플라스크에 1,5-Dibromo-2,4-difluorobenzene (10.00 g), (2-Hydroxyphenyl)boronic acid (5.07 g), Pd(PPh₃)₄ (2.13 g), K₂CO₃ (10.17 g) 를 탈기한 Toluene / Ethanol / 물의 혼합 용매 (10:1:2, 180 mL)에 용해하여, 80℃에서 10시간 동안 교반했다. 반응 후, 물을 더하여 CH₂Cl₂로 추출, 유기층을 모아 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 K를 8.91 g (수율 85%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 K의 분자량은 285이었다.

[0255] (중간체 L의 합성)

[0256] 아르곤(Ar) 분위기 하, 300 mL의 삼구 플라스크에 중간체 K (8.90 g), K₂CO₃ (8.63 g) 를 탈수 DMSO (100 mL)에 용해하여, 110℃에서 6시간 동안 교반했다. 실온으로 돌려놓은 후, 반응 용액을 1000 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 흡수하여, CH₂Cl₂ (300 mL)에 용해하여, MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피 및 재결정으로 정제하여 중간체 L을 7.20 g (수율 87%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 L의 분자량은 265이었다.

[0257] (중간체 M의 합성)

[0258] 아르곤(Ar) 분위기 하, 500 mL의 삼구 플라스크에 중간체 L (7.20 g), Bis(pinacolato)diboron (6.89 g), PdCl₂(dppf) (2.22 g), KOAc (5.33 g) 를 탈수 1,4-Dioxane (140 mL)에 용해하여, 90℃에서 8시간 동안 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 CH₂Cl₂로 추출, 유기층을 모아 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 M을 4.41 g (수율 52%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 M의 분자량은 312이었다.

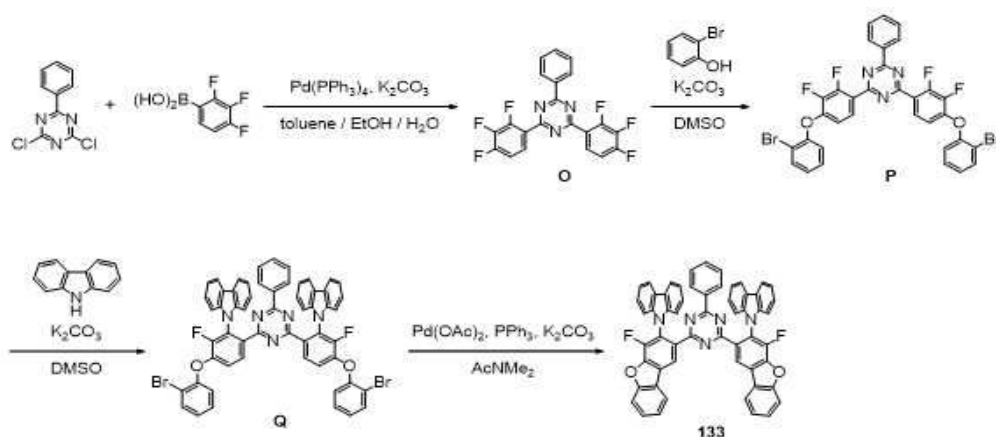
[0259] (중간체 N의 합성)

[0260] 아르곤(Ar) 분위기 하, 300 mL의 삼구 플라스크에 중간체 M (4.40 g), 2,4-Dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (1.59 g), Pd(PPh₃)₄ (0.81 g), K₃PO₄ (5.98 g) 를 탈기한 Toluene / Ethanol / 물의 혼합 용매 (10:1:2, 70 mL)에 용해하여, 80℃에서 10시간동안 교반했다. 반응 후, 물을 더하여 CH₂Cl₂로 추출, 유기층을 모아 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여, 중간체 N을 5.04 g (수율 68%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 N의 분자량은 525이었다.

[0261] (화합물 109의 합성)

[0262] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 중간체 N (2.50 g), Carbazole (1.59 g), K₂CO₃ (3.28 g) 를 탈수DMSO (30 mL)에 용해하여, 150℃에서 6시간 동안 교반했다. 실온으로 돌려놓은 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 흡수하여, CH₂Cl₂ (150 mL)에 용해하여, MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제하여, 화합물 109를 3.08 g (수율 79%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 109의 분자량은 819이었다.

[0263] (화합물 133의 합성)



[0264] Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, 2,4-Dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (5.00 g), 2,3,4-Trifluorophenylboronic acid (7.78 g), Pd(PPh₃)₄ (2.55 g), K₂CO₃ (12.2 g) 를 탈기 한 Toluene / Ethanol / 수의 혼합 용매 (10:1:2, 200 mL)에 용해해, 80℃로 8시간 교반 했다. 반응 후, 물을 더해 CH₂Cl₂로 추출해, 유기층을 정리해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, 중간체 O를 4.24 g (수율 46%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 O의 분자량은, 417이었다.

[0265] Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, O (4.00 g), 2-Bromophenol (3.32 g), K₂CO₃ (5.30 g) 를 탈수 DMSO (150 mL)에 용해해, 60℃로 3시간교반 했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 1000 mL의 물에 따라, 교반 했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (300 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, P를 4.15 g (수율 60%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 P의 분자량은, 723이었다.

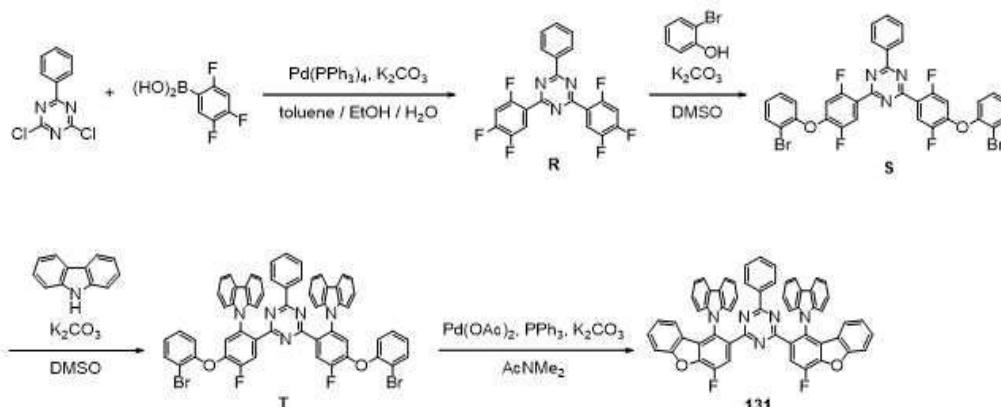
[0266] Ar분위기하, 300 mL의 3구 Flask에, P (4.00 g), Carbazole (1.85 g), K₂CO₃ (3.06 g) 를 탈수 DMSO (50 mL)에 용해해, 100℃로 3시간교반 했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반 했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (200 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, Q를 5.34 g (수율 95%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 Q의 분자량은, 1017이었다.

[0267] Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, Q (5.00 g), Pd(OAc)₂ (0.11 g), K₂CO₃ (2.04 g), PPh₃ (0.26 g) 를 탈수 Dimethylacetamide (50 mL)에 용해해, 140℃로 1시간교반 했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (200 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, 133을 3.36 g (수율 80%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정

[0268] Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, Q (5.00 g), Pd(OAc)₂ (0.11 g), K₂CO₃ (2.04 g), PPh₃ (0.26 g) 를 탈수 Dimethylacetamide (50 mL)에 용해해, 140℃로 1시간교반 했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (200 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, 133을 3.36 g (수율 80%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정

된 133의 분자량은, 855였다

[0269] (화합물 131의 합성)



[0270]

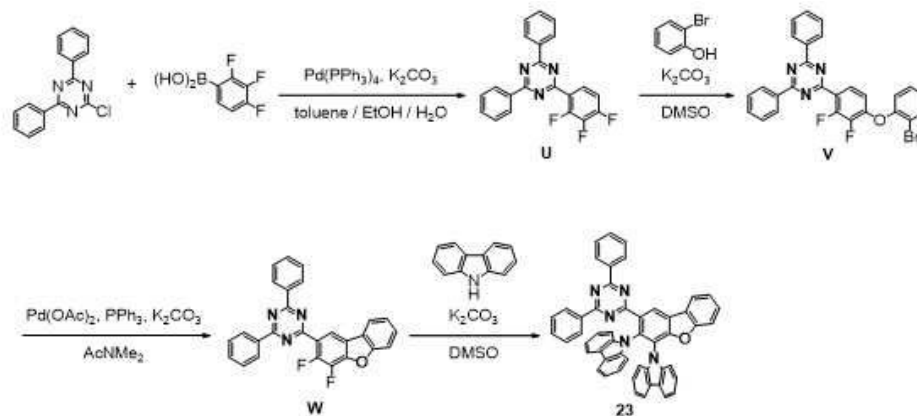
[0271] Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, 2,4-Dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (5.00 g), 2,4,5-Trifluorophenylboronic acid (7.78 g), Pd(PPh₃)₄ (2.55 g), K₂CO₃ (12.2 g) 를 탈기 한 Toluene / Ethanol / 수의 혼합 용매 (10:1:2, 200 mL)에 용해해, 80℃로 8시간 교반했다. 반응 후, 물을 더해 CH₂Cl₂로 추출해, 유기층을 정리해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, 중간체 R를 4.80 g (수율 52%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 R의 분자량은, 417이었다.

[0272] Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, R (4.00 g), 2-Bromophenol (3.32 g), K₂CO₃ (5.30 g) 를 탈수 DMSO (150 mL)에 용해해, 60℃로 3시간 교반했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 1000 mL의 물에 따라, 교반 했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (300 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, S를 4.51 g (수율 65%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 S의 분자량은, 723이었다.

[0273] Ar분위기하, 300 mL의 3구 Flask에, S (4.00 g), Carbazole (1.85 g), K₂CO₃ (3.06 g) 를 탈수 DMSO (50 mL)에 용해해, 100℃로 3시간 교반했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반 했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (200 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, T를 5.06 g (수율 90%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 T의 분자량은, 1017이었다.

[0274] Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, T (5.00 g), Pd(OAc)₂ (0.11 g), K₂CO₃ (2.04 g), PPh₃ (0.26 g) 를 탈수 Dimethylacetamide (50 mL)에 용해해, 140℃로 1시간교반 했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반 했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (200 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제해, 133을 3.45 g (수율 82%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 131의 분자량은, 855였다.

[0275] (화합물23의 합성)



[0276]

[0277]

Ar분위기하, 300 mL의 3구 Flask에, 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (5.00 g), 2,3,4-Trifluorophenylboronic acid (3.29 g), Pd(PPh₃)₄ (1.08 g), K₂CO₃ (5.16 g) 를 탈기 한 Toluene / Ethanol / 수의 혼합 용매 (10:1:2, 100 mL)에 용해해, 80℃로 8시간 교반 했다. 반응 후, 물을 더해 CH₂Cl₂로 추출해, 유기층을 정리해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, 중간체 U를 4.07 g (수율 60%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 U의 분자량은, 363이었다.

[0278]

Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, U (4.00 g), 2-Bromophenol (1.90 g), K₂CO₃ (3.80 g) 를 탈수 DMSO (50 mL)에 용해해, 60℃로 3시간 교반 했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반 했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (200 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, V를 4.09 g (수율 72%) 얻었다. FAB-MS측정에 의해 측정되면 V의 분자량은, 516이었다.

[0279]

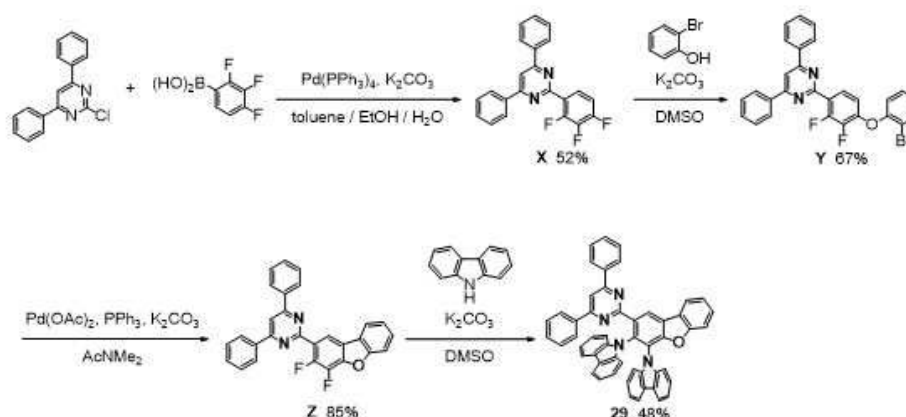
Ar분위기하, 500 mL의 3구 Flask에, V (4.00 g), Pd(OAc)₂ (0.08 g), K₂CO₃ (1.61 g), PPh₃ (0.20 g) 를 탈수 Dimethylacetamide (40 mL)에 용해해, 140℃로 1시간교반 했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반 했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (200 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, W를 2.36 g (수율 70%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 W의 분자량은, 435였다.

[0280]

Ar분위기하, 300 mL의 3구 Flask에, W (2.00 g), Carbazole (1.54 g), K₂CO₃ (3.17 g) 를 탈수 DMSO (30 mL)에 용해해, 180℃로 8시간 교반 했다. 실온에 되돌린 후, 반응 용액을 300 mL의 물에 따라, 교반 했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수해, CH₂Cl₂ (200 mL)에 용해해 MgSO₄로 건조한 후, 용매를 감압유거 했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제 해, 23을 1.94 g (수율 58%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 23의 분자량은, 729였다.

[0281]

(화합물29의 합성)



[0282]

[0283]

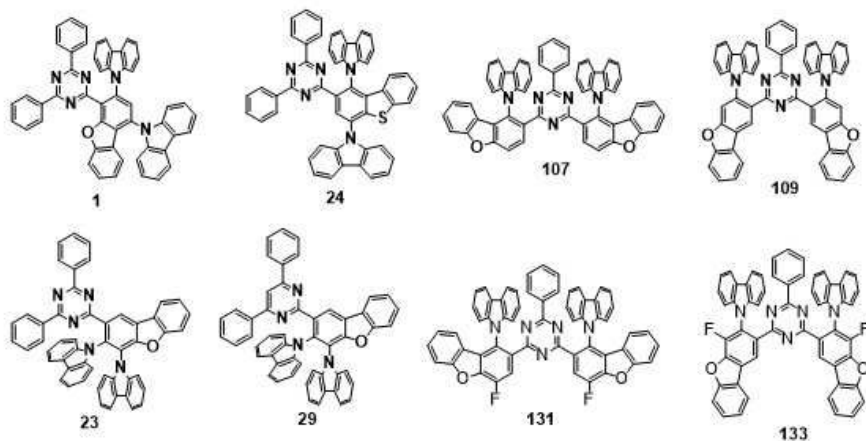
23의 합성과 같게, 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신에 2-Chloro-4,6-diphenylpyrimidine 를 이용해

화합물 29 를 합성했다.

(소자 작성예)

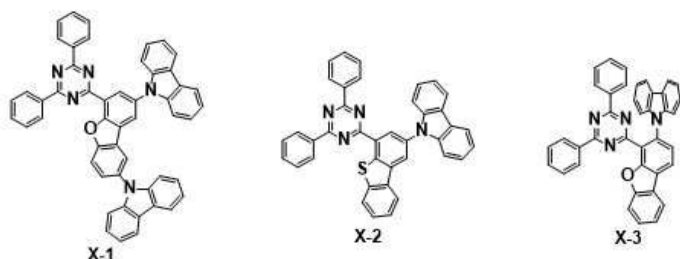
상술한 화합물 1, 24, 107 및 109를 발광층 도펀트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[실시예 화합물]



하기 화합물 X-1 내지 X-3을 발광층 도펀트 재료로 사용하여 비교예 1 내지 3의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[비교예 화합물]



실시예 화합물 및 비교예 화합물의 S1준위와 T1준위를 비경험적 분자 궤도법으로 계산을 시행했다. 구체적으로는 Gaussian사제 Gaussian09를 이용하여, 범함수에 B3LYP, 기저함수에 6-31G(d)를 이용하여 계산을 시행했다. 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. ΔE_{ST} 는 일중항 에너지 레벨과 삼중항 에너지 레벨의 차이를 의미한다.

표 1

	S1 에너지 레벨(eV)	T1 에너지 레벨(eV)	ΔE_{ST}
실시예 화합물 1	2.84	2.75	0.11
실시예 화합물 24	2.97	2.87	0.10
실시예 화합물 107	2.97	2.90	0.07
실시예 화합물 109	2.96	2.87	0.09
실시예 화합물 23	2.91	2.81	0.10
실시예 화합물 29	3.01	2.90	0.11
실시예 화합물 131	2.92	2.85	0.07
실시예 화합물 133	2.89	2.81	0.08
비교예 화합물 X-1	2.76	2.58	0.18
비교예 화합물 X-2	2.75	2.56	0.19
비교예 화합물 X-3	2.89	2.74	0.15

상기 표 1의 결과를 참조하면, 실시예 화합물은 모두 작은 ΔE_{ST} 값을 나타내고 있어, 열 활성 지연 형광용 재료

로 적절하게 사용 가능해 보이나, 비교예 화합물들은 비교적 큰 ΔE_{ST} 값을 나타내고 있어, 열 활성 지연 형광용 재료로 적절하지 않다고 생각된다.

[0294] 실시예 1 내지 4 및 비교예 1 내지 3의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm의 제1 전극을 형성하고, HAT-CN으로 10nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, NPB로 80nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, mCP로 5nm 두께의 전자 저지층을 형성하고, DPEPO에 실시예 화합물 또는 비교예 화합물을 18% 도핑한 20nm 두께의 발광층을 형성하고, DPEPO로 10nm 두께의 정공 저지층을 형성하고, TPBi로 30nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 0.5nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al로 100nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 모두 진공 증착법으로 형성하였다.

[0295] 실시예 1 내지 4 및 비교예 1 내지 3에 따른 유기 전계 발광 소자의 최대 발광 파장 및 외부 양자 효율을 측정하여, 하기 표 2에 나타내었다. 표 2의 EQE는 10 mA/cm²에서의 값이다. 제작한 유기 전계 발광 소자의 발광 특성의 평가에는, 하마마츠 포토닉스 제품 C9920-11회도 배향 특성 측정 장치를 이용했다.

표 2

[0296]	발광층 도펀트 재료	λ_{max} (nm)	EQE (%)
실시예 1	실시예 화합물 1	470	9
실시예 2	실시예 화합물 24	463	11
실시예 3	실시예 화합물 107	459	14
실시예 4	실시예 화합물 109	461	13
실시예 5	실시예 화합물 23	460	13
실시예 6	실시예 화합물 29	452	10
실시예 7	실시예 화합물 131	464	15
실시예 8	실시예 화합물 133	462	14
비교예 1	비교예 화합물 X-1	474	5
비교예 2	비교예 화합물 X-2	472	2
비교예 3	비교예 화합물 X-3	466	3

[0297] 상기 표 2의 결과를 참조하면, 실시예 1 내지 8은 비교예 1 내지 3에 비해 고효율화되었음을 볼 수 있다. 실시예 화합물들의 아진기는 전자 수용부로 기능하고, 카바졸기는 전자 제공부로 기능하여 열 활성 지연 형광 발광 재료의 특성을 발휘하였기 때문이라고 생각된다. 아진기와 카바졸기가 오르쏘 관계로 치환되어 전자 수용부와 전자 제공부가 뒤트리게 되어, HOMO와 LUMO가 효율적으로 분리되어 열 활성 지연 형광 발광 재료의 특성을 발휘한 것으로 보인다.

[0298] 한편, 한편, 비교예 1에서는 Azine과 Carbazolyl기가 ortho 위치에 치환되어있지 않기 때문에 Donor와 Acceptor가 충분히 뒤트리지 않아 TADF를 발현하지 않는다고 생각된다. 비교예 2 및 3의 경우, ΔE_{ST} 값이 비교적 크며, 1개의 카바졸기만 포함하고 있어, 전자 제공부의 기능이 약해 역향간 전이가 충분히 일어나지 않아 열 활성 지연 형광 재료로 특성을 발휘하지 않은 것으로 판단된다.

[0299] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 심청색 발광용 열 활성 지연 형광 도펀트로 활용 가능하다.

[0300] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 심청색을 구현함과 동시에 효율이 우수하다.

[0301] 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

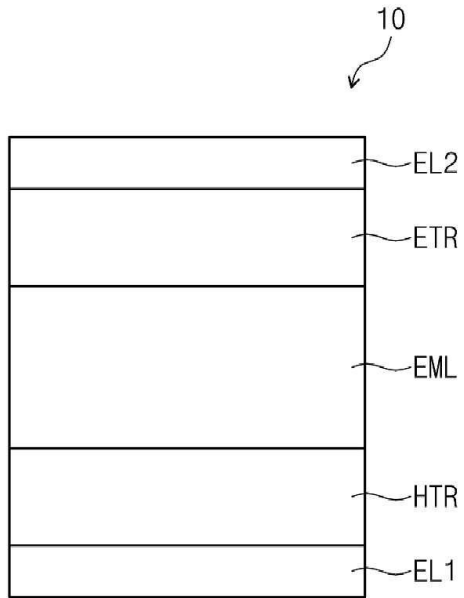
[0302] 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극
HTR: 정공 수송 영역 HIL: 정공 주입층
HTL: 전자 수송층 EML: 발광층

ETR: 전자 수송 영역 ETL: 전자 수송층

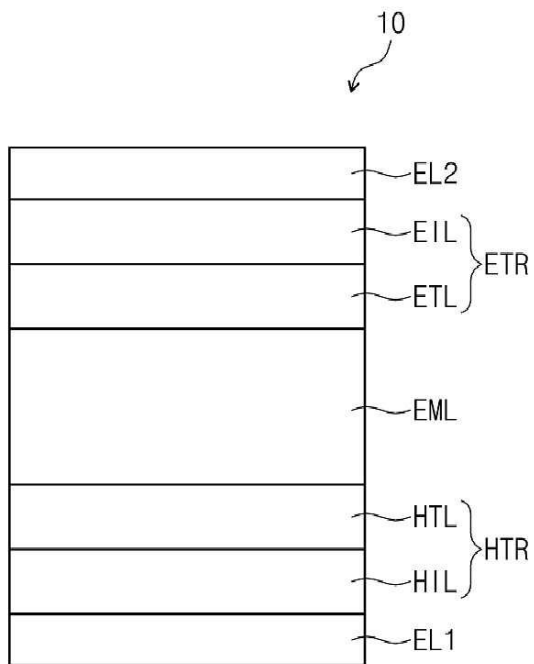
EIL: 전자 주입층 EL2: 제2 전극

도면

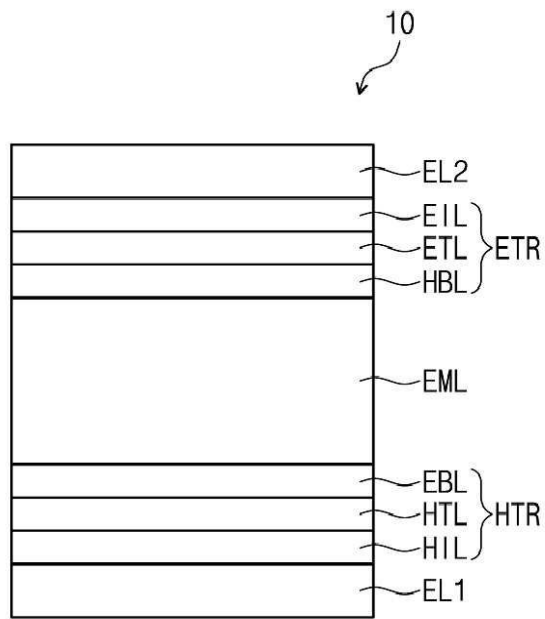
도면1



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杂环化合物		
公开(公告)号	KR1020200001641A	公开(公告)日	2020-01-07
申请号	KR1020180073189	申请日	2018-06-26
[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 C07D405/14 C07D409/14 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0071 C07D405/14 C07D409/14 H01L51/5012 H01L51/5024 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 C09K2211/1018 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/5096		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机电致发光器件技术领域本发明涉及一种有机电致发光器件，其包括第一电极，设置在第一电极上的空穴传输区，设置在空穴传输区上的发光层，设置在发光层上的电子传输区以及第二电极。提供在电子传输区域上。发光层包括杂环化合物，该杂环化合物包括含氮单环，连接基和两个或更多个咔唑部分。接头是取代或未取代的二苯并咪唑基团，或取代或未取代的二苯并噻吩基。咔唑基团和含氮单环中的至少一个以邻位关系被取代为连接基。因此，本发明提供了优异的效率。

