



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0098292
 (43) 공개일자 2019년08월22일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
 (52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0069 (2013.01)
 (21) 출원번호 10-2018-0017147
 (22) 출원일자 2018년02월12일
 심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
 경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
 (72) 발명자
이정섭
 경기도 수원시 장안구 화산로187번길 19 (천천동, 천천 삼성래미안) 101동 1104호
정혜인
 경기도 수원시 권선구 권선로694번길 26 (권선동, 권선SKVIEW) 105동 1203호
 (74) 대리인
특허법인 고려

전체 청구항 수 : 총 20 항

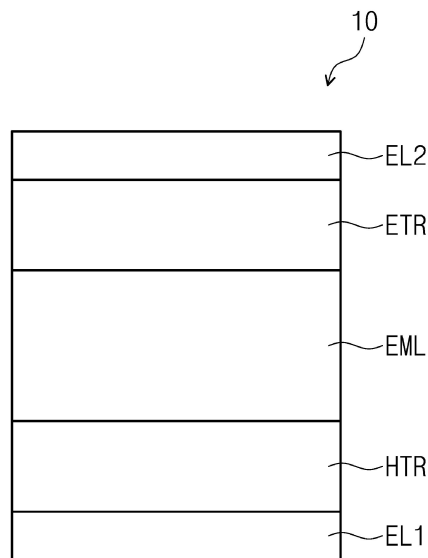
(54) 발명의 명칭 **유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 헤테로환 화합물**

(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 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 화학식 1에서, D₁ 및 D₂는 각각 독립적으로

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1

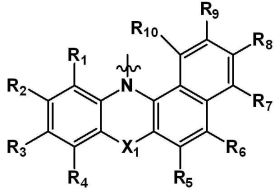


하기 화학식 2로 표시되고, A는 하기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시된다.

[화학식 1]



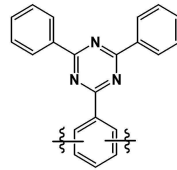
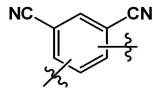
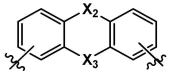
[화학식 2]



[화학식 3-1]

[화학식 3-2]

[화학식 3-3]



(52) CPC특허분류

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/0074 (2013.01)

C09K 2211/1033 (2013.01)

C09K 2211/1037 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

C09K 2211/1066 (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,

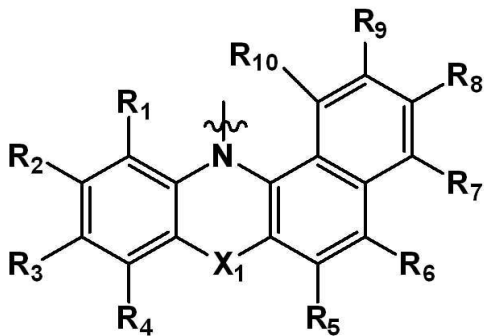
상기 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]

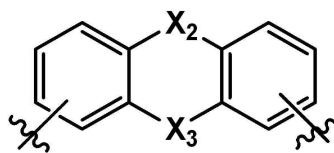


상기 화학식 1에서, D₁ 및 D₂는 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되고, A는 하기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시되며,

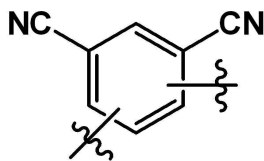
[화학식 2]



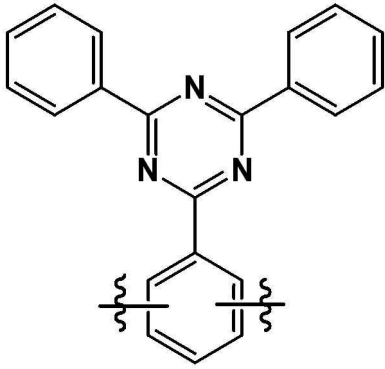
[화학식 3-1]



[화학식 3-2]



[화학식 3-3]



상기 화학식 2에서,

X_1 은 S, O, 또는 CY_1Y_2 이고,

R_1 내지 R_{10} , Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이며,

상기 화학식 3-1에서,

X_2 는 SO_2 또는 O이고,

X_3 는 직접결합(direct linkage) 또는 CY_3Y_4 이며,

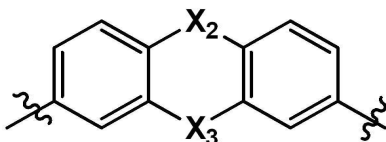
Y_3 및 Y_4 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

청구항 2

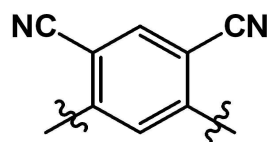
제1항에 있어서,

A는 하기 화학식 4-1 내지 4-3 중 어느 하나로 표시되는 것은 유기 전계 발광 소자:

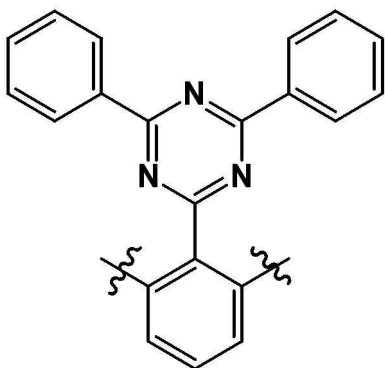
[화학식 4-1]



[화학식 4-2]



[화학식 4-3]



상기 화학식 4-1에서,

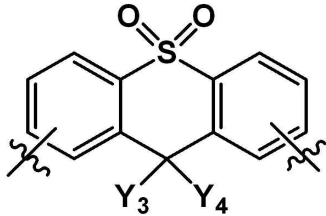
X_2 및 X_3 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 3

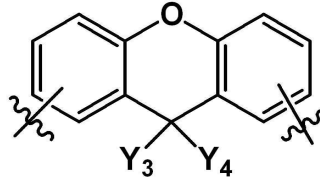
제1항에 있어서,

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

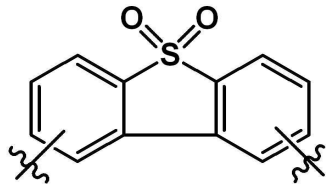
[화학식 3-1-1]



[화학식 3-1-2]



[화학식 3-1-3]



상기 화학식 3-1-1 및 3-1-2에서,

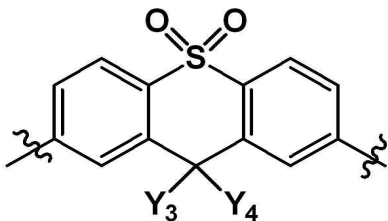
Y_3 및 Y_4 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 4

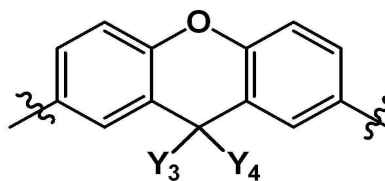
제1항에 있어서,

상기 화학식 3-1은 하기 화학식 3-1-4 내지 3-1-6 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

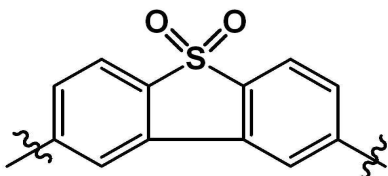
[화학식 3-1-4]



[화학식 3-1-5]



[화학식 3-1-6]



상기 화학식 3-1-4 및 3-1-5에서,

Y_3 및 Y_4 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 5

제1항에 있어서,

D₁ 및 D₂ 중 적어도 하나는 X₁이 CY₁Y₂이고, Y₁ 및 Y₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하며,

A는 상기 화학식 3-3으로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 6

제5항에 있어서,

Y₁ 및 Y₂가 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 7

제1항에 있어서,

D₁ 및 D₂가 서로 동일한 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 8

제1항에 있어서,

D₁ 및 D₂가 서로 상이한 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고,

상기 도펀트가 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

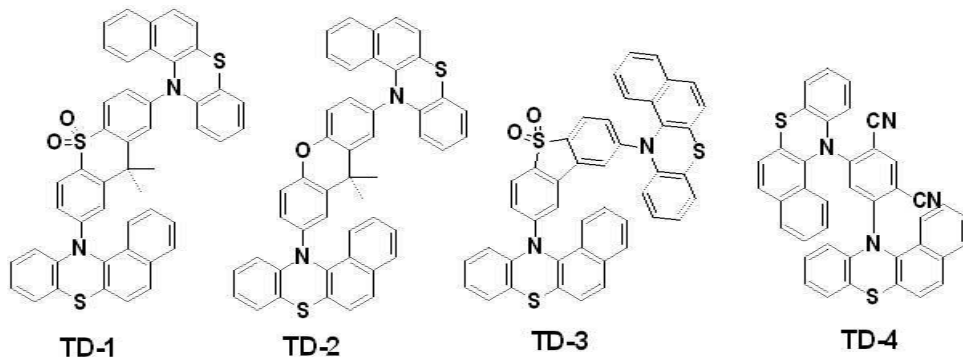
상기 도펀트는 열 활성화 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence) 도펀트인 것인 유기 전계 발광 소자.

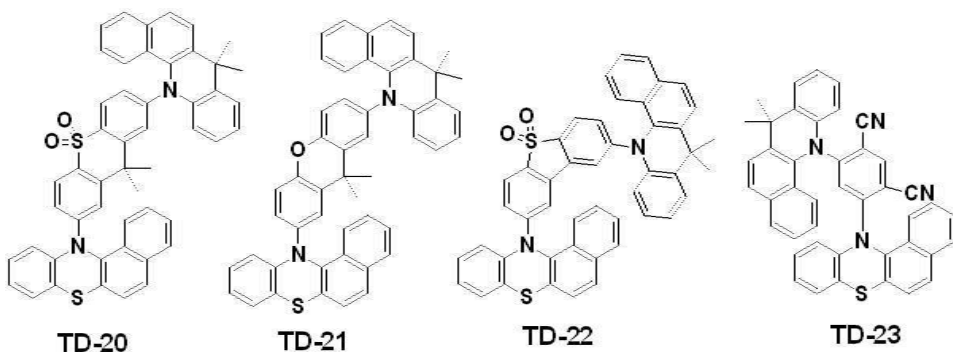
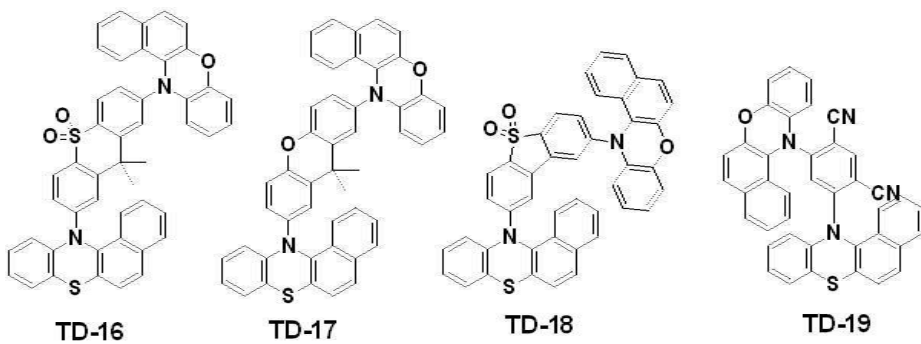
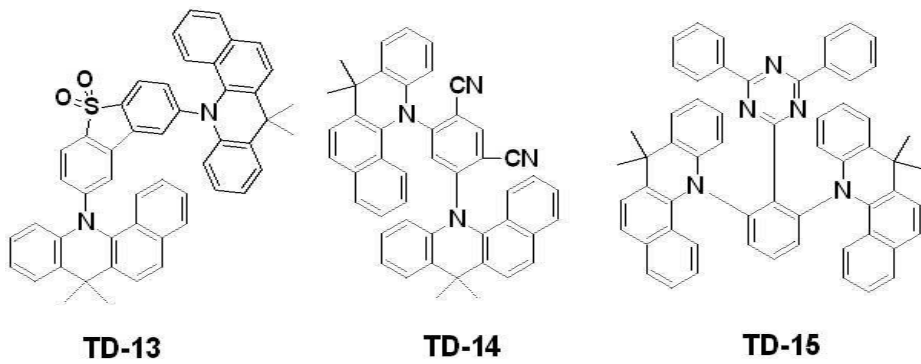
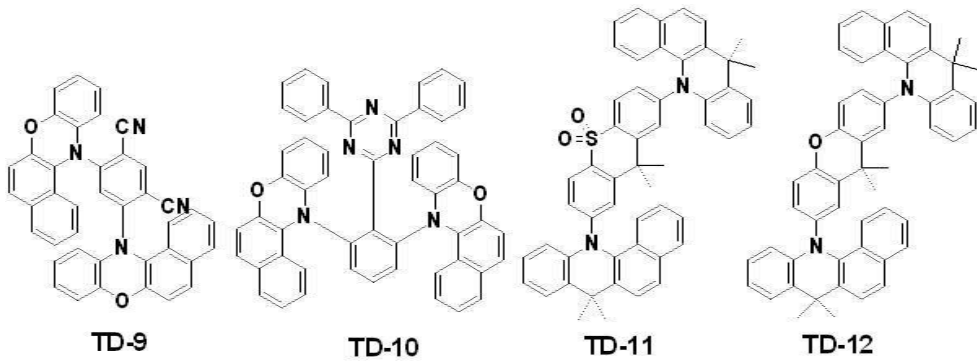
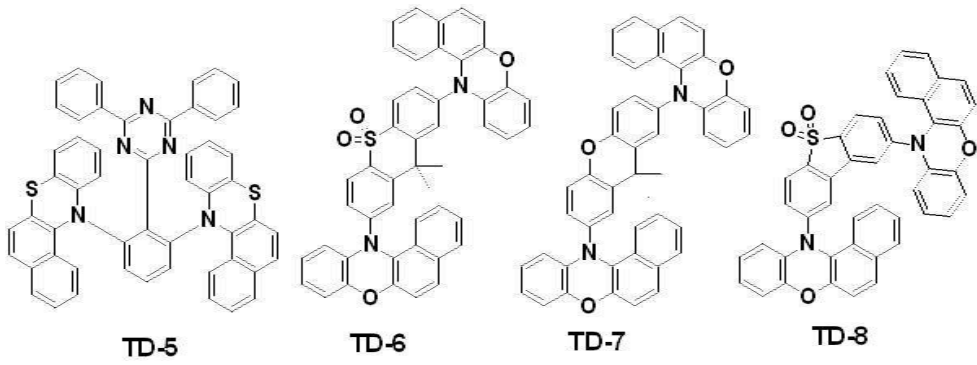
청구항 11

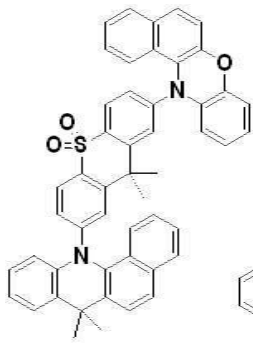
제1항에 있어서,

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

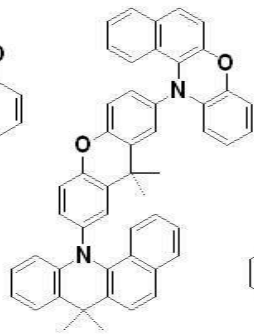
[화합물군 1]



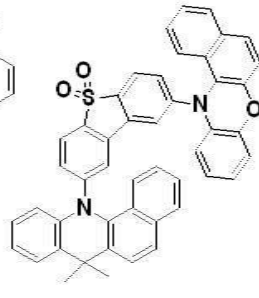




TD-24



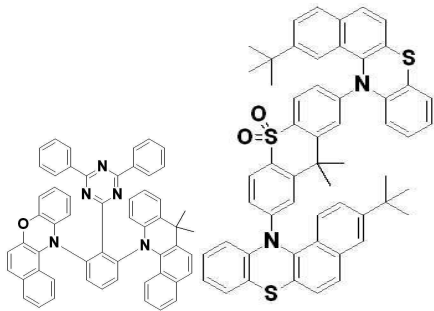
TD-25



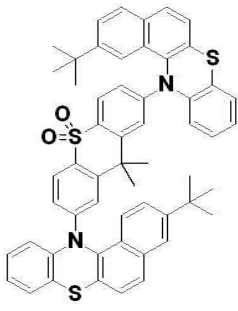
TD-26



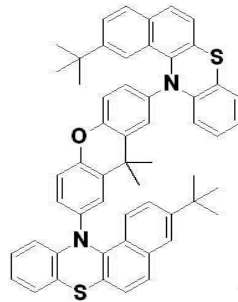
TD-27



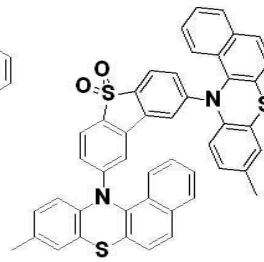
TD-28



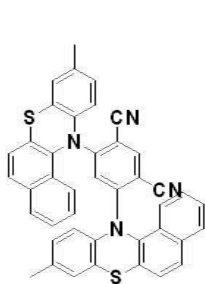
TD-29



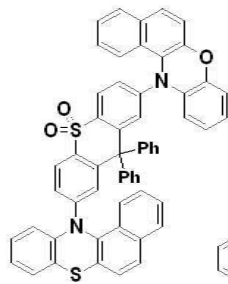
TD-30



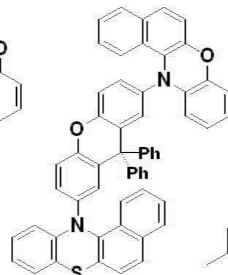
TD-31



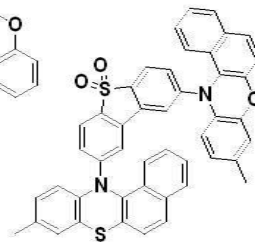
TD-32



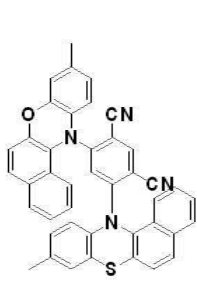
TD-33



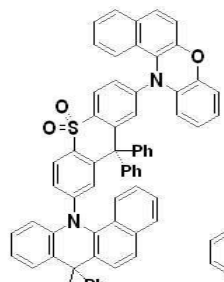
TD-34



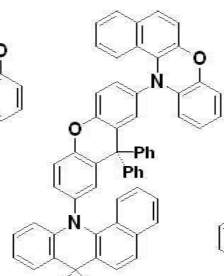
TD-35



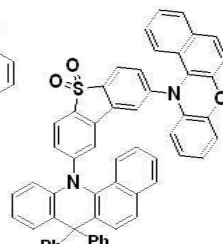
TD-36



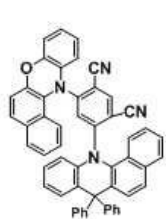
TD-37



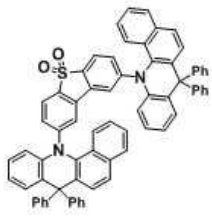
TD-38



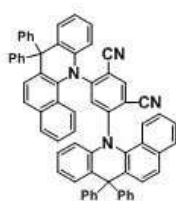
TD-39



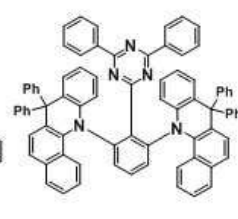
TD-40



TD-41



TD-42



TD-43

청구항 12

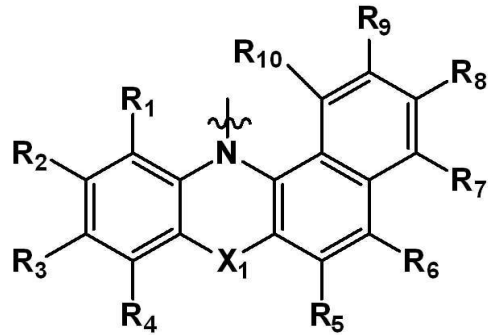
상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물:

[화학식 1]

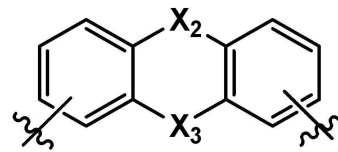


상기 화학식 1에서, D₁ 및 D₂는 각각 독립적으로 상기 화학식 2로 표시되고, A는 상기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시되며,

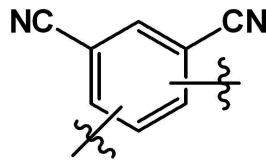
[화학식 2]



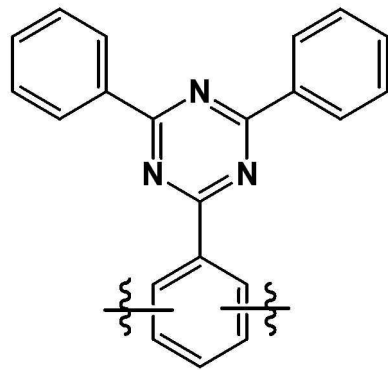
[화학식 3-1]



[화학식 3-2]



[화학식 3-3]



상기 화학식 2에서,

X₁은 S, O, 또는 CY₁Y₂이고,

R₁ 내지 R₁₀, Y₁ 및 Y₂는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이며,

상기 화학식 3-1에서,

X₂는 SO₂ 또는 O이고,

X₃는 직접결합 또는 CY₃Y₄이며,

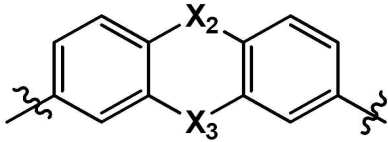
Y_3 및 Y_4 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

청구항 13

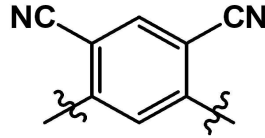
제12항에 있어서,

A는 하기 화학식 4-1 내지 4-3 중 어느 하나로 표시되는 것은 헤테로환 화합물:

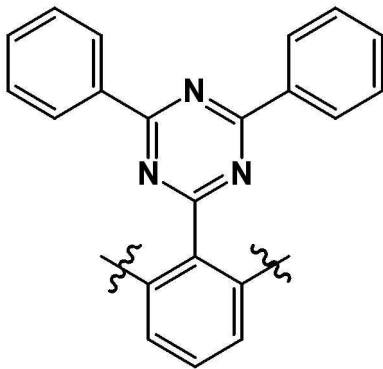
[화학식 4-1]



[화학식 4-2]



[화학식 4-3]



상기 화학식 4-1에서,

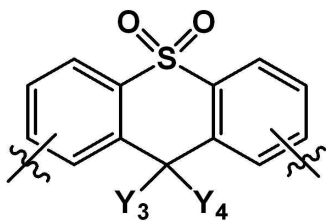
X_2 및 X_3 는 청구항 12에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 14

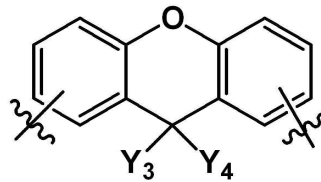
제12항에 있어서,

상기 화학식 3-1은 하기 화학식 3-1-1 내지 3-1-3 중 어느 하나로 표시되는 것은 헤테로환 화합물:

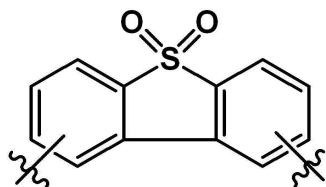
[화학식 3-1-1]



[화학식 3-1-2]



[화학식 3-1-3]



상기 화학식 3-1-1 및 3-1-2에서,

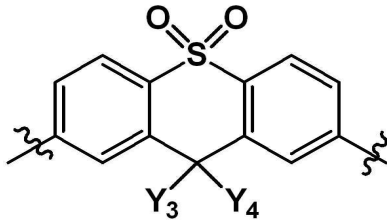
Y_3 및 Y_4 는 청구항 12에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 15

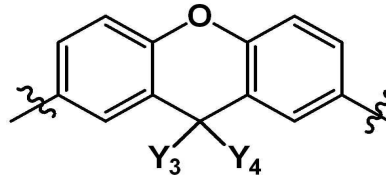
제12항에 있어서,

상기 화학식 3-1은 하기 화학식 3-1-4 내지 3-1-6 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로환 화합물:

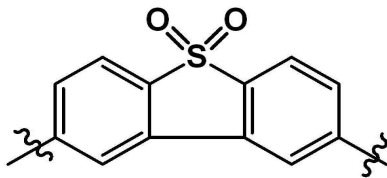
[화학식 3-1-4]



[화학식 3-1-5]



[화학식 3-1-6]



상기 화학식 3-1-4 및 3-1-5에서,

Y_3 및 Y_4 는 청구항 12에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 16

제12항에 있어서,

D_1 및 D_2 중 적어도 하나는 X_1 이 CY_1Y_2 이고, Y_1 및 Y_2 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하며,

A는 상기 화학식 3-3으로 표시되는 것인 헤테로환 화합물.

청구항 17

제16항에 있어서,

Y_1 및 Y_2 가 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기인 것인 헤테로환 화합물.

청구항 18

제12항에 있어서,

D_1 및 D_2 가 서로 동일한 것인 헤테로환 화합물.

청구항 19

제12항에 있어서,

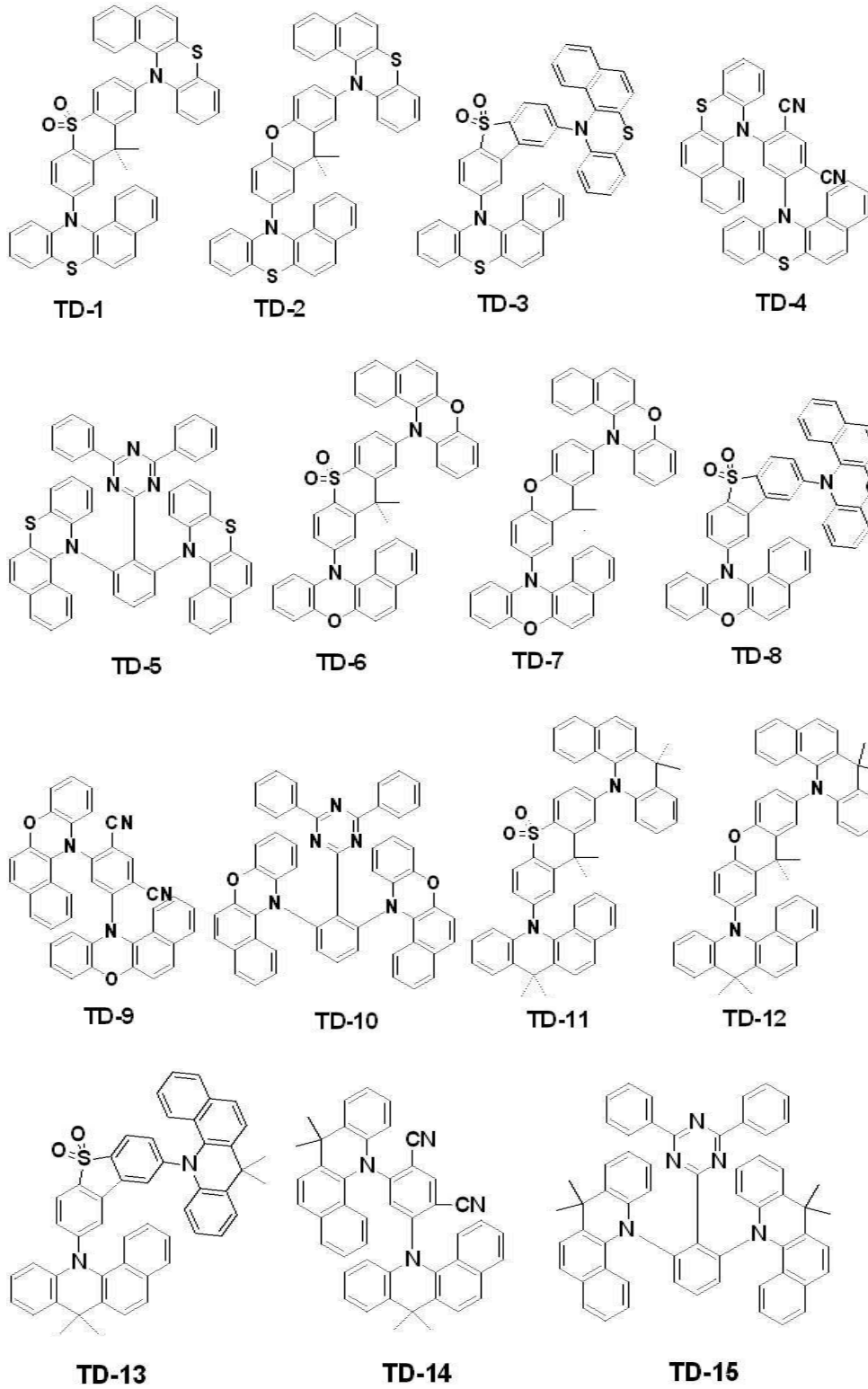
D_1 및 D_2 가 서로 상이한 것인 헤테로환 화합물.

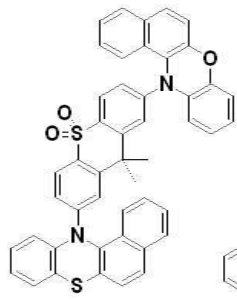
청구항 20

제12항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화합물군 1 에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것인 헤테로환 화합물:

[화합물군 1]

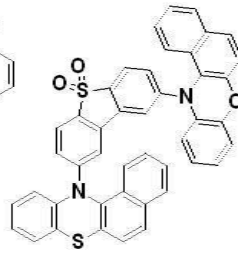




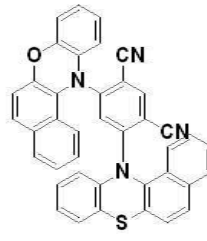
TD-16



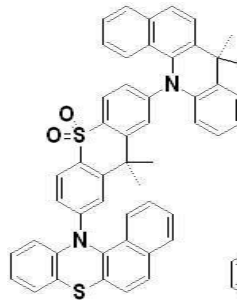
TD-17



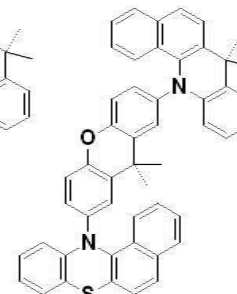
TD-18



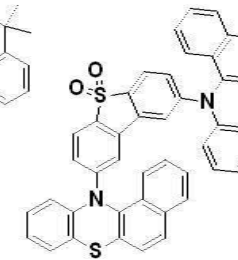
TD-19



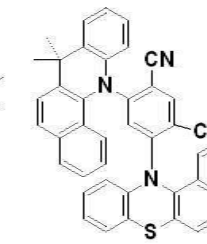
TD-20



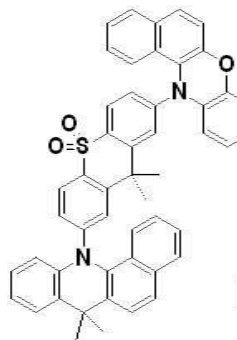
TD-21



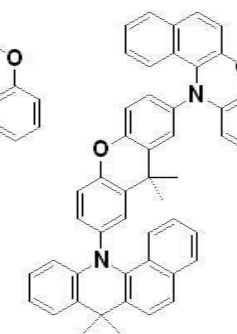
TD-22



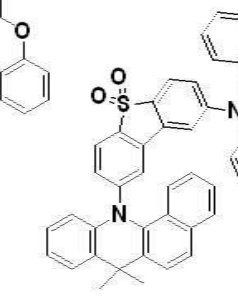
TD-23



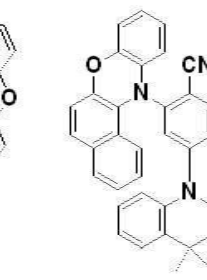
TD-24



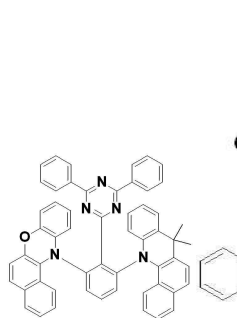
TD-25



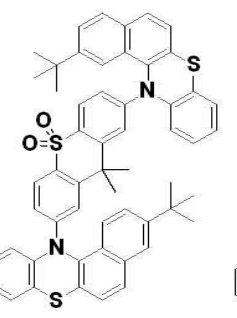
TD-26



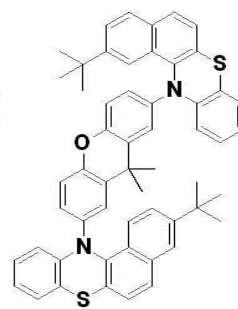
TD-27



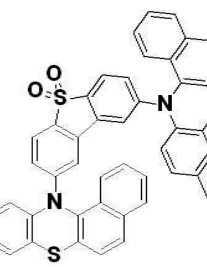
TD-28



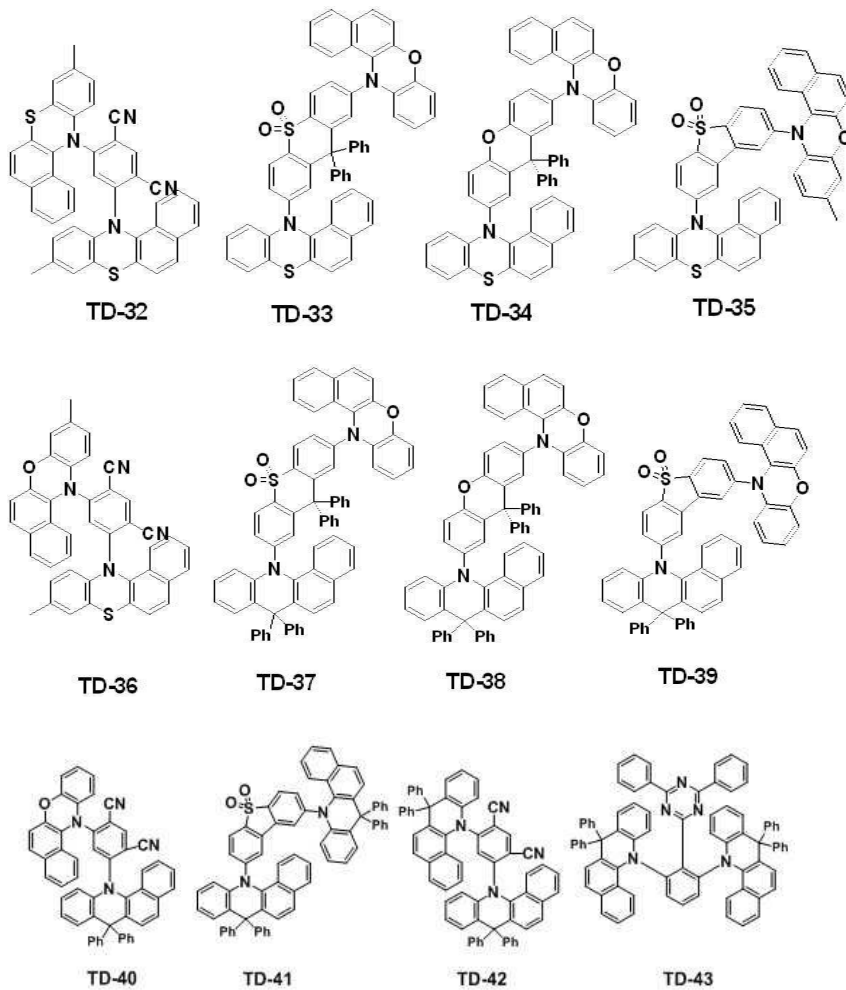
TD-29



TD-30



TD-31



발명의 설명

기술분야

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

배경기술

[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 다르고, 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 변경이 가능하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

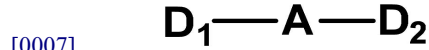
[0004] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 헤테로환 화합물을 제공하는 것을 일 목적으로 하며, 보다 상

세하게는 열 활성화 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence)을 방사하는 유기 전계 발광 소자, 및 이에 사용되는 헤테로환 화합물을 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

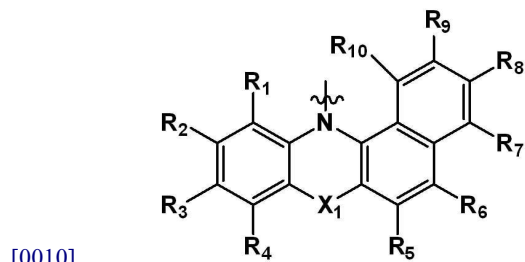
[0005] 본 발명의 일 실시예는 제1 전극, 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층, 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역 및 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고, 발광층이 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0006] [화학식 1]

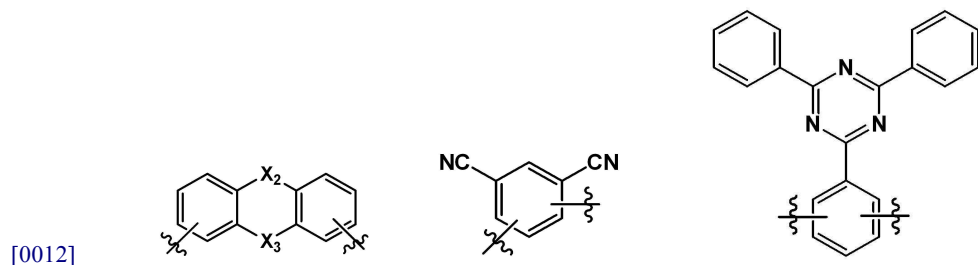


[0008] 화학식 1에서, D_1 및 D_2 는 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되고, A는 하기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시된다.

[0009] [화학식 2]



[0011] [화학식 3-1] [화학식 3-2] [화학식 3-3]



[0013] 화학식 2에서, X_1 은 S, O, 또는 CY_1Y_2 이고, R_1 내지 R_{10} , Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

[0014] 화학식 3-1에서, X_2 는 SO_2 또는 O이고, X_3 는 직접결합(direct linkage) 또는 CY_3Y_4 이며, Y_3 및 Y_4 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

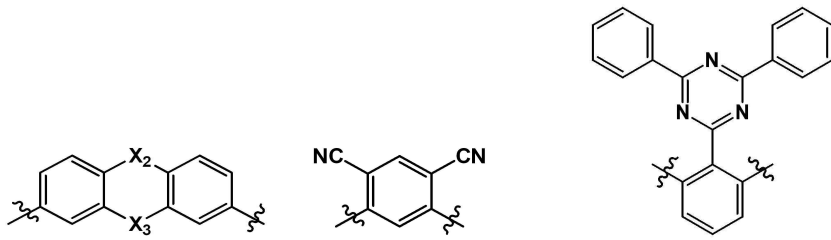
[0015] 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 도펀트가 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0016] 도펀트는 열 활성화 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence) 도펀트인 것일 수 있다.

[0017] 본 발명의 일 실시예는 유기 전계 발광 소자용 헤테로환 화합물을 제공하며, 헤테로환 화합물은 전술한 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물이다.

[0018] 화학식 1에서, A는 하기 화학식 4-1 내지 4-3 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0019] [화학식 4-1] [화학식 4-2] [화학식 4-3]

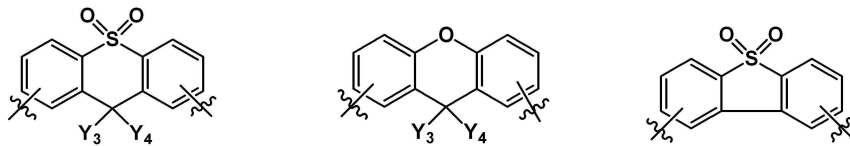


[0020]

[0021] 화학식 4-1에서, X_2 및 X_3 는 전술한 바와 동일하다.

[0022] 화학식 3-1은 하기 화학식 3-1-1 내지 3-1-3 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0023] [화학식 3-1-1] [화학식 3-1-2] [화학식 3-1-3]

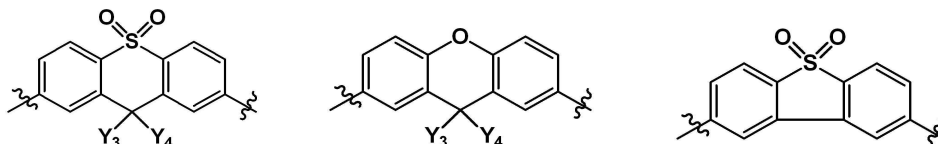


[0024]

[0025] 화학식 3-1-1 및 3-1-2에서, Y_3 및 Y_4 는 전술한 바와 동일하다.

[0026] 화학식 3-1은 하기 화학식 3-1-4 내지 3-1-6 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0027] [화학식 3-1-4] [화학식 3-1-5] [화학식 3-1-6]



[0028]

[0029] 화학식 3-1-4 및 3-1-5에서, Y_3 및 Y_4 는 전술한 바와 동일하다.

[0030] D_1 및 D_2 중 적어도 하나는 X_1 이 CY_1Y_2 이고, Y_1 및 Y_2 는 전술한 바와 동일하며, A가 화학식 3-3으로 표시되는 것일 수 있다.

[0031] D_1 및 D_2 중 적어도 하나는 X_1 이 CY_1Y_2 이고, Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이며, A는 화학식 3-3으로 표시되는 것일 수 있다.

[0032] 화학식 1에서, D_1 및 D_2 가 서로 동일한 것일 수 있다.

[0033] 화학식 1에서, D_1 및 D_2 가 서로 상이한 것일 수 있다.

발명의 효과

[0034] 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 효율 이 우수하다.

도면의 간단한 설명

[0035] 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.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0036] 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.

- [0037] 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.
- [0038] 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, 부품 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.
- [0039] 먼저, 도 1 및 도 2를 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.
- [0040] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.
- [0041] 도 1 및 도 2를 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.
- [0042] 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)은 서로 마주하고 배치되며, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에는 복수의 유기층들이 배치될 수 있다. 복수의 유기층들은 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR)을 포함할 수 있다.
- [0043] 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.
- [0044] 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.
- [0045] 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 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.
- [0046] 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.
- [0047] 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 저지층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0048] 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.
- [0049] 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'-diphenyl-benzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyl-diphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile)등을 포함할 수도 있다.

[0050] 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]), HMPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl), mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene) 등을 포함할 수도 있다.

[0051] 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.

[0052] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0053] 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.

[0054] 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.

[0055] 발광층(EML)의 재료, 발광 파장 등에 관한 보다 구체적인 설명은 후술하도록 한다.

[0056] 전자 수송 영역(ETR)은 발광층(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 정공 저지층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0057] 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.

[0058] 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/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.

[0059] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레

이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0060] 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, 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, 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), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Beq₂(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함하는 것일 수 있다. 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.

[0061] 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.

[0062] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층을 포함할 수 있다. 정공 저지층은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 및 Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0063] 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.

[0064] 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.

[0065] 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.


[0066] 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.

[0067] 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.

[0068] 본 발명의 일 실시예는 유기 전계 발광 소자용 헤테로환 화합물을 제공한다. 발광층(EML)은 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함한다. 즉, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 유기 전계 발광 소

자(10)의 발광층(EML) 재료로 사용될 수 있다.

[0069] 이하, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물에 대해 구체적으로 설명한다.

[0070] 본 명세서에서,  는 연결되는 부위를 의미한다.

[0071] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 바이페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다. 헤테로 고리기는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리(헤테로아릴기)를 포함한다.

[0072] 예를 들어, 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 알킬기, 및 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다.

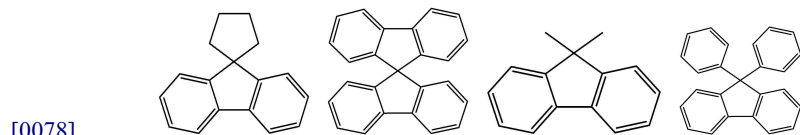
[0073] 본 명세서에서, 할로겐 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.

[0074] 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 6 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2- 에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-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.

[0075] 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-부타디에닐 아릴기, 스티레닐기, 스티릴비닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0076] 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, 퀴터페닐기, 퀴크페닐기, 섹시페닐기, 바이페닐렌기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0077] 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.



[0079] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 헤테로 원자로 O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다.

[0080] 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.

[0081] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸

붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0082] 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.

[0083] 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.

[0084] 본 명세서에서, 포스핀 설파이드기는 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환될 수 있다.

[0085] 본 명세서에서, “직접결합(direct linkage)”은 단일 결합(single bond)을 포함할 수 있다.

[0086] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0087] [화학식 1]

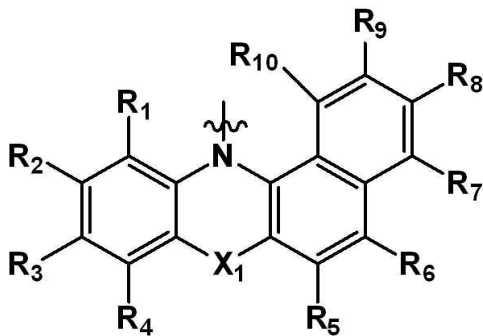


[0088]

[0089] 화학식 1에서, D₁ 및 D₂는 각각 전자 공여성기(electron-donating group)이고, A는 전자 수용성기(electron-accepting group)이다. 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 전자 공여성기와 전자 수용성기가 하나의 분자 내에서 분리되어 있으며, 2개의 전자 공여성기를 포함한다.

[0090] 화학식 1에서, D₁ 및 D₂는 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시된다.

[0091] [화학식 2]



[0092]

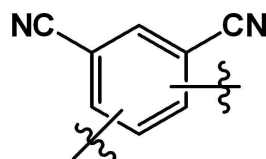
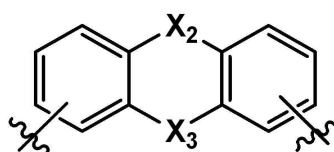
[0093] 화학식 2에서, X₁은 S, O, 또는 CY₁Y₂이고, R₁ 내지 R₁₀, Y₁ 및 Y₂는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

[0094] D₁ 및 D₂는 서로 동일한 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, D₁ 및 D₂는 서로 상이한 것일 수도 있다.

[0095] 화학식 1에서, A는 하기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시된다.

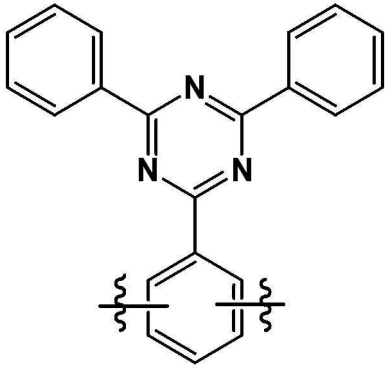
[0096] [화학식 3-1]

[화학식 3-2]



[0097]

[0098] [화학식 3-3]



[0099]

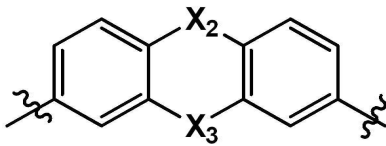
[0100] 화학식 3-1에서, X_2 는 SO_2 또는 O이고, X_3 는 직접결합 또는 CY_3Y_4 이며, Y_3 및 Y_4 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

[0101] X_3 가 직접결합인 경우, X_2 를 포함하는 고리는 5원환이다.

[0102] 화학식 3-1 내지 3-3은 각각 추가로 더 치환될 수 있으며, 치환기는 중수소, 알킬기 및 아릴기 중 선택되는 적어도 하나일 수 있다.

[0103] 화학식 3-1은 예를 들어, 하기 화학식 4-1로 표시될 수 있다.

[0104] [화학식 4-1]



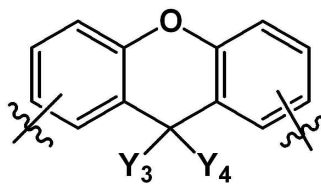
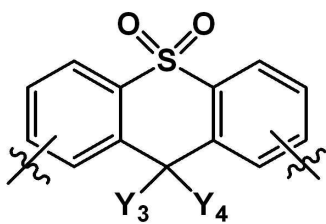
[0105]

[0106] 화학식 4-1에서, X_2 및 X_3 는 화학식 3-1에서 정의한 바와 동일하다.

[0107] 화학식 3-1은 하기 화학식 3-1-1 내지 3-1-3 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

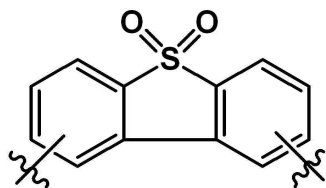
[0108] [화학식 3-1-1]

[화학식 3-1-2]



[0109]

[0110] [화학식 3-1-3]



[0111]

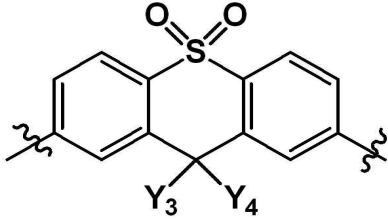
[0112] 화학식 3-1-1 및 3-1-2에서, Y_3 및 Y_4 는 화학식 3-1에서 정의한 바와 동일하다.

[0113] Y_3 및 Y_4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다.

[0114] Y₃ 및 Y₄는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 이에 한정되는 것은 아니나, Y₃ 및 Y₄는 각각 치환 또는 비치환된 메틸기일 수 있다.

[0115] 화학식 3-1-1은 보다 구체적으로 하기 화학식 3-1-4로 표시될 수 있다.

[0116] [화학식 3-1-4]

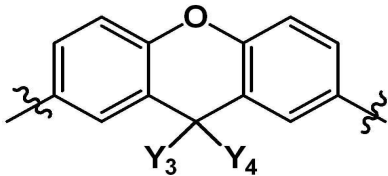


[0117]

[0118] 화학식 3-1-4에서, Y₃ 및 Y₄는 화학식 3-1에서 정의한 바와 동일하다.

[0119] 화학식 3-1-2는 예를 들어, 하기 화학식 3-1-5로 표시될 수 있다.

[0120] [화학식 3-1-5]

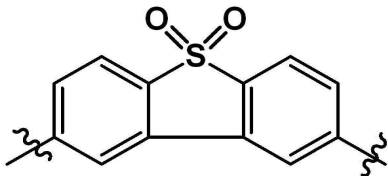


[0121]

[0122] 화학식 3-1-5에서, Y₃ 및 Y₄는 화학식 3-1에서 정의한 바와 동일하다.

[0123] 화학식 3-1-3은 예를 들어, 하기 화학식 3-1-6으로 표시될 수 있다.

[0124] [화학식 3-1-6]

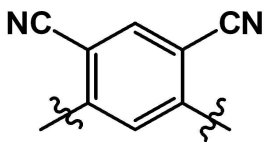


[0125]

[0126] 화학식 3-1-6에서, Y₃ 및 Y₄는 화학식 3-1에서 정의한 바와 동일하다.

[0127] 화학식 3-2는 하기 화학식 4-2로 표시되는 것이 바람직하다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

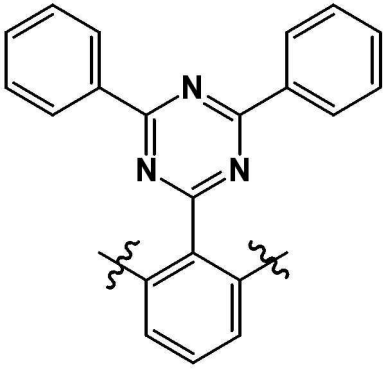
[0128] [화학식 4-2]



[0129]

[0130] 화학식 3-3은 하기 화학식 4-3으로 표시되는 것이 바람직하다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0131] [화학식 4-3]



[0132]

[0133] 일 실시예에서, D_1 및 D_2 중 적어도 하나는 화학식 2의 X_1 이 CY_1Y_2 이고, A는 화학식 3-3으로 표시되는 것일 수 있다. Y_1 및 Y_2 는 화학식 2에서 정의한 바와 동일하며, 예를 들어, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있다. 예를 들어, Y_1 및 Y_2 는 각각 치환 또는 비치환된 메틸기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

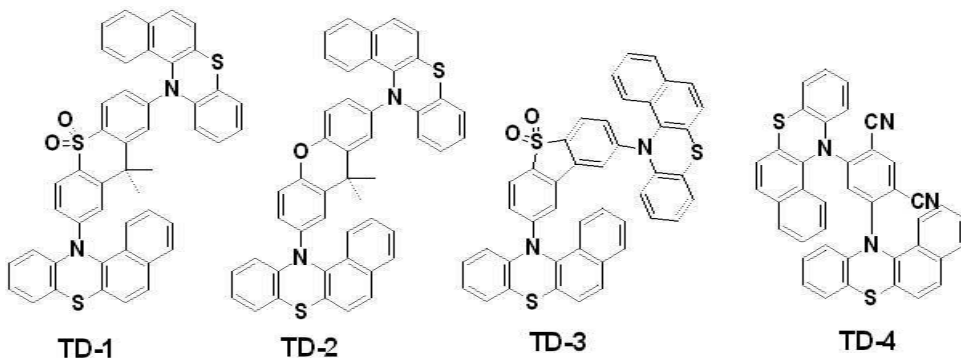
[0134] 화학식 2에서, X_1 은 CY_1Y_2 이고, Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다. 예를 들어, Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있으나, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0135] 화학식 2에서, X는 O 또는 S일 수 있다.

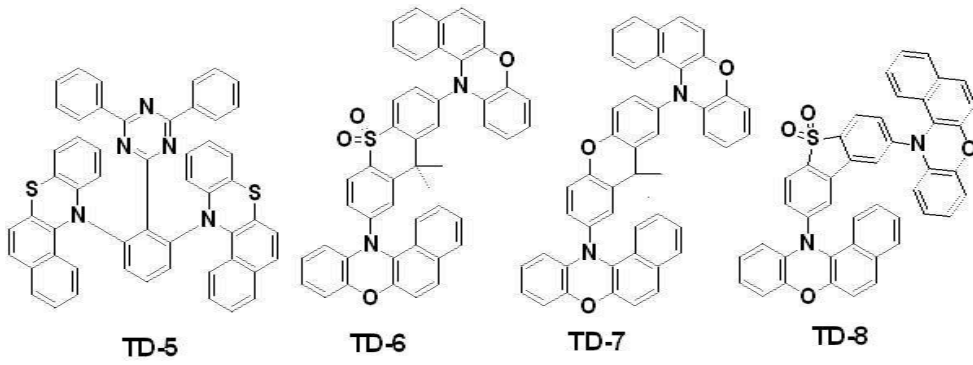
[0136] 화학식 2에서, R_1 내지 R_{10} 이 각각 수소 원자인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 유기 전계 발광 소자에 적절하게 적용되기 위해, 치환기가 도입될 수 있다. 예를 들어, R_1 내지 R_{10} 중 적어도 하나가 수소 원자 외의 치환기일 수 있으며, 중수소, 메틸기, 부틸기 또는 페닐기일 수 있다. R_1 내지 R_{10} 중 적어도 하나는 메틸기 또는 t-부틸기일 수 있으나, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0137] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다. 하기 화합물 구조에서 Ph는 페닐기를 의미한다.

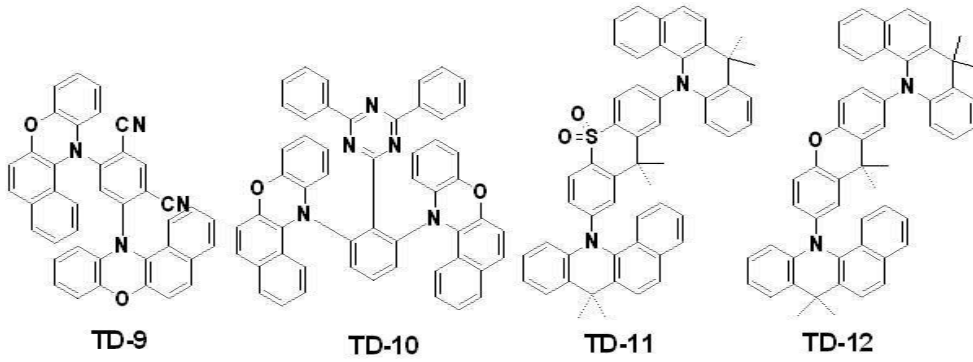
[0138] [화합물군 1]



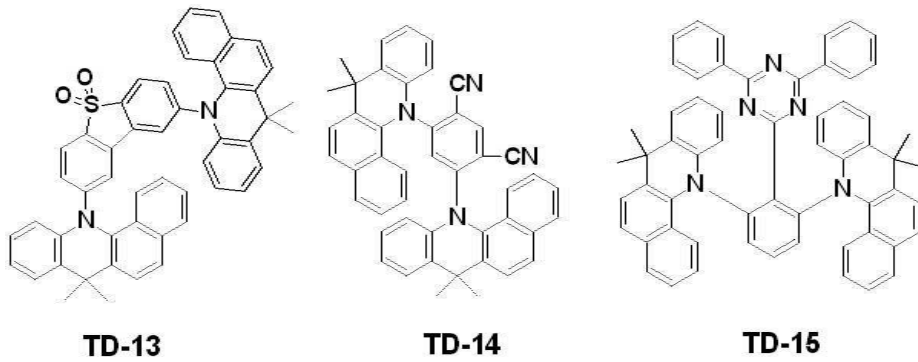
[0139]



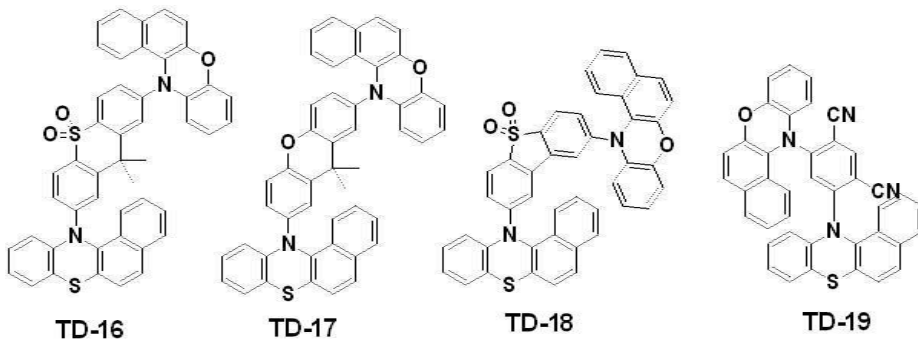
[0140]



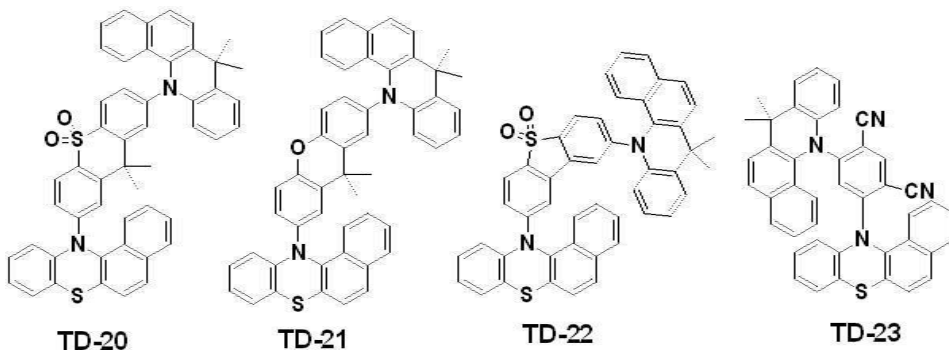
[0141]



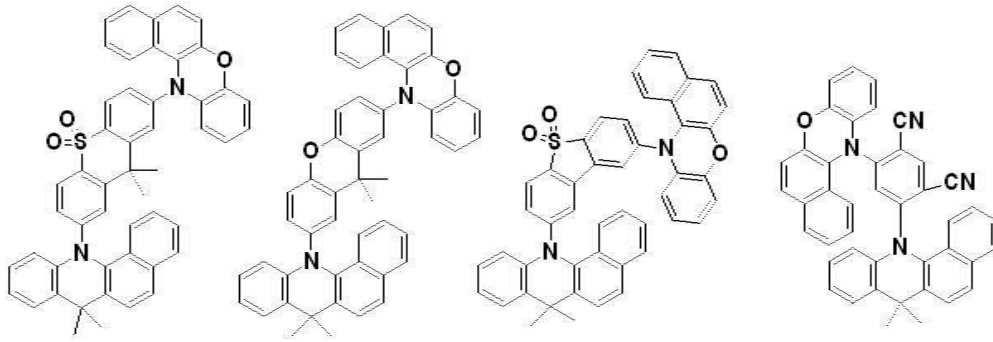
[0142]



[0143]



[0144]



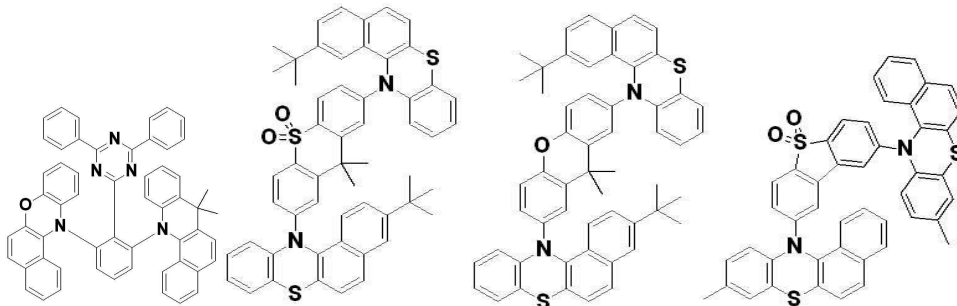
TD-24

TD-25

TD-26

TD-27

[0145]



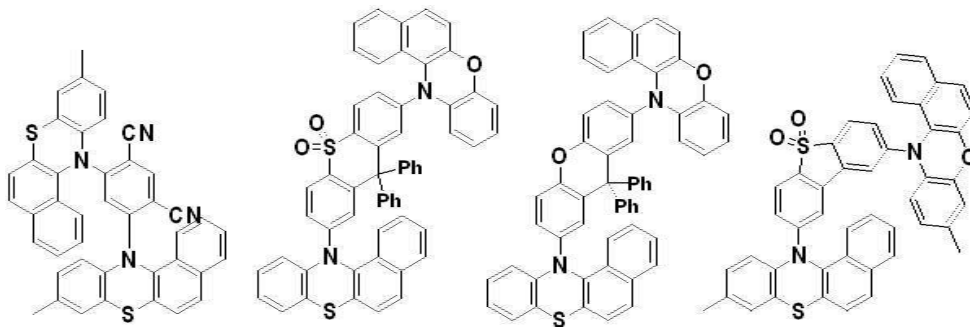
TD-28

TD-29

TD-30

TD-31

[0146]



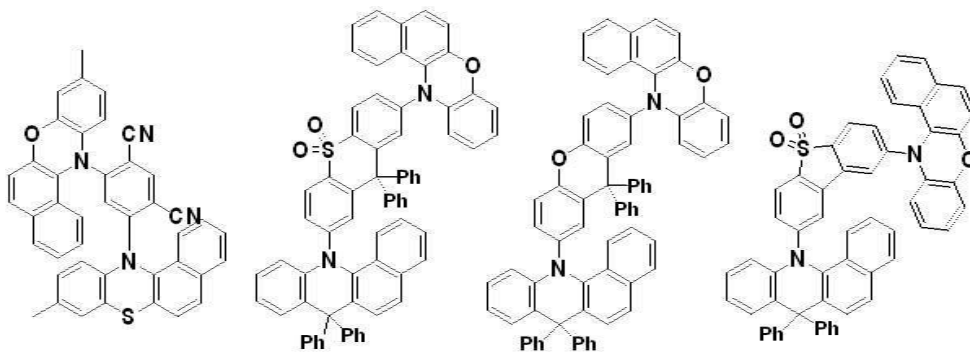
TD-32

TD-33

TD-34

TD-35

[0147]



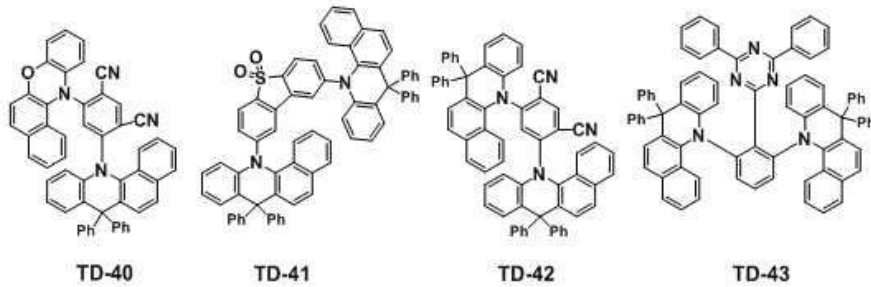
TD-36

TD-37

TD-38

TD-39

[0148]



[0149]

[0150]

[0151]

[0152]

[0153]

[0154]

[0155]

[0156]

[0157]

본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 최저 여기 일중항 에너지 준위(S1) 및 최저 여기 삼중항 에너지 준위(T1) 차이의 절대 값이 0.2eV 이하인 것일 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 작은 일중항-삼중항 에너지 갭을 가지는 바, 효율적인 열 활성화 지연 형광용 재료로 사용될 수 있다.

다시, 도 1 및 도 2를 참조하여, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)에 포함되는 발광층(EML)에 대해 보다 구체적으로 설명한다.

전술한 바와 같이, 발광층(EML)은 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함한다. 구체적으로, 발광층(EML)은 전술한 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함한다.

발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 도펀트는 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함할 수 있다. 도펀트는 열 활성화 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence) 도펀트일 수 있으며, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 열 활성화 지연 형광용 도펀트일 수 있다.

호스트는 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 제한없이 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)dibenzofuran), 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(Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO₃ (Hexaphenylcyclotrisiloxane), DPSiO₄ (Octaphenylcyclotetra siloxane), PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 호스트 재료로 사용할 수 있다.

발광층(EML)은 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물 이외에 공지의 열 활성화 지연 형광용 도펀트를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)은 도펀트로 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-BDAVBi), 페릴렌 및 그 유도체(예를 들어, 2, 5, 8, 11-Tetra-t-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체(예를 들어, 1, 1-dipyrene, 1, 4-dipyrenylbenzene, 1, 4-Bis(N, N-Diphenylamino)pyrene) 등의 2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene(TBP)) 등을 더 포함할 수 있다.

발광층(EML)은 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다. 발광층(EML)은 열 활성화 지연 형광을 방사하는 발광층일 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)은 열 활성화 지연 형광을 통해 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다.

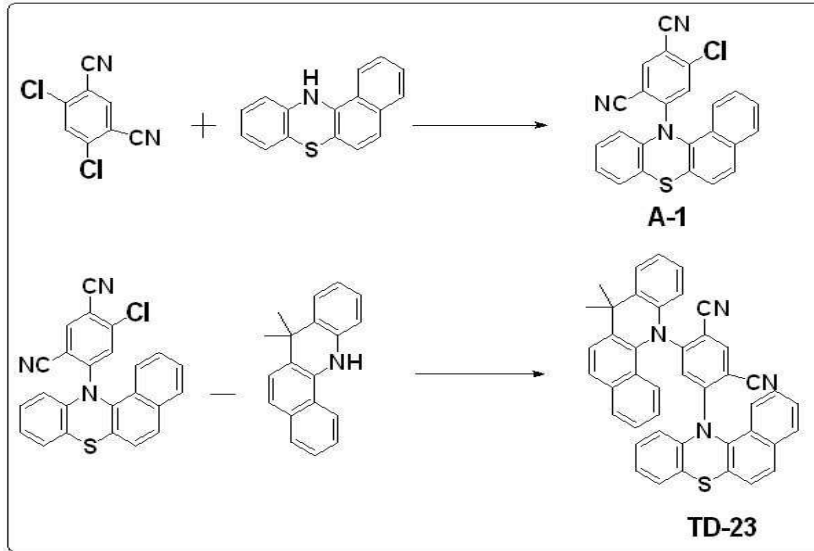
본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자용 헤테로환 화합물은 발광층 재료로 사용될 수 있으며, 유기

전계 발광 소자의 고효율화 및/또는 저 구동전압화에 기여할 수 있다.

- [0158] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하며, 효율이 향상될 수 있으며, 구동 전압이 낮아지는 효과도 있다.
- [0159] 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.
- [0160] (합성예)
- [0161] 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.
- [0162] 1. 합성예 1: TD-1 합성
- [0163] 2,7-dichloro-9,9-dimethyl-9H-thioxanthene 10,10-dioxide (1eq) 와 12H-benzo[a]phenothiazine (2.2eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-1 (수율 77.64%)을 얻었다.
- [0164] HRMS for C₄₇H₃₂N₂O₂S₃ [M]⁺ : calcd:752, found: 751
- [0165] Elemental Analysis for calcd : C, 74.97; H, 4.28; N, 3.72; O, 4.25; S, 12.77
- [0167] 2. 합성예 2: TD-4 합성
- [0168] 4,6-dichloroisophthalonitrile (1eq)과 12H-benzo[a]phenothiazine (2.2eq) 을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-4 (수율 55.7%)을 얻었다.
- [0169] HRMS for C₄₀H₂₂N₄S₂ [M]⁺ : calcd : 622, found: 621
- [0170] Elemental Analysis for calcd : C, 77.15; H, 3.56; N, 9.00; S, 10.30
- [0172] 3. 합성예 3: TD-5 합성
- [0173] 2-(2,6-dibromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (1eq) 와 12H-benzo[a]phenothiazine (2.2eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-5 (수율 71.4%)을 얻었다.
- [0174] HRMS for C₅₃H₃₃N₅S₂ [M]⁺ : calcd : 804, found : 803
- [0175] Elemental Analysis for calcd : C, 79.18; H, 4.14; N, 8.71; S, 7.98
- [0177] 4. 합성예 4: TD-6 합성
- [0178] 2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-thioxanthene 10,10-dioxide 와 (1eq) 12H-benzo[a]phenoxazine (2.2eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-6 (수율 68.7%)을 얻었다.

- [0179] HRMS for $C_{47}H_{32}N_2O_4S$ $[M]^+$: calcd : 720, found : 719
- [0180] Elemental Analysis for calcd : C, 78.31; H, 4.47; N, 3.89; O, 8.88; S, 4.45
- [0182] 5. 합성예 5: TD-9 합성
- [0183] 4,6-dichloroisophthalonitrile (1eq) 와 12H-benzo[a]phenoxazine (2.2eq) 을 넣은 플라스크에 $Pd(dba)_3$ (0.03eq), $(t-Bu)_3P$ (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. $MgSO_4$ 로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-9 (수율 65.1%)을 얻었다.
- [0184] HRMS for $C_{40}H_{22}N_4O_2$ $[M]^+$: calcd : 590, found : 589
- [0185] Elemental Analysis for calcd : C, 81.34; H, 3.75; N, 9.49; O, 5.42
- [0187] 6. 합성예 6: TD-10 합성
- [0188] 2-(2,6-dichlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (1eq) 12H-benzo[a]phenoxazine (2.2eq)을 넣은 플라스크에 $Pd(dba)_3$ (0.03eq), $(t-Bu)_3P$ (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. $MgSO_4$ 로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-10 (수율 73.1%)을 얻었다.
- [0189] HRMS for $C_{53}H_{33}N_5O_2$ $[M]^+$: calcd : 771, found : 770
- [0190] Elemental Analysis for calcd : C, 82.47; H, 4.31; N, 9.07; O, 4.15
- [0192] 7. 합성예 7: TD-14 합성
- [0193] 4,6-dichloroisophthalonitrile (1eq) 와 7,7-dimethyl-7,12-dihydrobenzo[c]acridine (2.2eq)을 넣은 플라스크에 $Pd(dba)_3$ (0.03eq), $(t-Bu)_3P$ (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. $MgSO_4$ 로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-14 (수율 77.4%)을 얻었다.
- [0194] HRMS for $C_{46}H_{34}N_4$ $[M]^+$: calcd : 642, found : 641
- [0195] Elemental Analysis for calcd : C, 85.95; H, 5.33; N, 8.72
- [0197] 8. 합성예 8: TD-15 합성
- [0198] 4,6-dichloroisophthalonitrile 와(1eq) 7,7-dimethyl-7,12-dihydrobenzo[c]acridine (2.2eq)을 넣은 플라스크에 $Pd(dba)_3$ (0.03eq), $(t-Bu)_3P$ (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. $MgSO_4$ 로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-15 (수율 73.1%)을 얻었다.
- [0199] HRMS for $C_{59}H_{45}N_5$ $[M]^+$: calcd : 824, found : 823
- [0200] Elemental Analysis for calcd : C, 86.00; H, 5.50; N, 8.50

[0202] 8. 합성예 8: TD-23 합성



[0203]

[0204] (A-1 합성)

[0205] 4,6-dichloroisophthalonitrile 와(1eq) 12H-benzo[a]phenothiazine (0.9eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 3시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 A-1 (수율 56.4%)을 얻었다.

[0206] HRMS for C₂₄H₁₂ClN₃S [M]⁺ : calcd : 409, found : 408

[0207] Elemental Analysis for calcd : C, 70.33; H, 2.95; Cl, 8.65; N, 10.25; S, 7.82

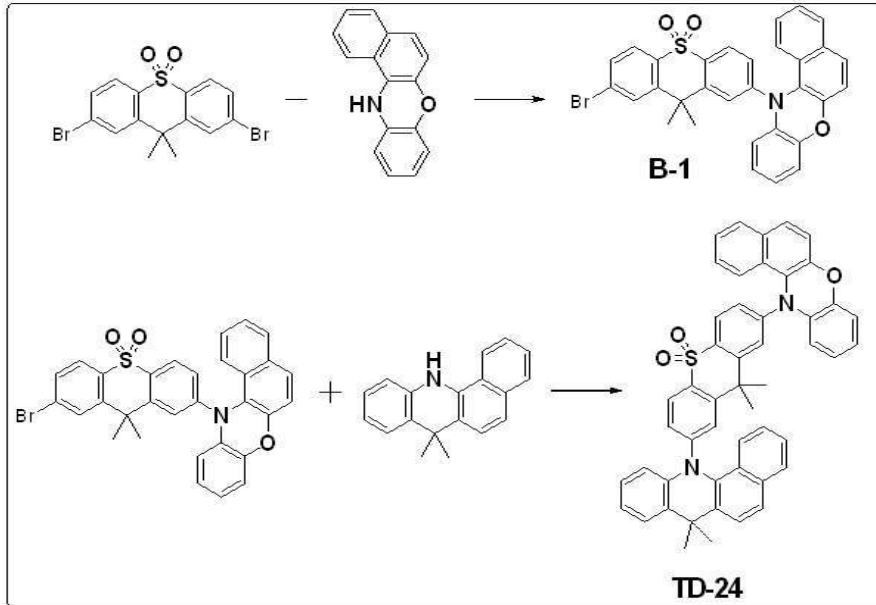
[0209] (TD-23 합성)

[0210] A-1과(1eq) 7,7-dimethyl-7,12-dihydrobenzo[c]acridine (1.2eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 6시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-23 (수율 77.8%) 을 얻었다.

[0211] HRMS for C₄₃H₂₈N₄S [M]⁺ : calcd : 632, found : 631

[0212] Elemental Analysis for calcd : C, 81.62; H, 4.46; N, 8.85; S, 5.07

[0214] 9. 합성에 9: TD-24 합성



[0215]

[0216] (B-1 합성)

[0217] 2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-thioxanthene 10,10-dioxide(1eq)와 12H-benzo[a]phenoxazine (0.9eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 4시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 B-1 (수율 51.4%)을 얻었다.

[0218] HRMS for C₃₁H₂₂BrNO₃S [M]⁺ : calcd : 568, found : 567

[0219] Elemental Analysis for calcd : C, 65.50; H, 3.90; Br, 14.06; N, 2.46; O, 8.44; S, 5.64

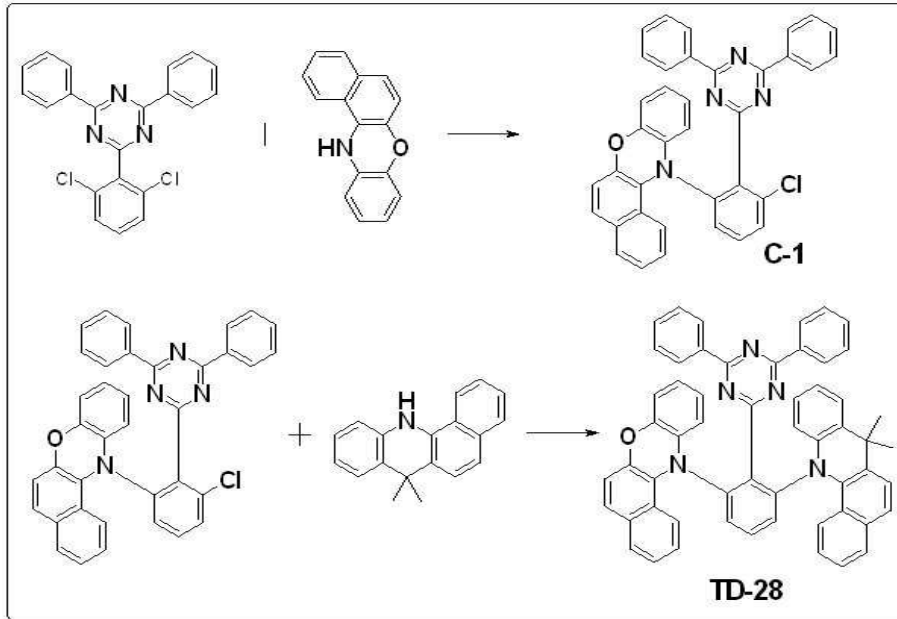
[0221] (TD-24 합성)

[0222] B-1(1eq)과 7,7-dimethyl-7,12-dihydrobenzo[c]acridine (1.2eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 6시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-24 (수율 81.8%)을 얻었다.

[0223] HRMS for C₅₀H₃₈N₂O₃S [M]⁺ : calcd : 746, found : 745

[0224] Elemental Analysis for calcd : C, 80.40; H, 5.13; N, 3.75; O, 6.43; S, 4.29

[0226] 10. 합성에 10: TD-28 합성



[0227]

[0229] (C-1 합성)

[0230] 2-(2,6-dichlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 와(1eq) 12H-benzo[a]phenoxazine (0.9eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 4시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 C-1 (수율 55.4%)을 얻었다.

[0231] HRMS for C₃₇H₂₃ClN₄O [M]⁺ : calcd : 575, found : 574

[0232] Elemental Analysis for calcd : C, 77.28; H, 4.03; Cl, 6.16; N, 9.74; O, 2.78

[0234] (TD-28 합성)

[0235] C-1 와(1eq) 7,7-dimethyl-7,12-dihydrobenzo[c]acridine (1.2eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃ (0.03eq), (t-Bu)₃P (0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 6시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 씻어주었다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 TD-28 (수율 81.8%)을 얻었다.

[0236] HRMS for C₅₆H₃₉N₅O [M]⁺ : calcd : 797, found : 796

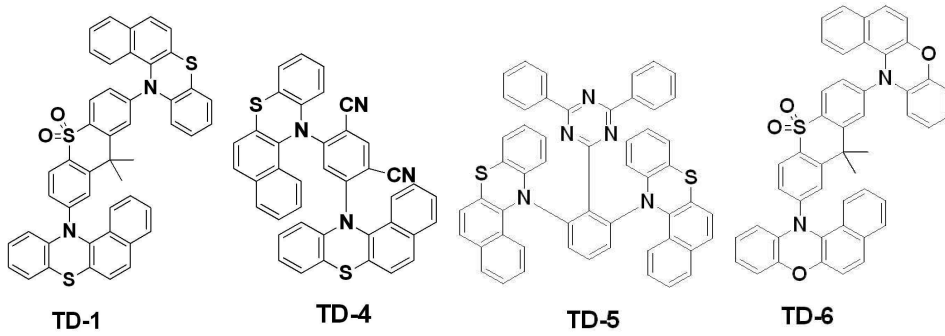
[0237] Elemental Analysis for calcd : C, 84.29; H, 4.93; N, 8.78; O, 2.00

[0239] 진술한 합성에는 일 예시이며, 반응 조건은 필요에 따라 변경될 수 있다. 또한, 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 당 기술분야에 알려져 있는 방법 및 재료를 이용하여 다양한 치환기를 가지도록 합성될 수 있다. 코어 구조에 다양한 치환체를 도입함으로써 유기 전계 발광 소자에 사용되기에 적합한 특성을 가질 수 있다.

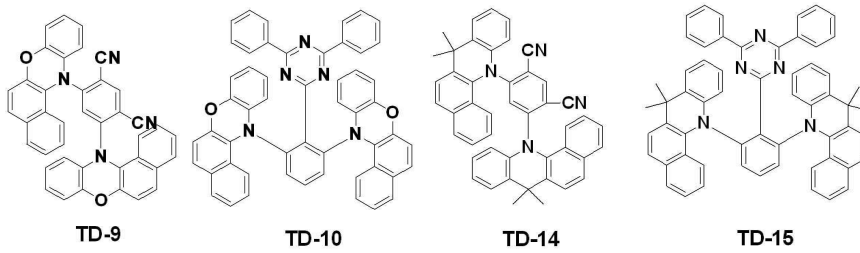
[0241] (소자 작성예)

[0242] 상술한 화합물 TD-1, TD-4, TD-5, TD-6, TD-9, TD-10, TD-14, TD-15, TD-23, TD-24, 및 TD-28를 발광층 도펀트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 11의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

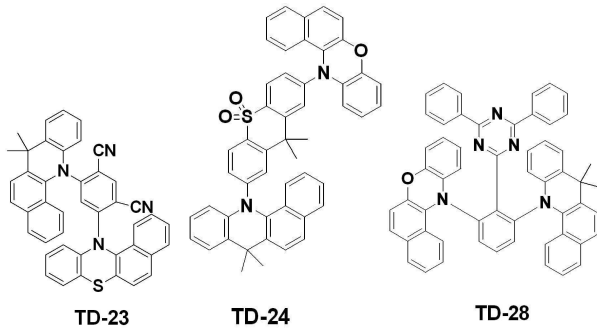
[0243] [실시에 화합물]



[0244]



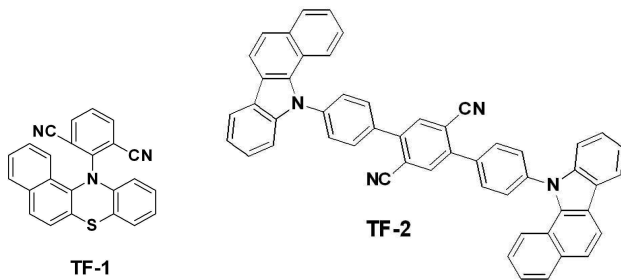
[0245]



[0246]

[0248] 하기 비교예 화합물 TF-1 및 TF-2를 발광층 도펀트 재료로 사용하여 비교예 1 및 2의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

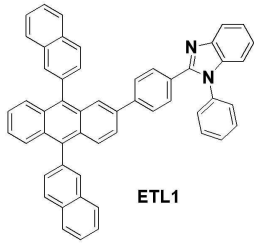
[0249] [비교예 화합물]



[0250]

[0251] 실시예 1 내지 11 및 비교예 1, 2의 유기 전계 발광 소자는 하기와 같이 제작하였다.

[0252] ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 10분 동안 초음파 세정한 후, 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착 장치에 상기 ITO 유리 기판을 설치하였다. ITO 유리 기판 상부에 NPB를 진공 증착하여 40Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 정공 주입층 상부에 mCP를 진공 증착하여 10Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 정공 수송층 상부에 실시예 화합물 또는 비교예 화합물과 호스트인 DPEPO를 15:85의 중량비로 공증착하여 200Å 두께의 발광층을 형성하였다. 발광층 상부에 하기 ETL1 물질을 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 후, Al을 증착하여 1200Å 두께의 제2 전극을 형성하였다.



[0253]

[0254]

실시예 1 내지 11 및 비교예 1, 2에 따른 유기 전계 발광 소자의 구동 전압, 발광 효율 및 외부양자효율(EQE)를 측정하여 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0255]

| | 발광층 도펀트 재료 | 구동 전압 (V) | 발광 효율 (cd/A) | EQE (%) |
|--------|------------|-----------|--------------|---------|
| 실시예 1 | TD-1 | 5.25 | 10.22 | 6.9 |
| 실시예 2 | TD-4 | 5.44 | 10.1 | 6.78 |
| 실시예 3 | TD-5 | 5.62 | 10.7 | 6.98 |
| 실시예 4 | TD-6 | 5.7 | 11.76 | 6.88 |
| 실시예 5 | TD-9 | 5.68 | 12.54 | 7.0 |
| 실시예 6 | TD-10 | 5.1 | 10.88 | 7.0 |
| 실시예 7 | TD-14 | 5.2 | 11.1 | 7.1 |
| 실시예 8 | TD-15 | 4.9 | 13.6 | 7.8 |
| 실시예 9 | TD-23 | 5.34 | 12.5 | 7.2 |
| 실시예 10 | TD-24 | 5.0 | 11.7 | 6.9 |
| 실시예 11 | TD-28 | 4.8 | 12.7 | 7.5 |
| 비교예 1 | TF-1 | 5.56 | 8.7 | 5.9 |
| 비교예 2 | TF-2 | 5.78 | 9.1 | 6.4 |

[0256]

상기 표 1의 결과를 참조하면, 실시예 1 내지 11은 공지의 열 활성 지연 형광 물질을 이용한 비교예 1 및 2 대비 효율이 우수함을 알 수 있다. 비교예 1은 1개의 전자 공여성기만을 포함하는 구조를 가짐에 따라 2개의 전자 공여성기를 포함하는 실시예 1 내지 11에 비해 효율이 낮아졌다. 비교예 2는 2개의 전자 공여성기를 포함하나, 전자 공여성기가 각각 5환 고리를 포함하며, 전자 공여성기가 6각 고리를 포함하는 실시예 1 내지 11에 비해 효율이 낮아졌다. 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 발광층 재료로 이용한 유기 전계 발광 소자는 효율이 우수하며, 저 구동전압화 효과가 있다.

[0257]

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.

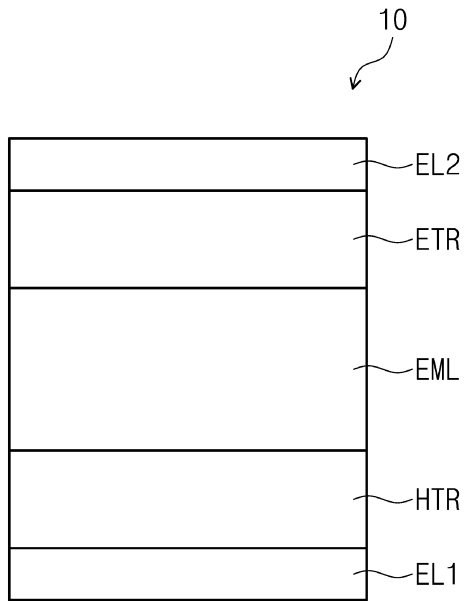
부호의 설명

[0258]

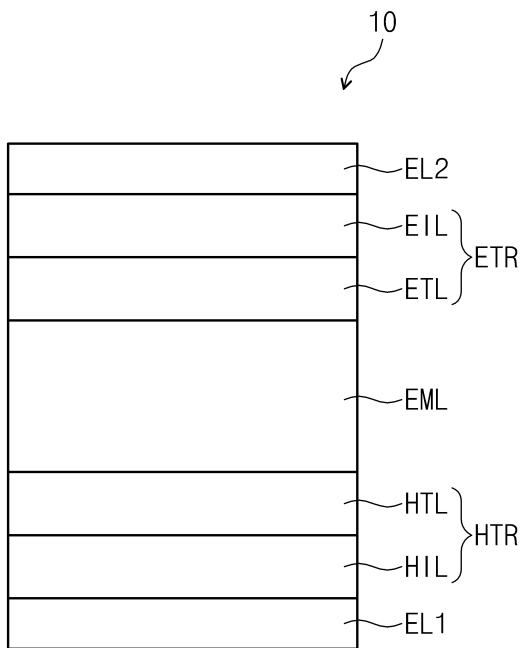
- 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극
- HTR: 정공 수송 영역 HIL: 정공 주입층
- HTL: 정공 수송층 EML: 발광층
- ETR: 전자 수송 영역 ETL: 전자 수송층
- EIL: 전자 주입층 EL2: 제2 전극

도면

도면1



도면2



| | | | |
|----------------|--|---------|------------|
| 专利名称(译) | 用于有机电致发光器件和有机电致发光器件的杂环化合物 | | |
| 公开(公告)号 | KR1020190098292A | 公开(公告)日 | 2019-08-22 |
| 申请号 | KR1020180017147 | 申请日 | 2018-02-12 |
| [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 | | |
| [标]发明人 | 이정섭 정혜인 | | |
| 发明人 | 이정섭 정혜인 | | |
| IPC分类号 | C09K11/06 H01L51/00 | | |
| CPC分类号 | C09K11/06 H01L51/0069 H01L51/0073 H01L51/0074 C09K2211/1033 C09K2211/1037 C09K2211/1059 C09K2211/1066 C07D401/10 C07D401/14 C07D405/14 C07D409/14 C07D413/10 C07D413/14 C07D417/10 C07D417/14 C09K2211/1029 C09K2211/1092 H01L51/0052 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/0067 H01L51/5012 C09K2211/1018 H01L51/001 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092 | | |
| 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；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。发光层包括由化学式1，D₁-A-D₂表示的杂环化合物。在化学式1中，D₁和D₂分别且独立地由化学式2表示，并且A由化学式3-1至3-3中的任一个表示。根据本发明，包括化合物的有机电致发光器件具有优异的效率。

