

(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0117038

(43) 공개일자 2019년10월16일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 471/04 (2006.01)

C07D 471/10 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2013.01)

C07D 471/04 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0039925

(22) 출원일자 2018년04월05일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

아카시, 노부타카

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

스자키, 유지

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

(74) 대리인

특허법인 고려

전체 청구항 수 : 총 20 항

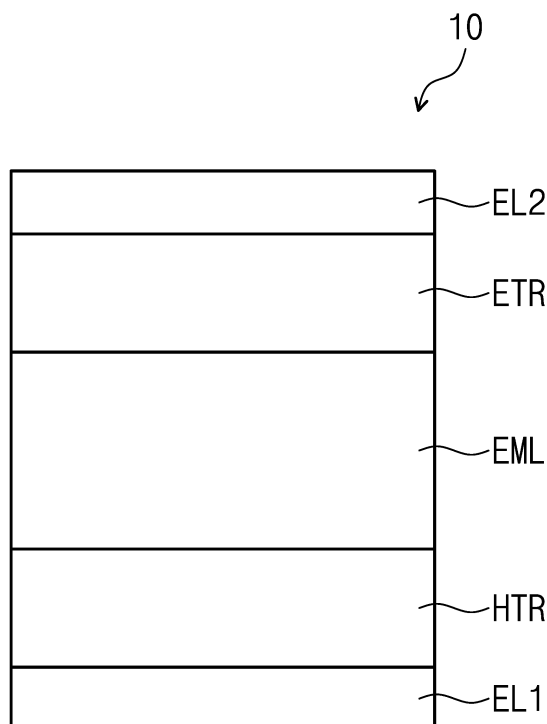
(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 다환 화합물

(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 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 하기 화학식 1에서, X_1 은 C, Si 또는 Ge이고,

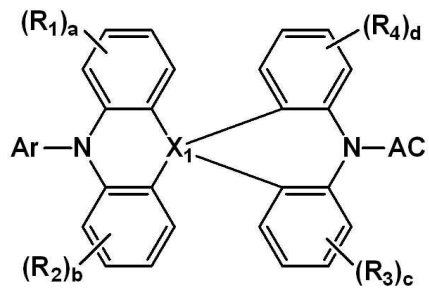
(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



AC는 전자 수용성기이다.

[화학식 1]



(52) CPC특허분류

C07D 471/10 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

C09K 2211/1044 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

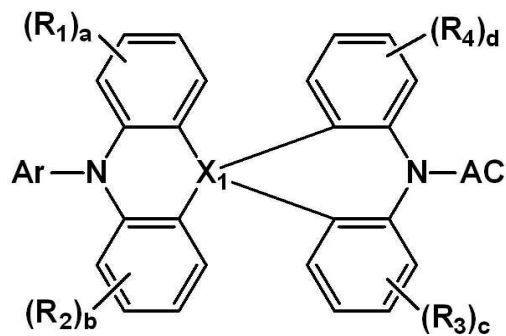
상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

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

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X₁은 C, Si 또는 Ge이고,

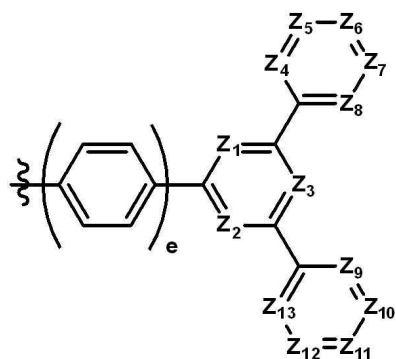
Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

R₁ 내지 R₄는 각각 독립적으로 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,

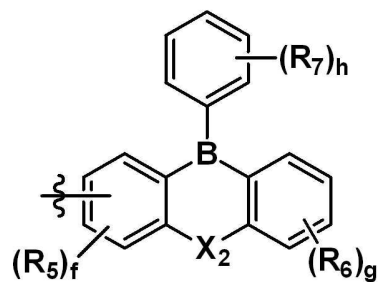
a 내지 d는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며,

AC는 하기 화학식 2 내지 10 중 어느 하나로 표시된다:

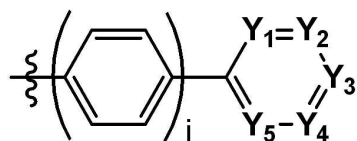
[화학식 2]



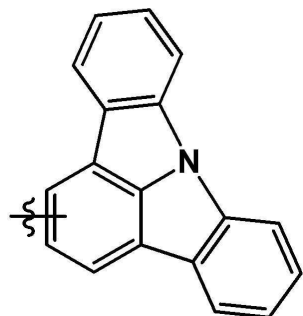
[화학식 3]



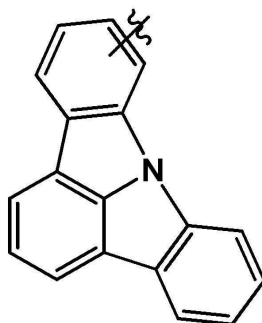
[화학식 4]



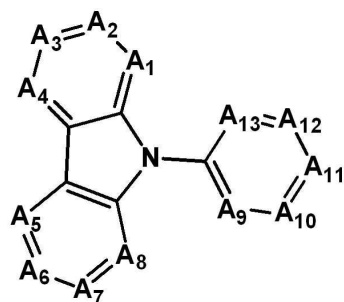
[화학식 5]



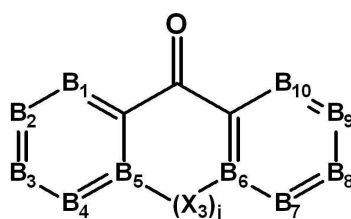
[화학식 6]



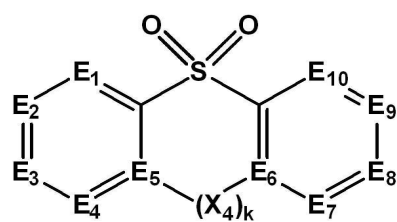
[화학식 7]



[화학식 8]



[화학식 9]



상기 화학식 2에서,

Z₁ 내지 Z₁₃은 각각 독립적으로 CH 또는 N이고, Z₁ 내지 Z₃ 중 2개 또는 3개는 N이며, Z₄ 내지 Z₁₃ 중 적어도 하나는 N이고,

e는 0 이상 2 이하의 정수이며,

상기 화학식 3에서,

X₂는 0, S 또는 CR₈R₉이고,

R₅ 내지 R₉는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 탄화수소 고리 또는 헤테로 고리를 형성하며,

f 는 0 이상 3 이하의 정수이고,

g 는 0 이상 4 이하의 정수이며,

h 는 0 이상 5 이하의 정수이고,

상기 화학식 4에서,

i 는 0 내지 2의 정수이고,

Y_1 은 N 또는 CR_{10} 이고, Y_2 는 N 또는 CR_{11} 이고, Y_3 는 N 또는 CR_{12} 이고, Y_4 는 N 또는 CR_{13} 이고, Y_5 는 N 또는 CR_{14} 이며, Y_1 내지 Y_5 중 적어도 하나는 N이고,

CR_{10} 내지 CR_{14} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 트리플루오로메틸기이며,

화학식 1의 X_1 이 C인 경우, R_{10} 내지 R_{14} 중 적어도 하나는 수소 원자가 아니고,

Y_2 및 Y_4 중 적어도 하나가 N인 경우, Y_3 는 CR_{12} 이고, R_{12} 는 시아노기가 아니며,

상기 화학식 7에서,

A_1 내지 A_{13} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{15} 이고,

A_1 내지 A_8 중 적어도 하나는 N이며, A_9 내지 A_{13} 중 적어도 하나는 N이고,

A_1 내지 A_{13} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며,

R_{15} 는 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,

상기 화학식 8에서,

B_1 내지 B_{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{16} 이고,

B_1 내지 B_{10} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며,

X_3 은 직접 결합(direct linkage), O, S, $CR_{17}R_{18}$, 또는 $SiR_{19}R_{20}$ 이고,

j 는 0 또는 1이며, j 가 1인 경우 B_5 및 B_6 은 C이며,

R_{16} 내지 R_{20} 은 각각 독립적으로 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,

상기 화학식 9에서,

E_1 내지 E_{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{21} 이고,

E_1 내지 E_{10} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며,

X_3 은 직접 결합(direct linkage), O, S, $CR_{22}R_{23}$, 또는 $SiR_{24}R_{25}$ 이고,

k 는 0 또는 1이며, k 가 1인 경우 E_5 및 E_6 은 C이며,

R_{22} 내지 R_{25} 는 각각 독립적으로 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 헤테로아릴기이다.

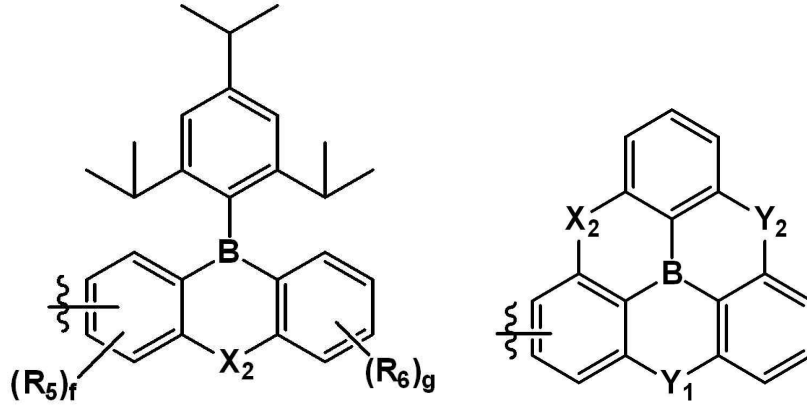
청구항 2

제1항에 있어서,

상기 화학식 3은 하기 화학식 3-1 또는 3-2로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 3-1]

[화학식 3-2]



상기 화학식 3-1 및 3-2에서,

X_2 , R_5 , R_6 , f 및 g 는 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고,

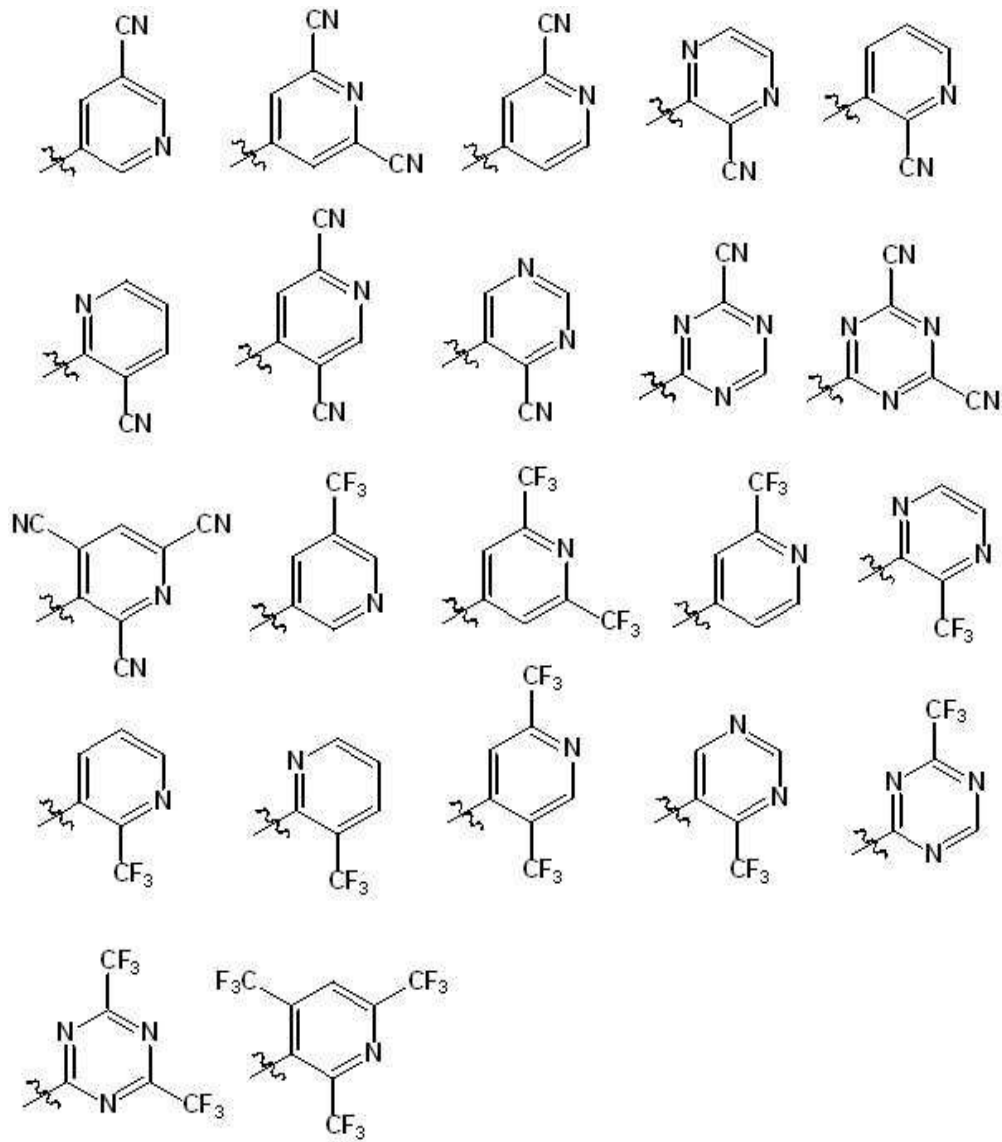
Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 O , S 또는 $CR_{26}R_{27}$ 이며,

R_{26} 및 R_{27} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이다.

청구항 3

제1항에 있어서,

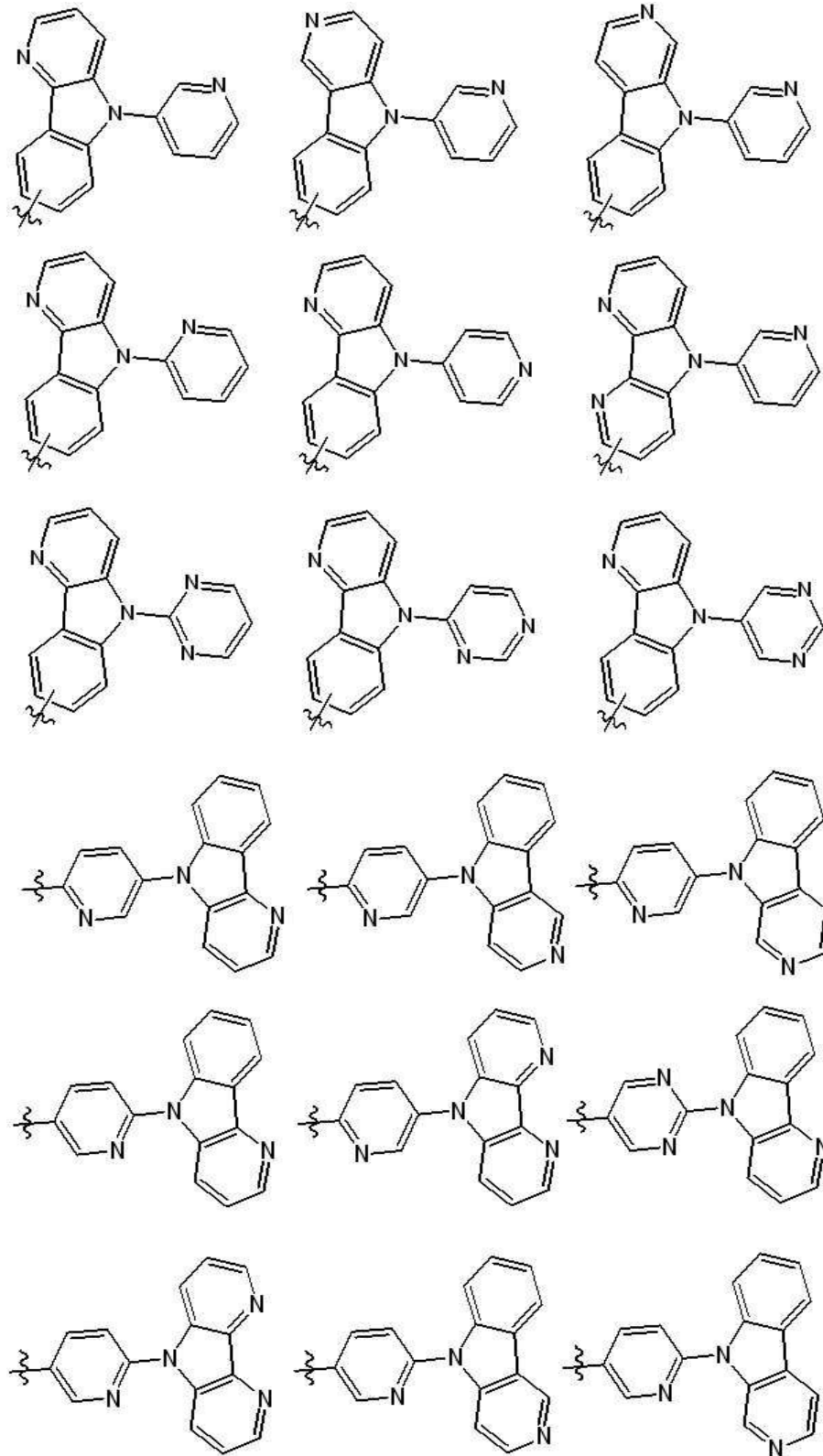
상기 화학식 4는 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:



청구항 4

제1항에 있어서,

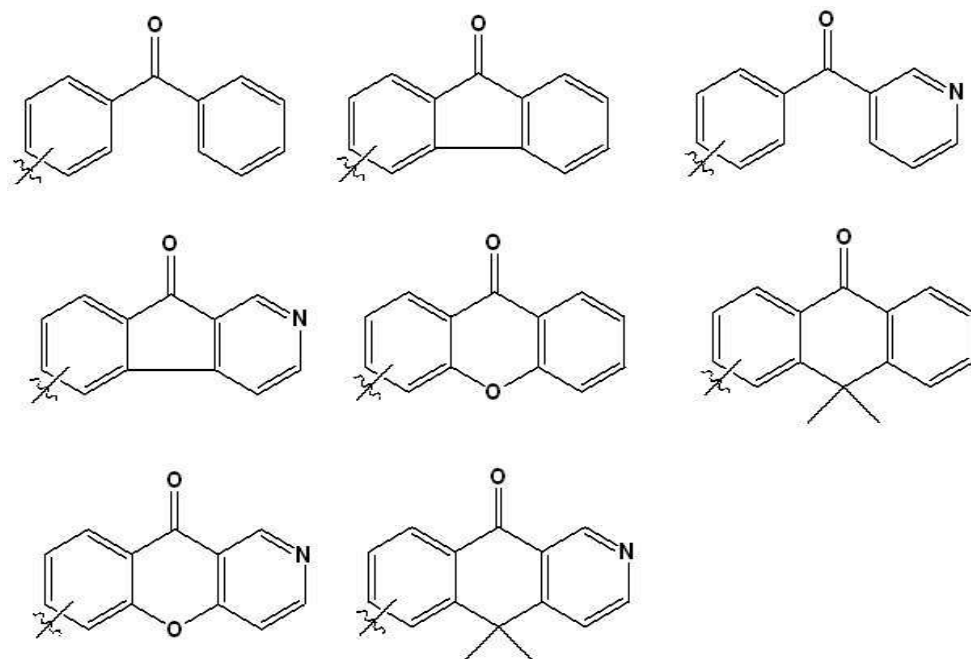
상기 화학식 7은 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:



청구항 5

제1항에 있어서,

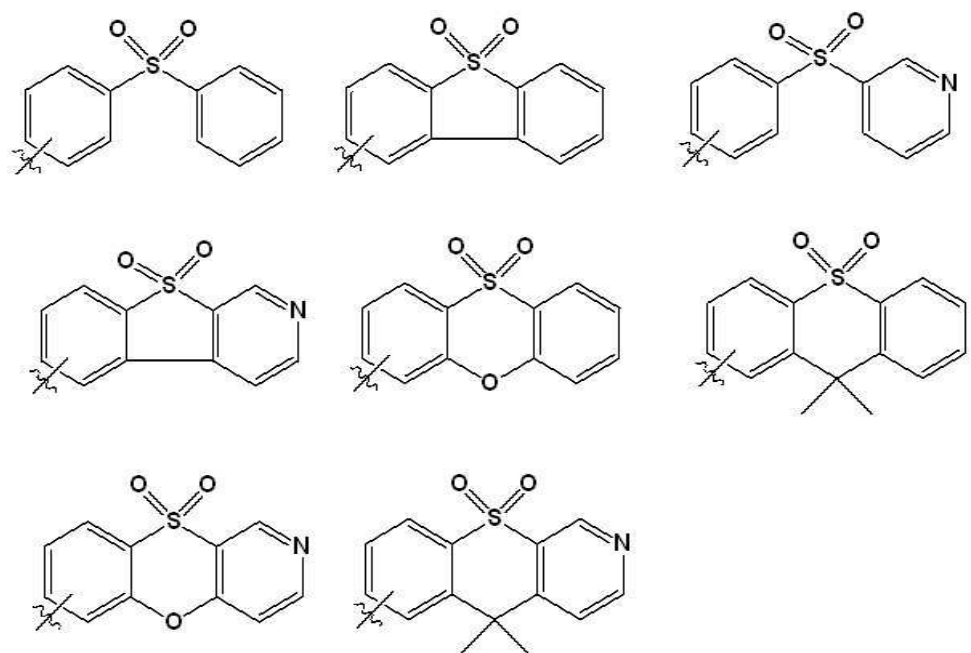
상기 화학식 8은 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:



청구항 6

제1항에 있어서,

상기 화학식 9는 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:



청구항 7

제1항에 있어서,

Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고,

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

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 다환 화합물은 열 활성 지연 형광용 도펀트인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제8항에 있어서,

상기 다환 화합물은 470nm 미만의 파장 영역을 갖는 청색 도펀트인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 정공 수송 영역은

상기 제1 전극 상에 배치된 정공 주입층;

상기 정공 주입층 상에 배치된 정공 수송층; 및

상기 정공 수송층 상에 배치된 전자 저지층을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 12

제1항에 있어서,

상기 전자 수송 영역은

상기 발광층 상에 배치된 정공 저지층;

상기 정공 저지층 상에 배치된 전자 수송층; 및

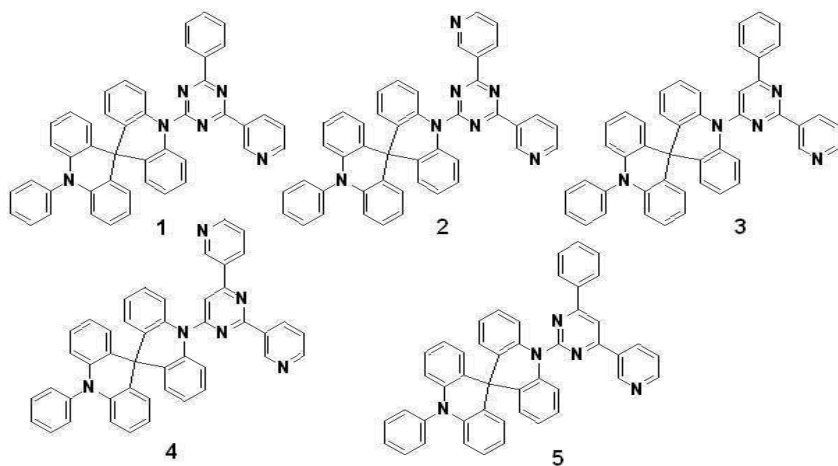
상기 전자 수송층 상에 배치된 전자 주입층을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

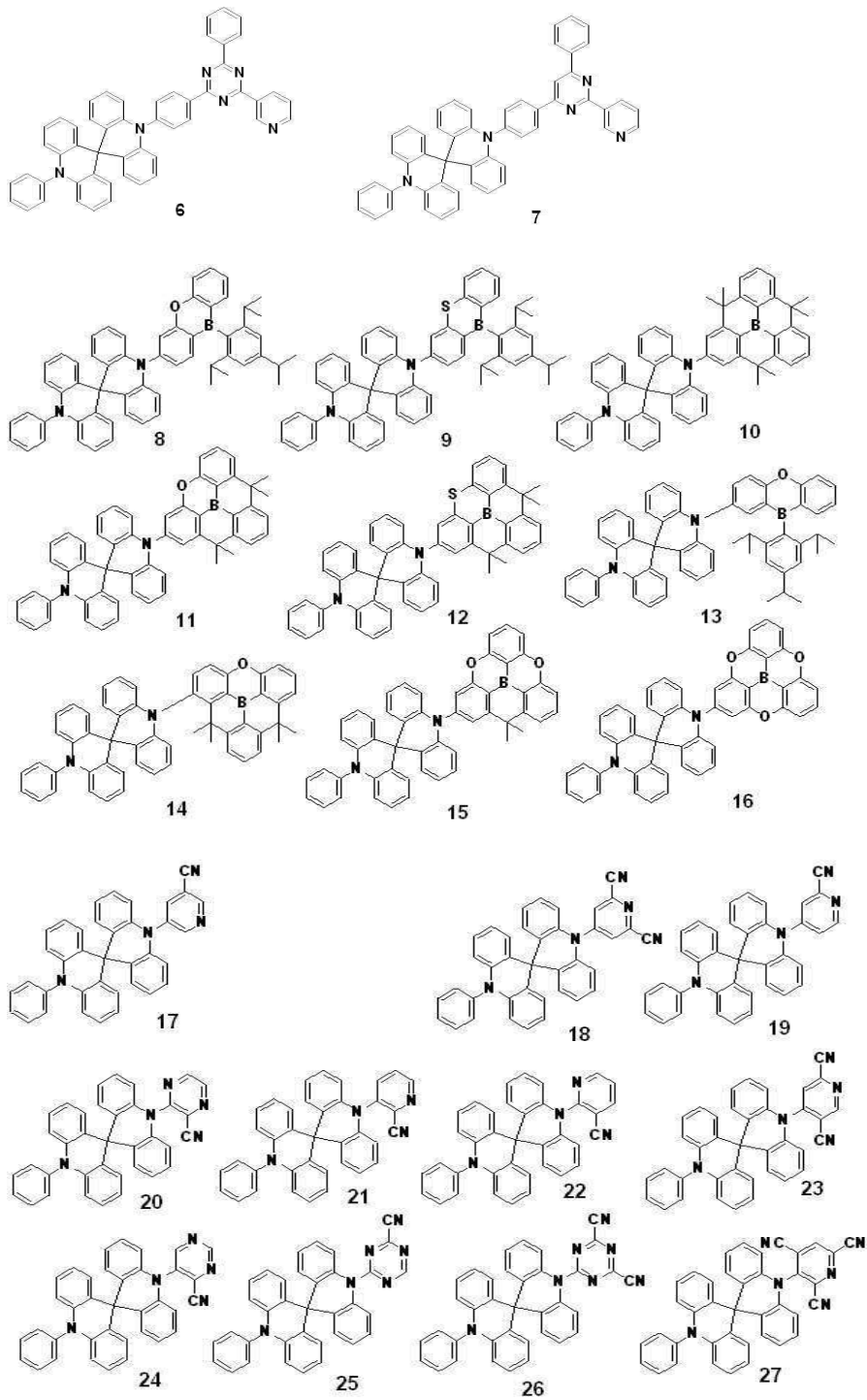
청구항 13

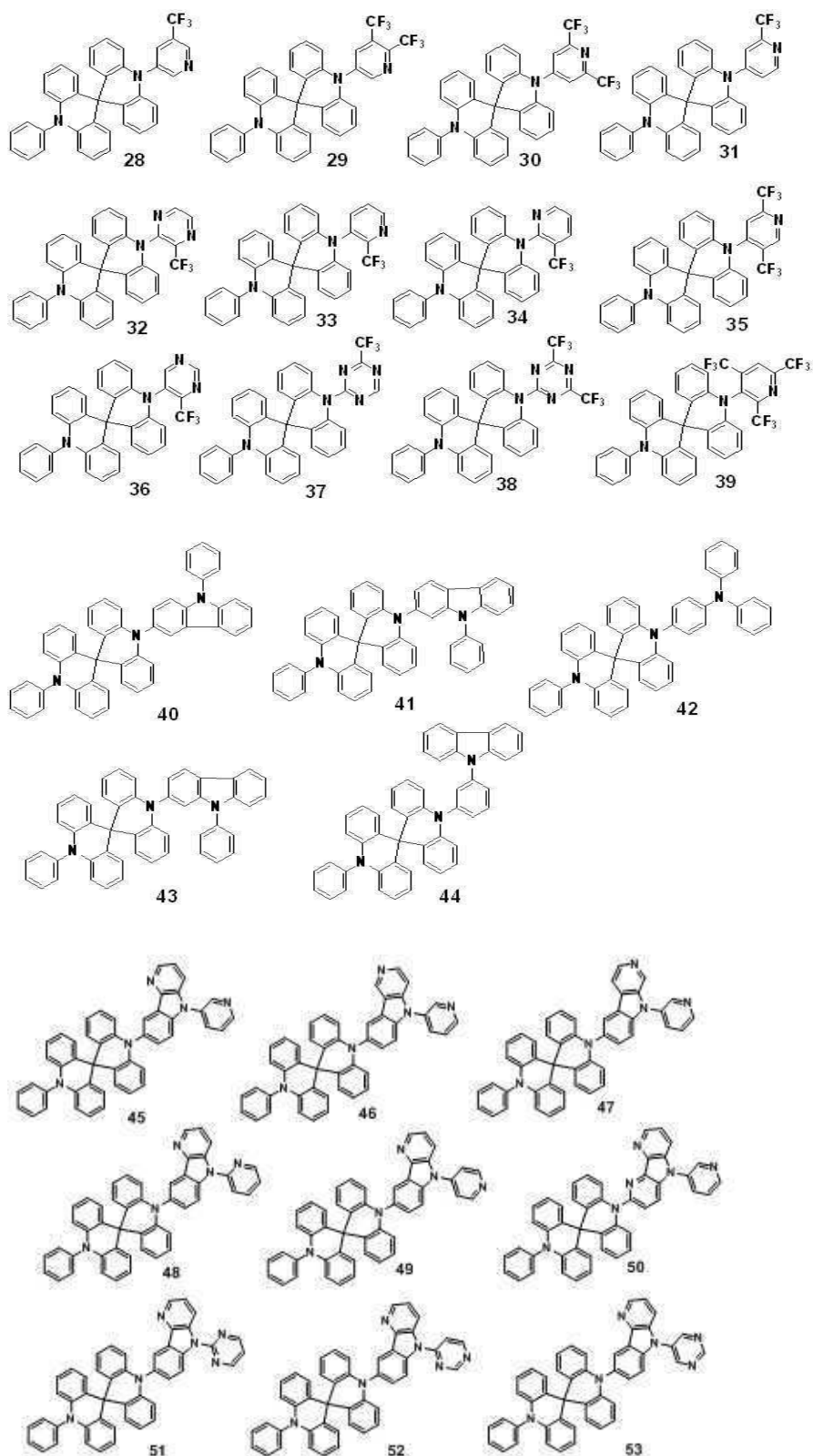
제1항에 있어서,

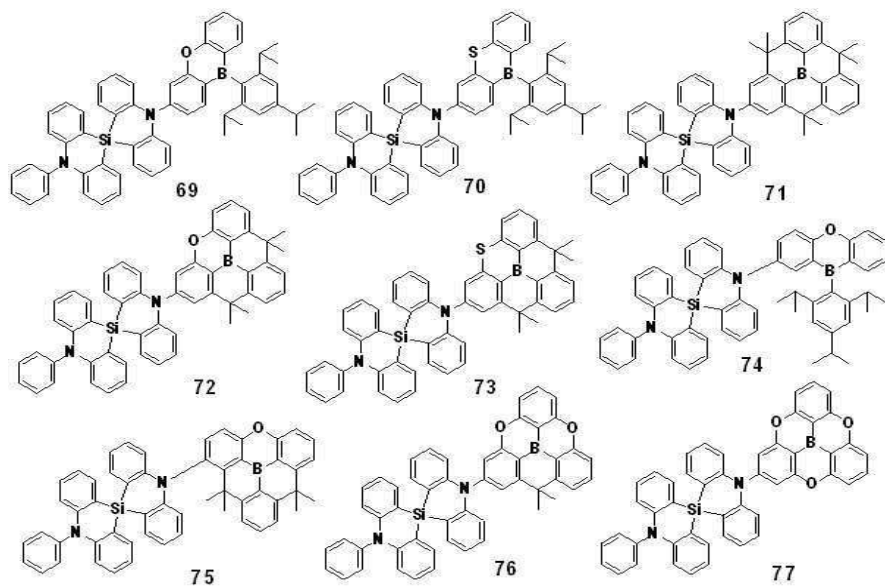
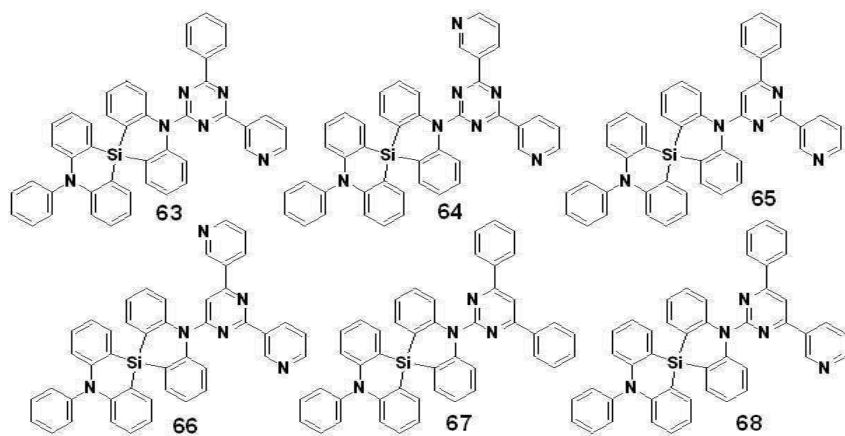
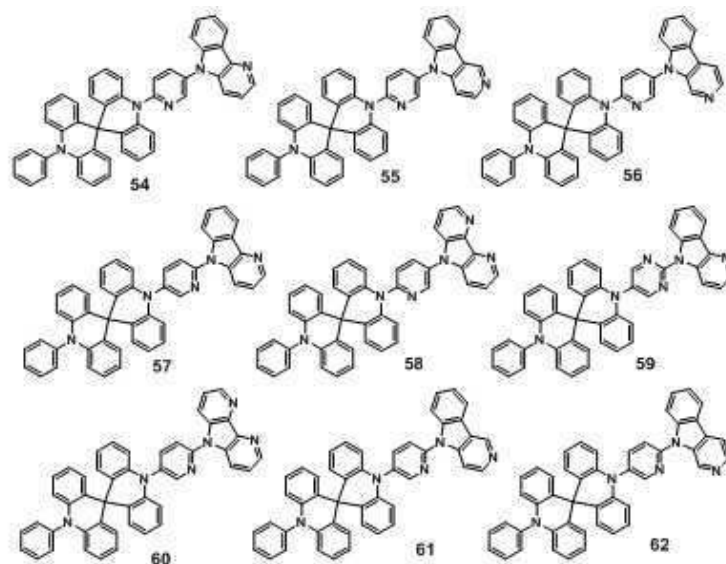
상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것인 유기 전계 발광 소자:

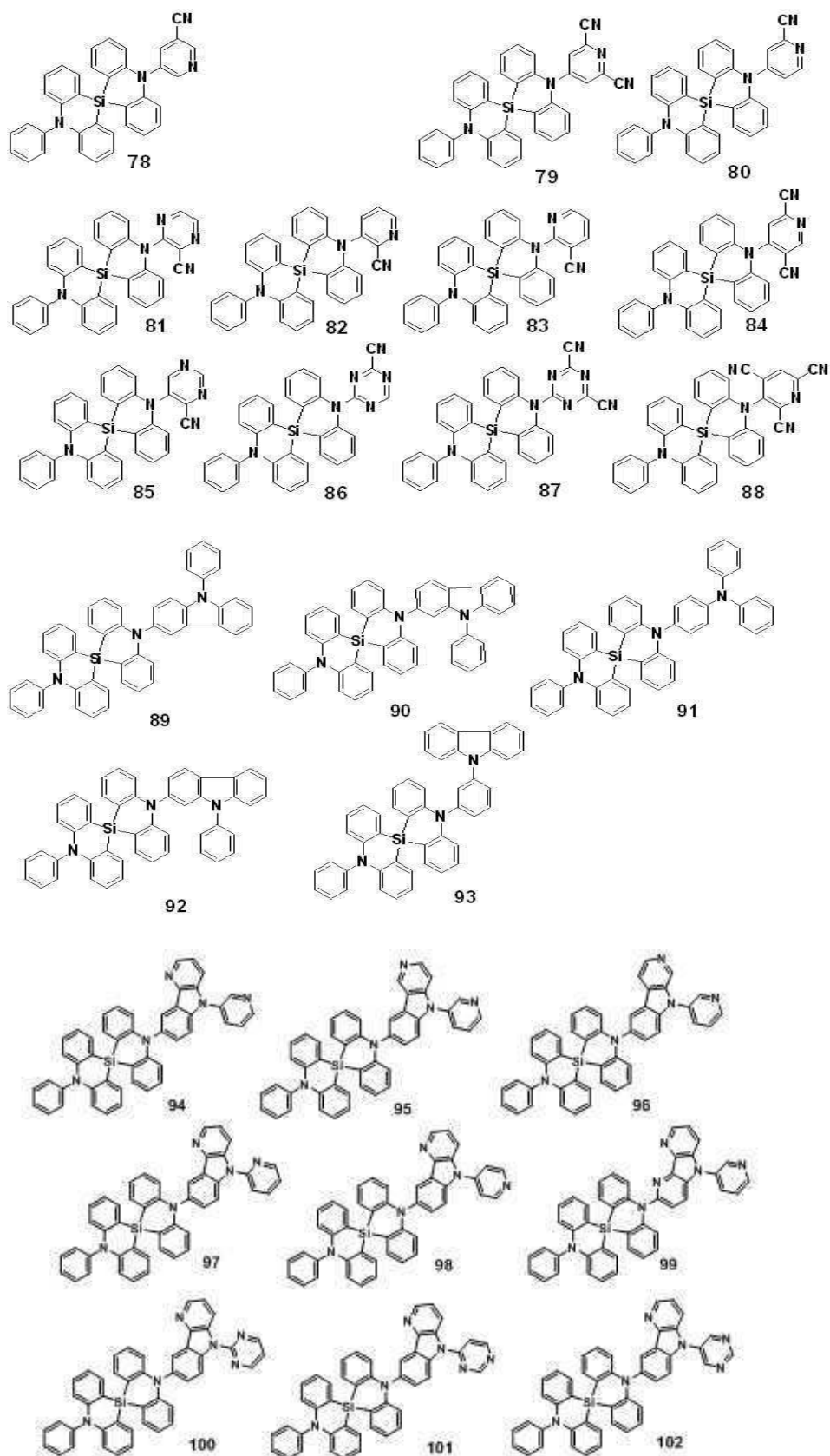
[화합물군 1]

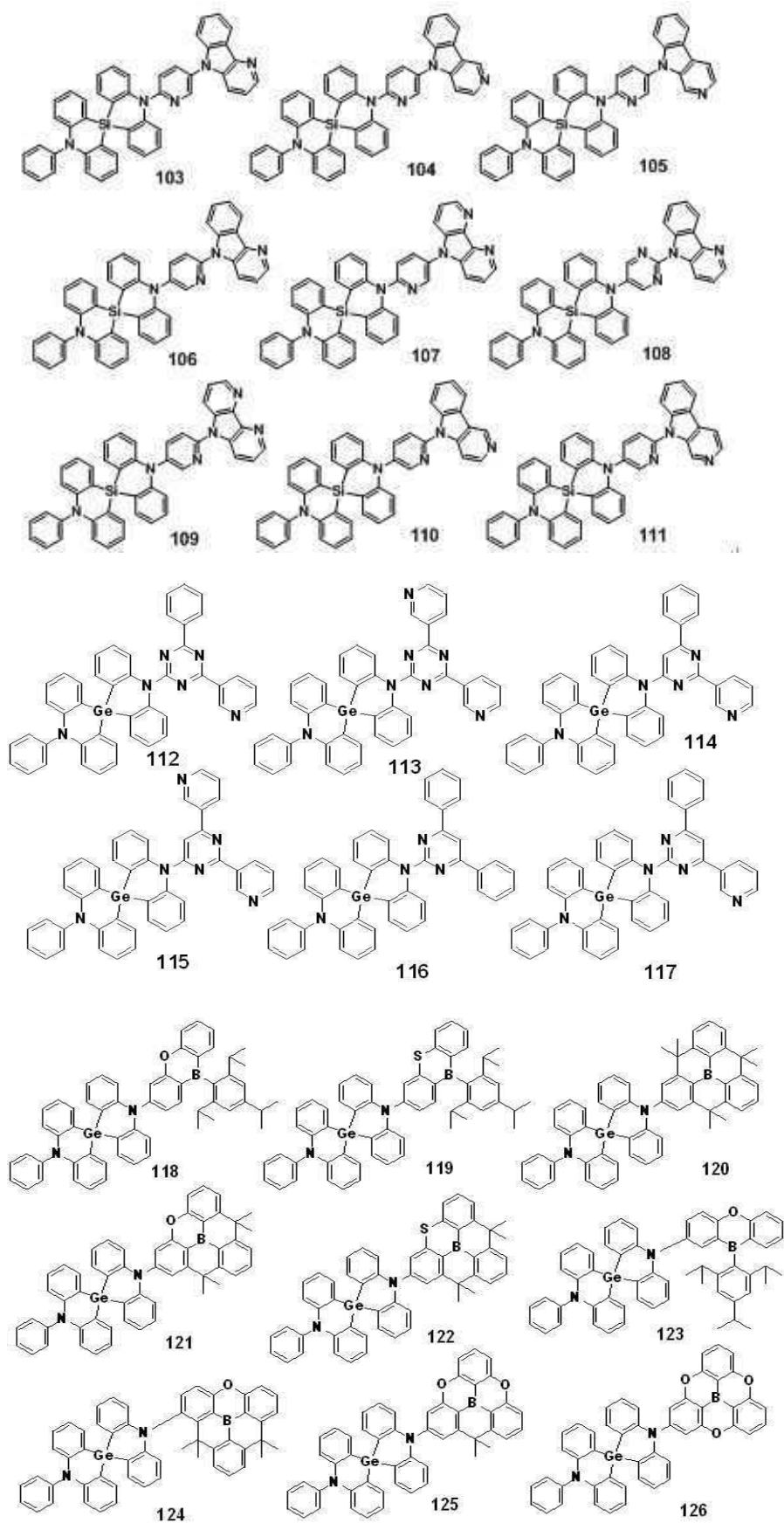


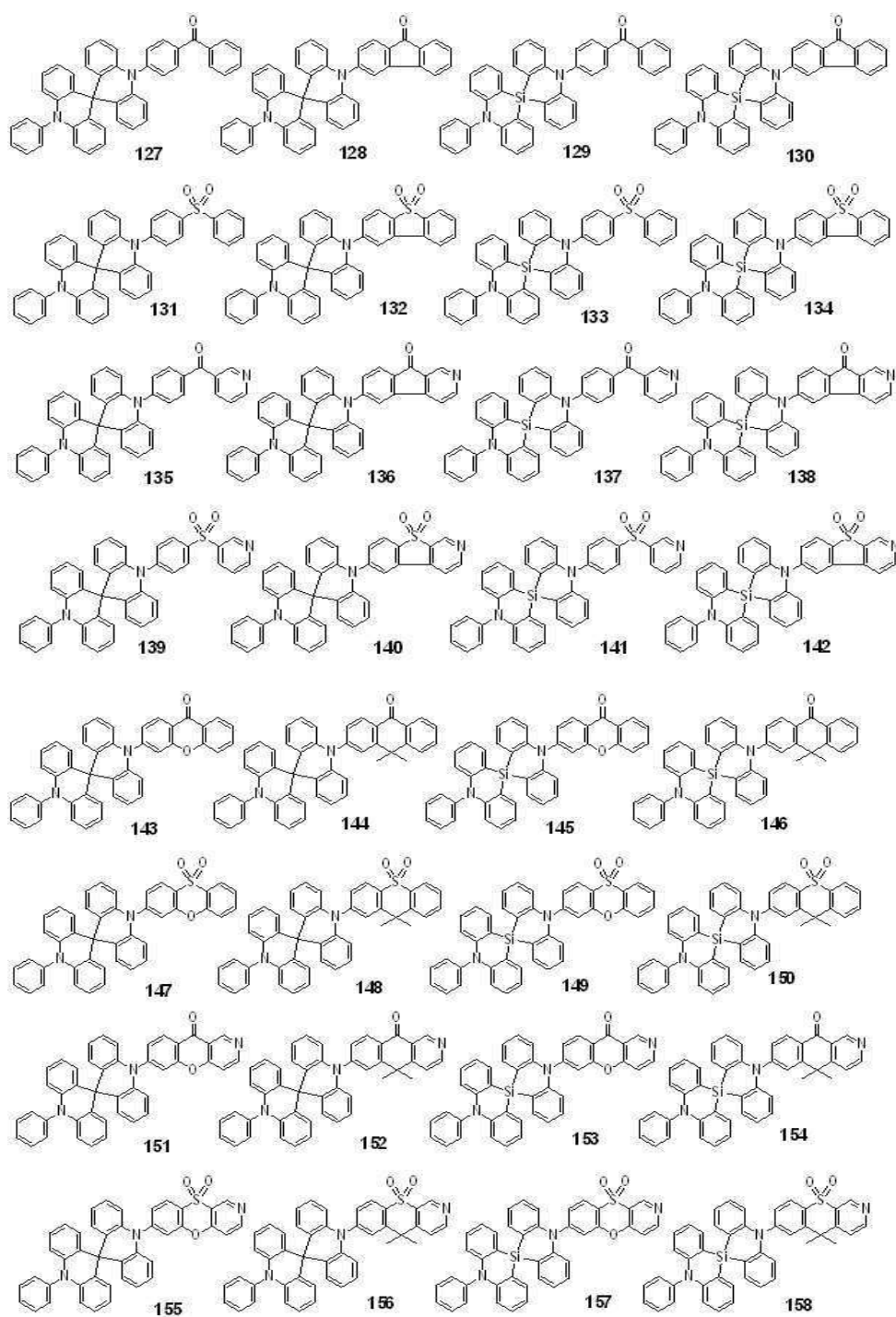


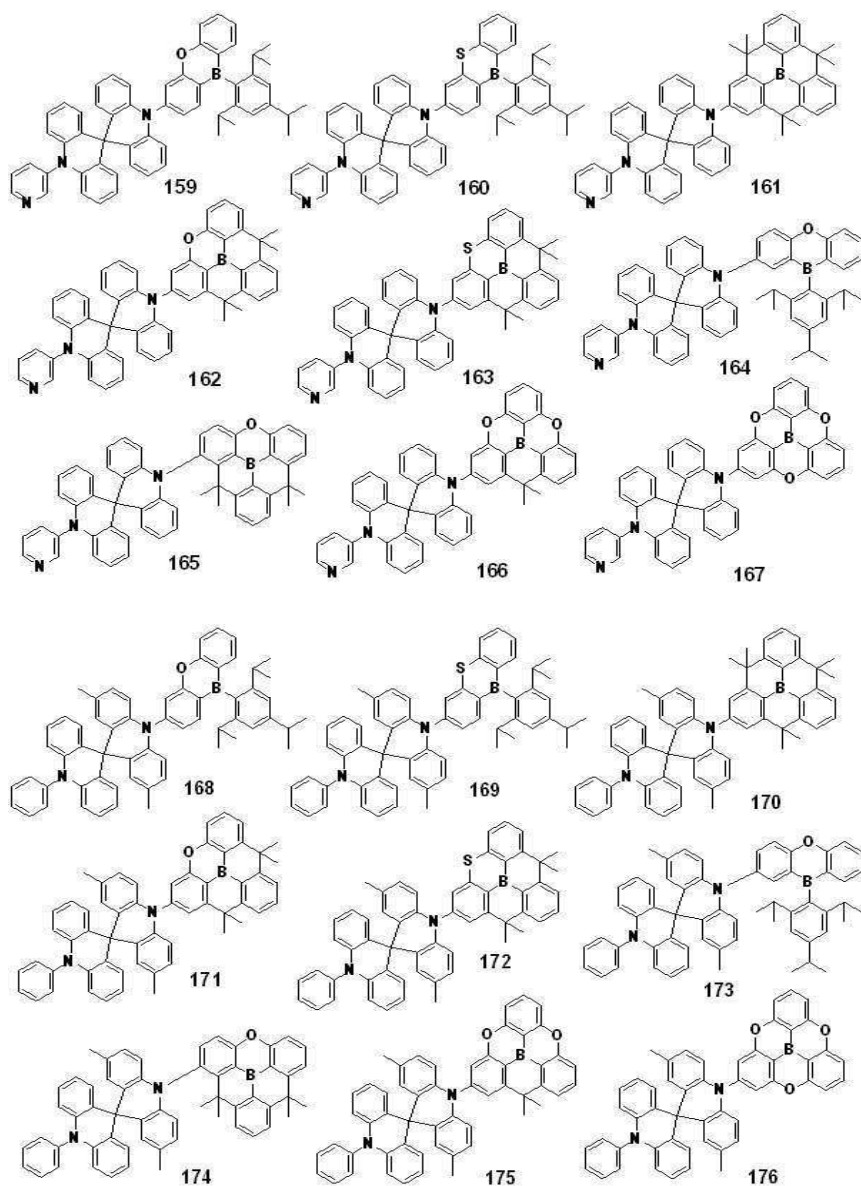








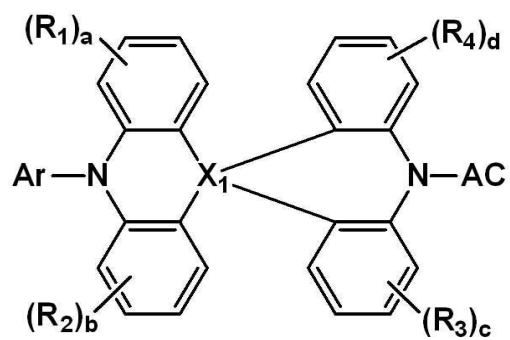




청구항 14

하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X_1 은 C, Si 또는 Ge이고,

Ar 은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소

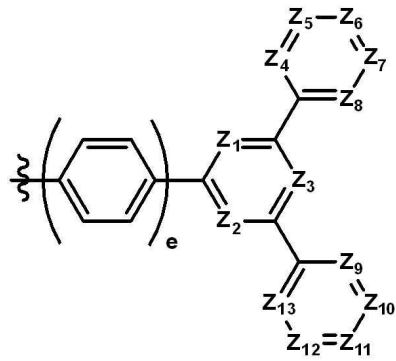
수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

R₁ 내지 R₄는 각각 독립적으로 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,

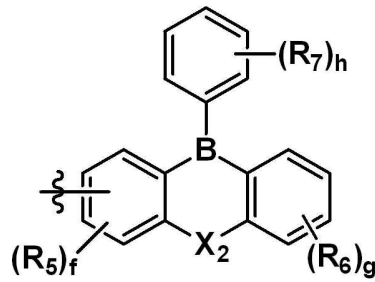
a 내지 d는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며,

AC는 하기 화학식 2 내지 10 중 어느 하나로 표시된다:

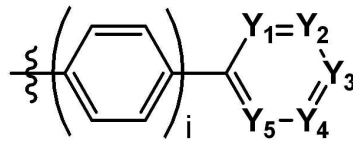
[화학식 2]



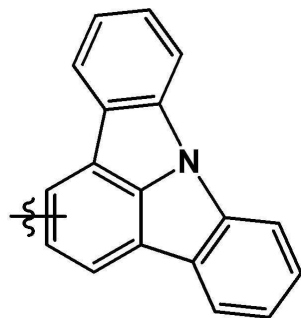
[화학식 3]



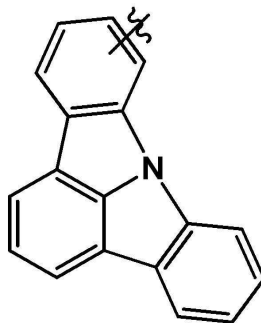
[화학식 4]



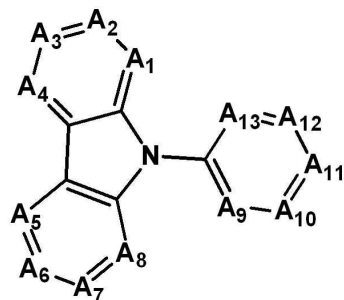
[화학식 5]



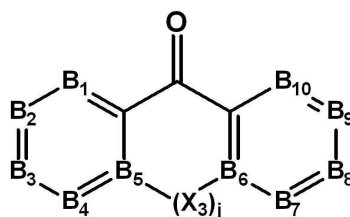
[화학식 6]



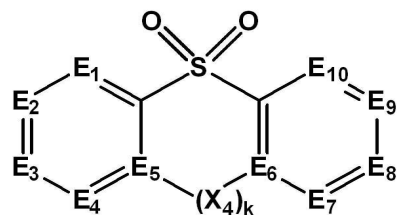
[화학식 7]



[화학식 8]



[화학식 9]



상기 화학식 2에서,

Z_1 내지 Z_{13} 은 각각 독립적으로 CH 또는 N이고, Z_1 내지 Z_3 중 2개 또는 3개는 N이며, Z_4 내지 Z_{13} 중 적어도 하나는 N이고,

e 는 0 이상 2 이하의 정수이며,

상기 화학식 3에서,

X_2 는 O, S 또는 CR_8R_9 이고,

R_5 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 탄화수소 고리 또는 헤테로 고리를 형성하며,

f 는 0 이상 3 이하의 정수이고,

g 는 0 이상 4 이하의 정수이며,

h 는 0 이상 5 이하의 정수이고,

상기 화학식 4에서,

i 는 0 내지 2의 정수이고,

Y_1 은 N 또는 CR_{10} 이고, Y_2 는 N 또는 CR_{11} 이고, Y_3 는 N 또는 CR_{12} 이고, Y_4 는 N 또는 CR_{13} 이고, Y_5 는 N 또는 CR_{14} 이며, Y_1 내지 Y_5 중 적어도 하나는 N이고,

CR_{10} 내지 CR_{14} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 트리플루오로메틸기이며,

화학식 1의 X_1 이 C인 경우, R_{10} 내지 R_{14} 중 적어도 하나는 수소 원자가 아니고,

Y_2 및 Y_4 중 적어도 하나가 N인 경우, Y_3 는 CR_{12} 이고, R_{12} 는 시아노기가 아니며,

상기 화학식 7에서,

A_1 내지 A_{13} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{15} 이고,

A_1 내지 A_8 중 적어도 하나는 N이며, A_9 내지 A_{13} 중 적어도 하나는 N이고,

A_1 내지 A_{13} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며,

R_{15} 는 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,

상기 화학식 8에서,

B_1 내지 B_{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{16} 이고,

B_1 내지 B_{10} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며,

X_3 은 직접 결합(direct linkage), O, S, $CR_{17}R_{18}$, 또는 $SiR_{19}R_{20}$ 이고,

j 는 0 또는 1이며, j 가 1인 경우 B_5 및 B_6 은 C이며,

R_{16} 내지 R_{20} 은 각각 독립적으로 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,

상기 화학식 9에서,

E_1 내지 E_{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{21} 이고,

E_1 내지 E_{10} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며,

X_3 은 직접 결합(direct linkage), O, S, $CR_{22}R_{23}$, 또는 $SiR_{24}R_{25}$ 이고,

k 는 0 또는 1이며, k 가 1인 경우 E_5 및 E_6 은 C이며,

R_{22} 내지 R_{25} 은 각각 독립적으로 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 헤테로아릴기이다.

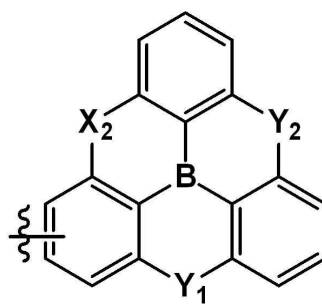
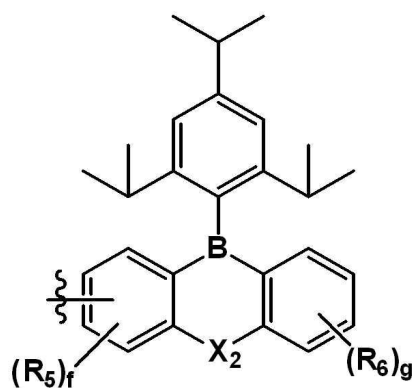
청구항 15

제14항에 있어서,

상기 화학식 3은 하기 화학식 3-1 또는 3-2로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 3-1]

[화학식 3-2]



상기 화학식 3-1 및 3-2에서,

X_2 , R_5 , R_6 , f 및 g 는 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고,

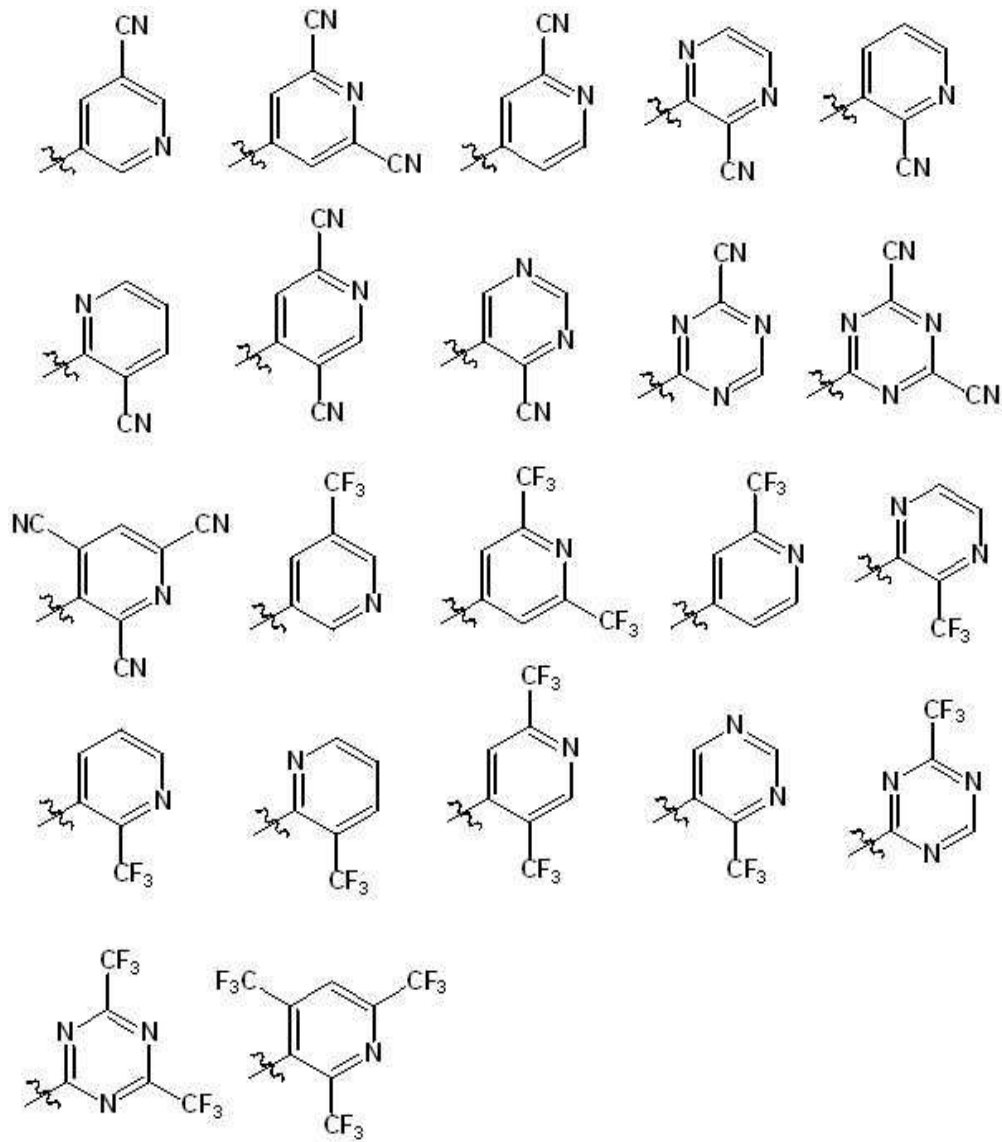
Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 O, S 또는 $CR_{26}R_{27}$ 이며,

R_{26} 및 R_{27} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이다.

청구항 16

제14항에 있어서,

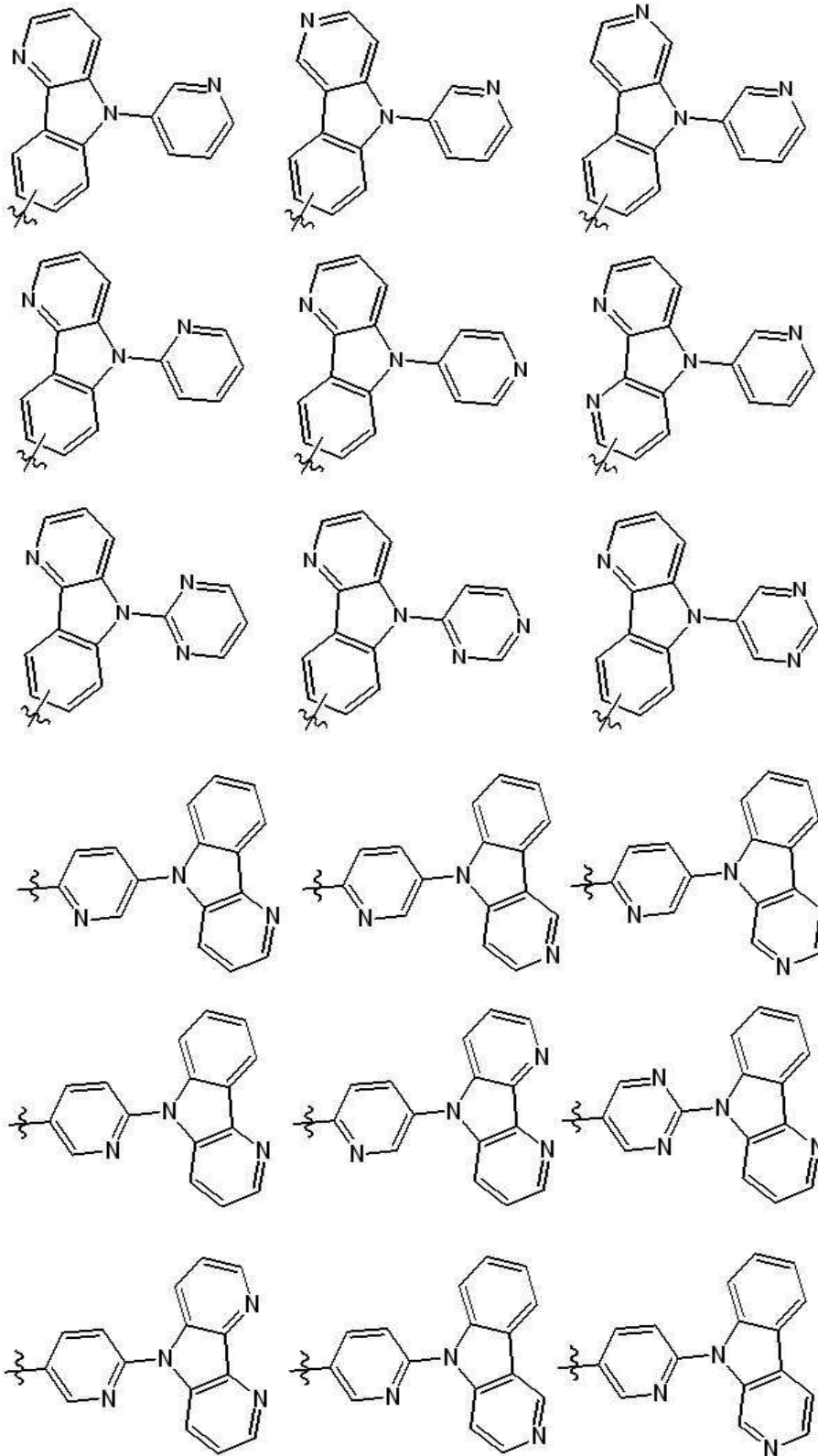
상기 화학식 4는 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 다환 화합물:



청구항 17

제14항에 있어서,

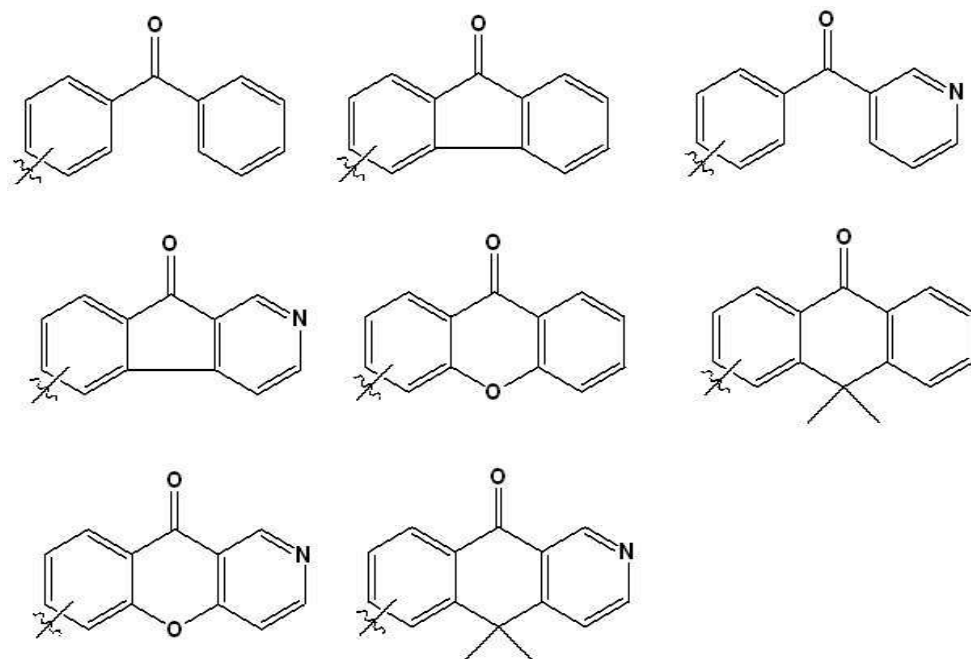
상기 화학식 7은 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 다환 화합물:



청구항 18

제14항에 있어서,

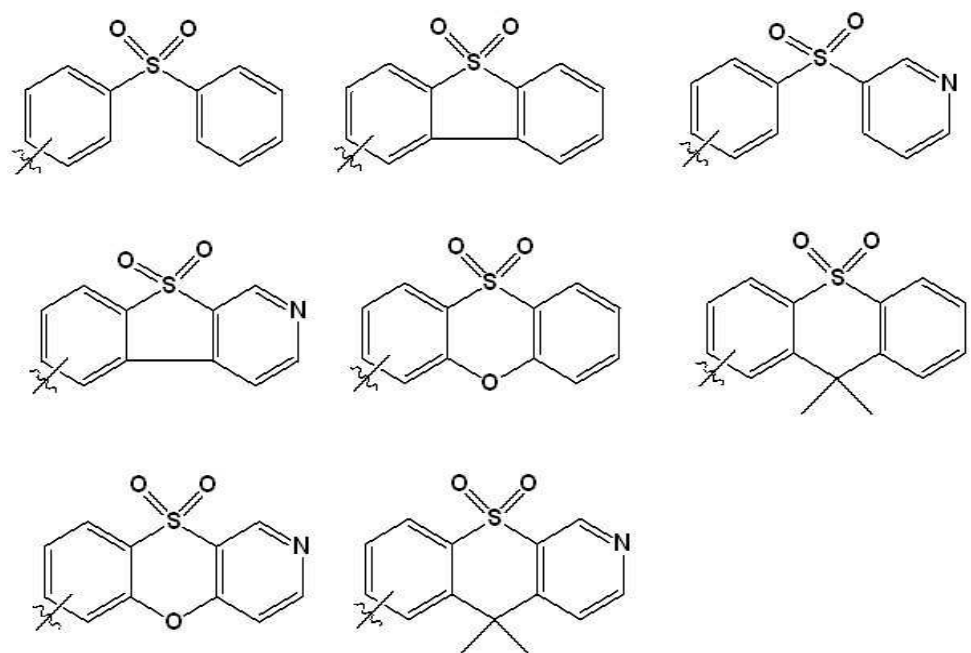
상기 화학식 8은 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 다환 화합물:



청구항 19

제14항에 있어서,

상기 화학식 9는 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 다환 화합물:

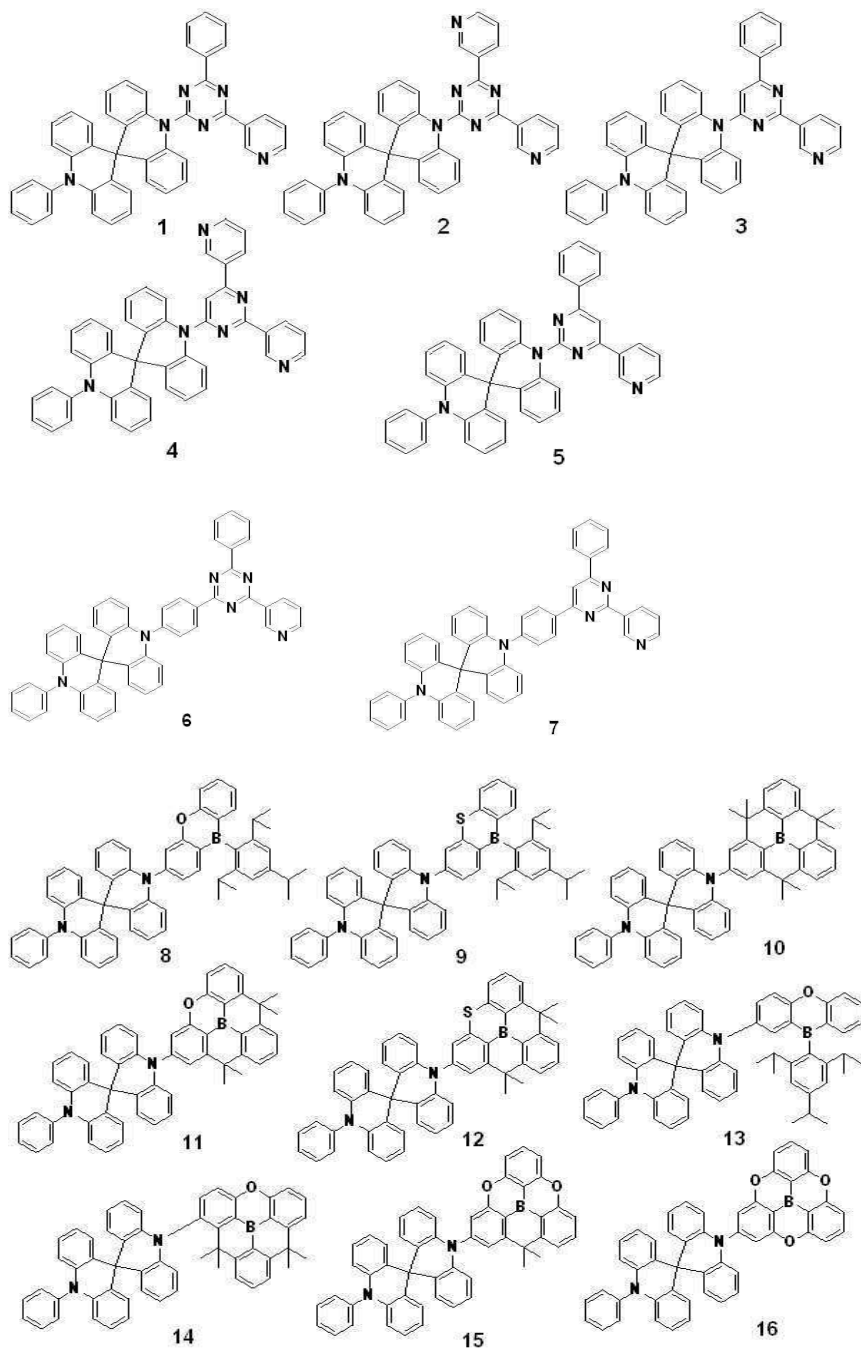


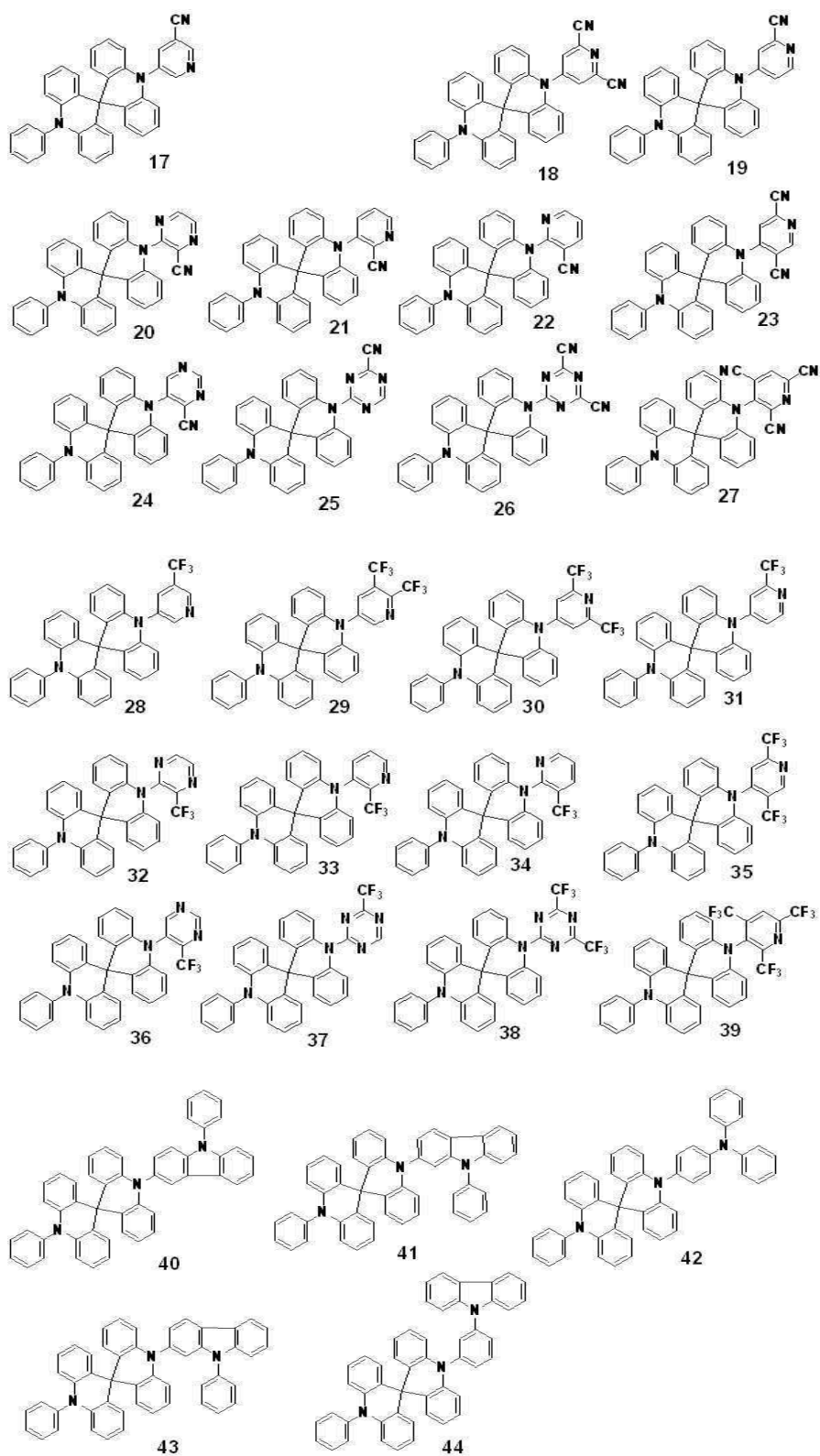
청구항 20

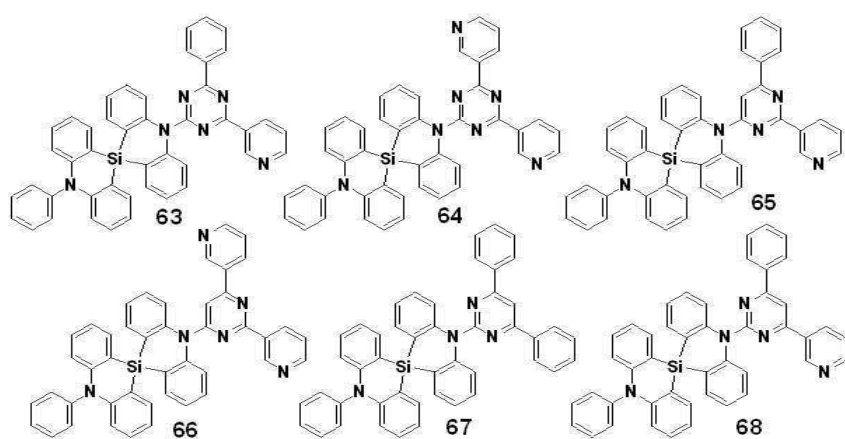
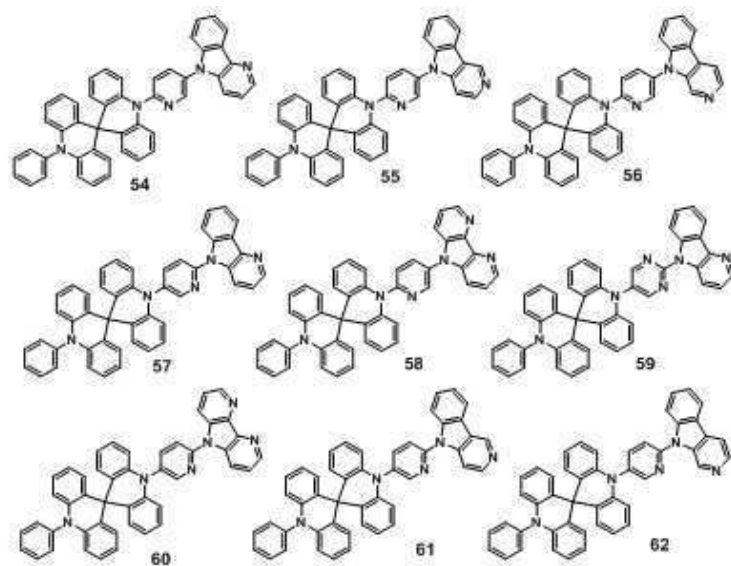
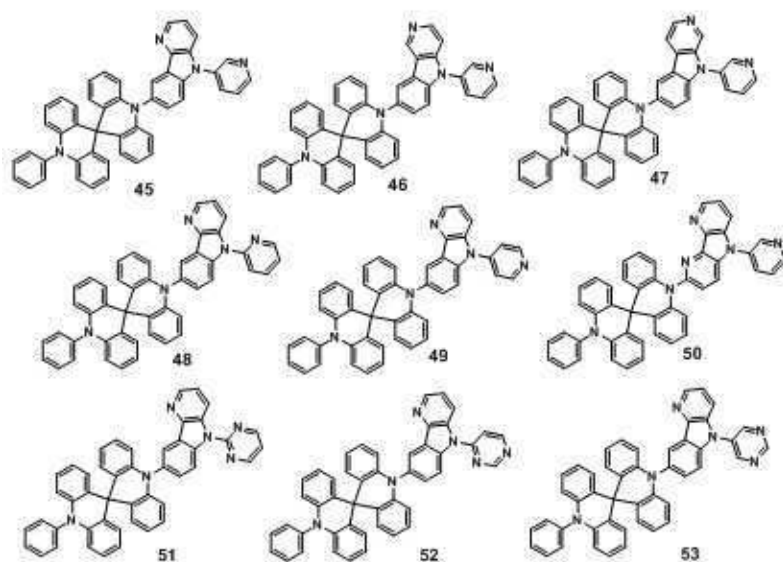
제14항에 있어서,

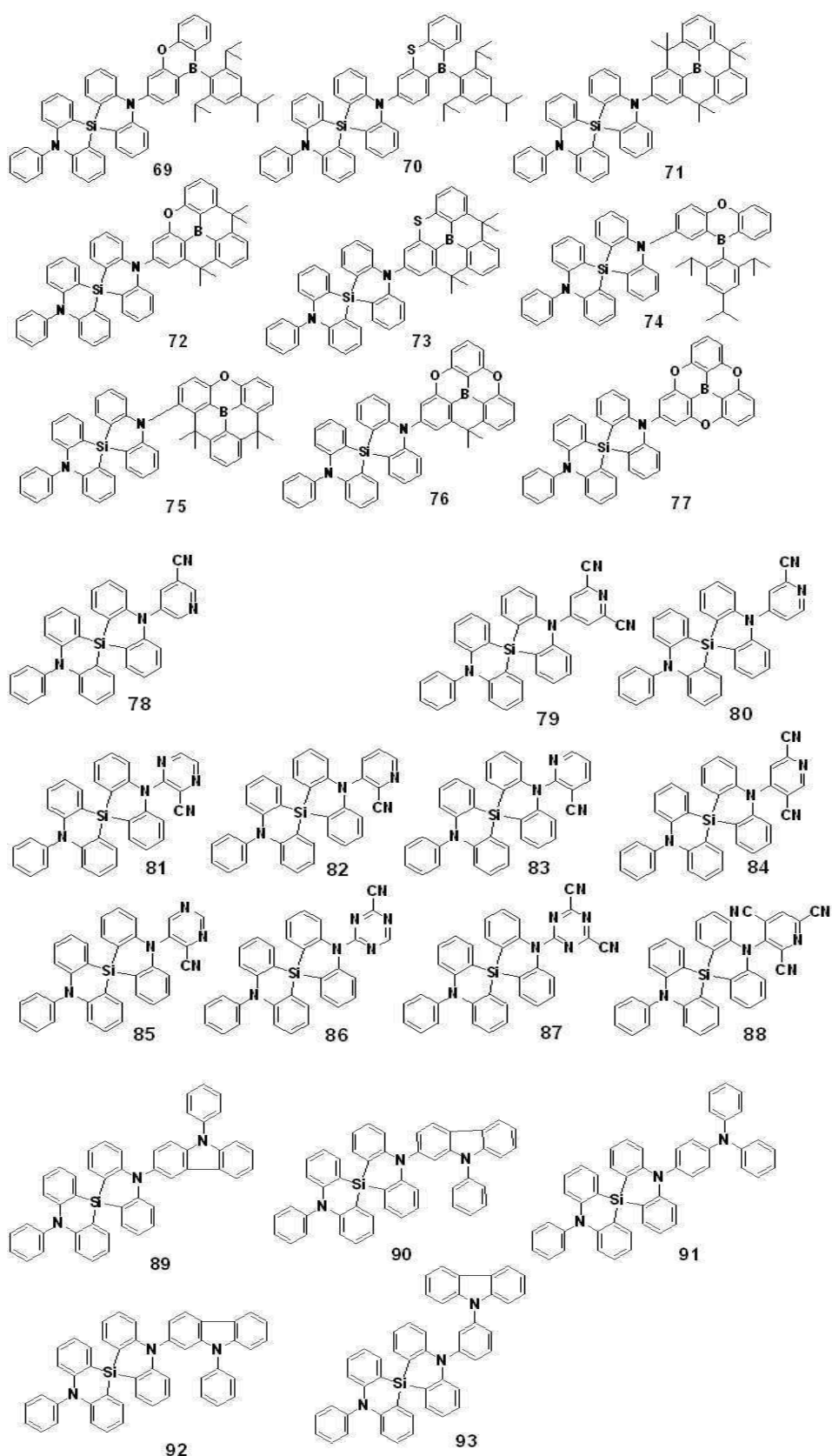
상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것인 다환 화합물.

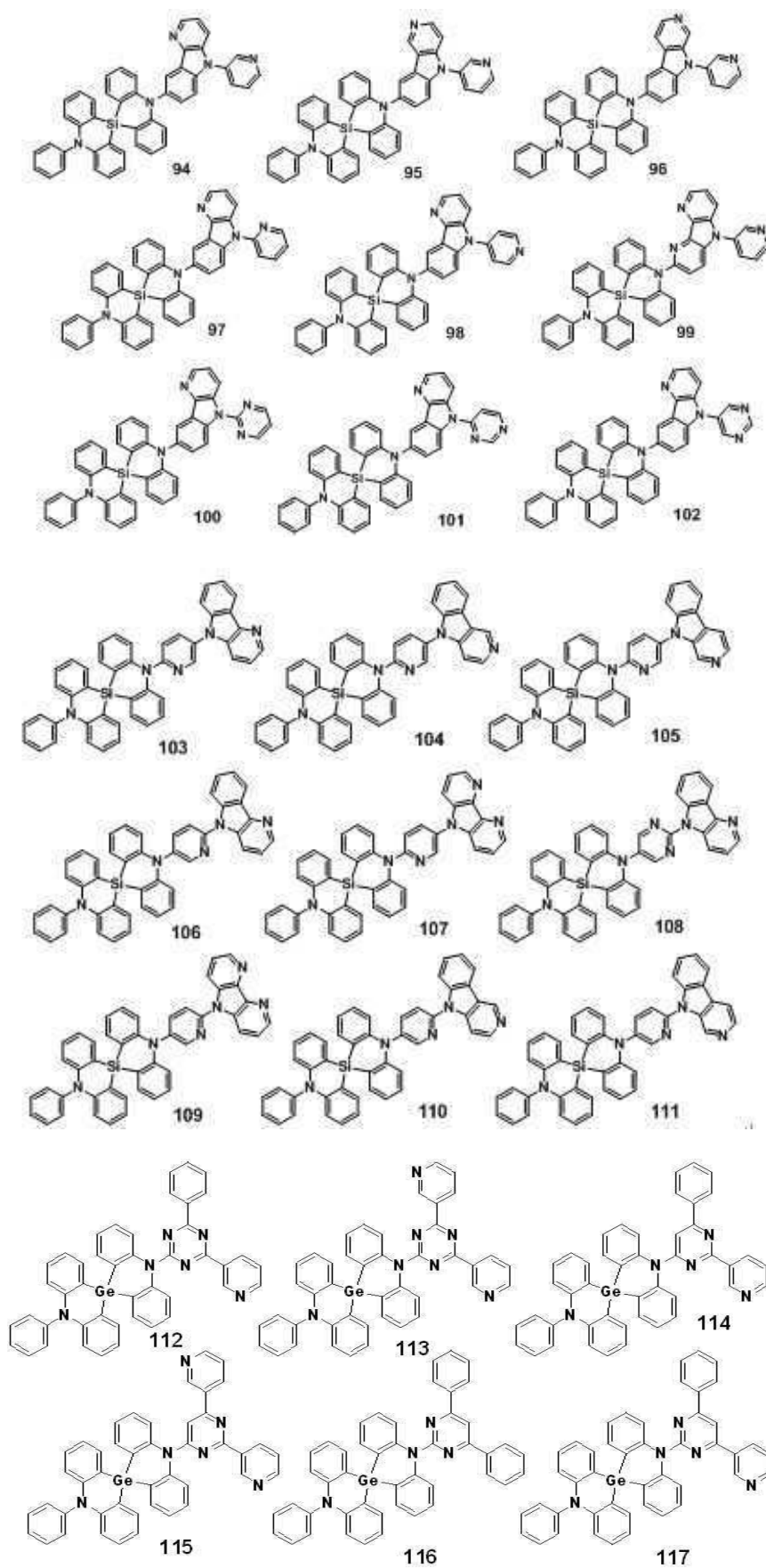
[화합물군 1]

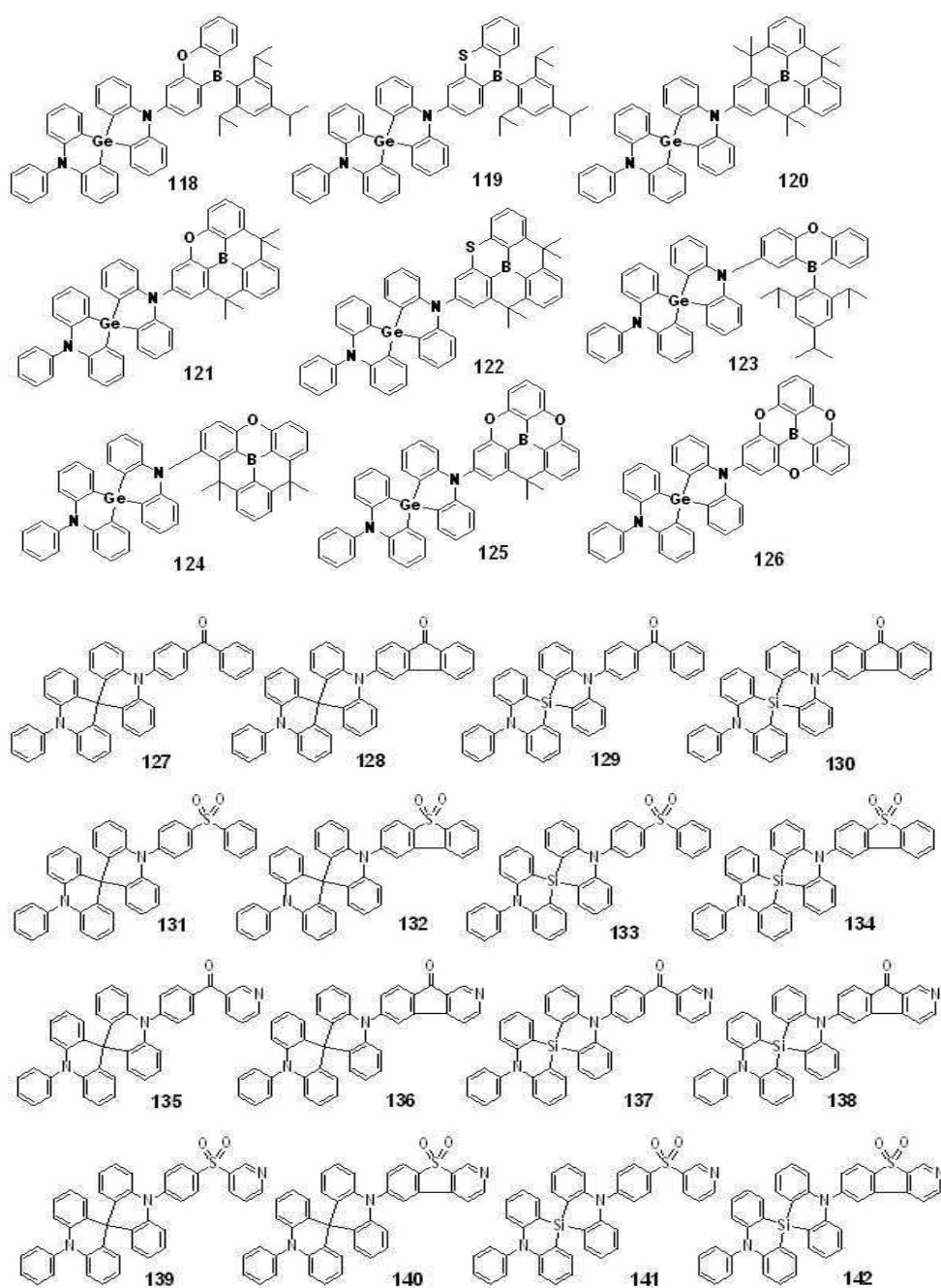


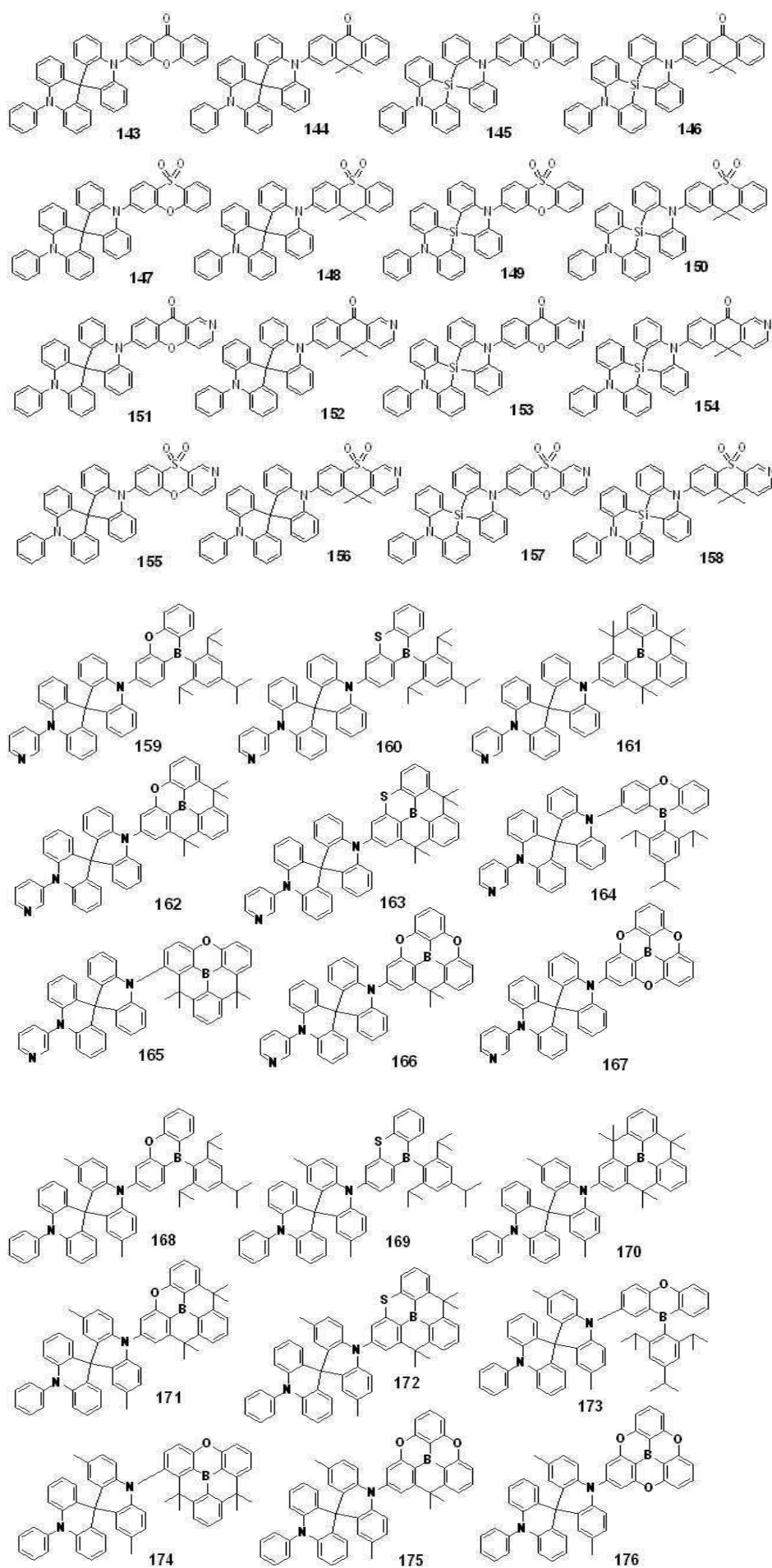












발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0002] 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 소자(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 활발히 이루어지고 있다. 유기 전계 발광 소자는 액정 표시 장치 등과 는 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

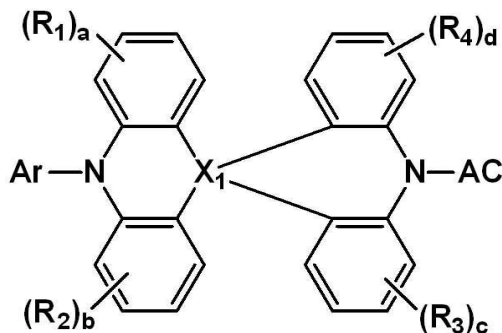
해결하려는 과제

[0004] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 다환 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 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

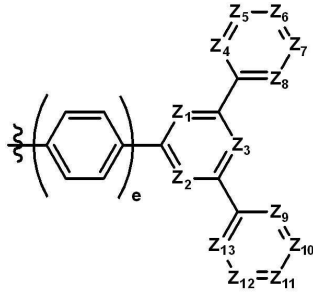
[0006] [화학식 1]



[0007]

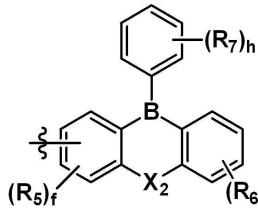
[0008] 화학식 1에서, X_1 은 C, Si 또는 Ge이고, Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, a 내지 d는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, AC는 하기 화학식 2 내지 10 중 어느 하나로 표시된다.

[0009] [화학식 2]



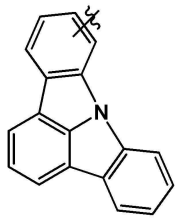
[0010]

[0011] [화학식 3]



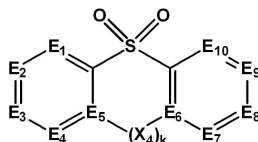
[0012]

[0013] [화학식 6]



[0014]

[0015] [화학식 9]



[0016]

[0017] 화학식 2에서, Z₁ 내지 Z₁₃은 각각 독립적으로 CH 또는 N이고, Z₁ 내지 Z₃ 중 2개 또는 3개는 N이며, Z₄ 내지 Z₁₃ 중 적어도 하나는 N이고, e는 0 이상 2 이하의 정수이다.

[0018] 화학식 3에서, X₂는 O, S 또는 CR₈R₉이고, R₅ 내지 R₉는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 탄화수소 고리 또는 헤테로 고리를 형성하며, f는 0 이상 3 이하의 정수이고, g는 0 이상 4 이하의 정수이며, h는 0 이상 5 이하의 정수이다.

[0019] 화학식 4에서, i는 0 내지 2의 정수이고, Y₁은 N 또는 CR₁₀이고, Y₂는 N 또는 CR₁₁이고, Y₃는 N 또는 CR₁₂이고, Y₄는 N 또는 CR₁₃이고, Y₅는 N 또는 CR₁₄이며, Y₁ 내지 Y₅ 중 적어도 하나는 N이고, CR₁₀ 내지 CR₁₄는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 트리플루오로메틸기이며, 화학식 1의 X₁이 C인 경우, R₁₀ 내지 R₁₄ 중 적어도 하나는 수소 원자가 아니고, Y₂ 및 Y₄ 중 적어도 하나가 N인 경우, Y₃는 CR₁₂이고, R₁₂는 시아노기가 아니다.

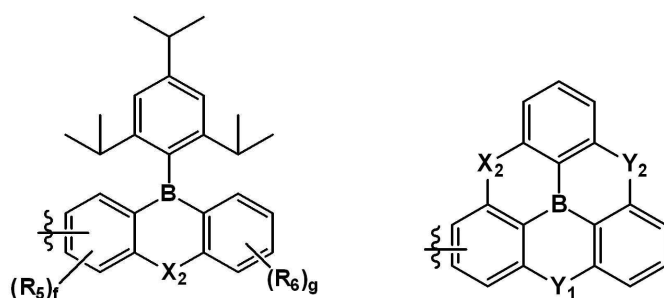
[0020] 화학식 7에서, A₁ 내지 A₁₃은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₅이고, A₁ 내지 A₈ 중 적어도 하나는 N이며, A₉ 내지 A₁₃ 중 적어도 하나는 N이고, A₁ 내지 A₁₃ 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며, R₁₅는 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0021] 화학식 8에서, B_1 내지 B_{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{16} 이고, B_1 내지 B_{10} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며, X_3 은 직접 결합(direct linkage), O, S, $CR_{17}R_{18}$, 또는 $SiR_{19}R_{20}$ 이고, j는 0 또는 1이며, j가 1인 경우 B_5 및 B_6 은 C이며, R_{16} 내지 R_{20} 은 각각 독립적으로 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 헤테로아릴기이다.

[0022] 화학식 9에서, E_1 내지 E_{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{21} 이고, E_1 내지 E_{10} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며, X_3 은 직접 결합(direct linkage), O, S, $CR_{22}R_{23}$, 또는 $SiR_{24}R_{25}$ 이고, k는 0 또는 1이며, k가 1인 경우 E_5 및 E_6 은 C이며, R_{22} 내지 R_{25} 는 각각 독립적으로 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 헤테로아릴기이다.

[0023] 화학식 3은 하기 화학식 3-1 또는 3-2로 표시될 수 있다.

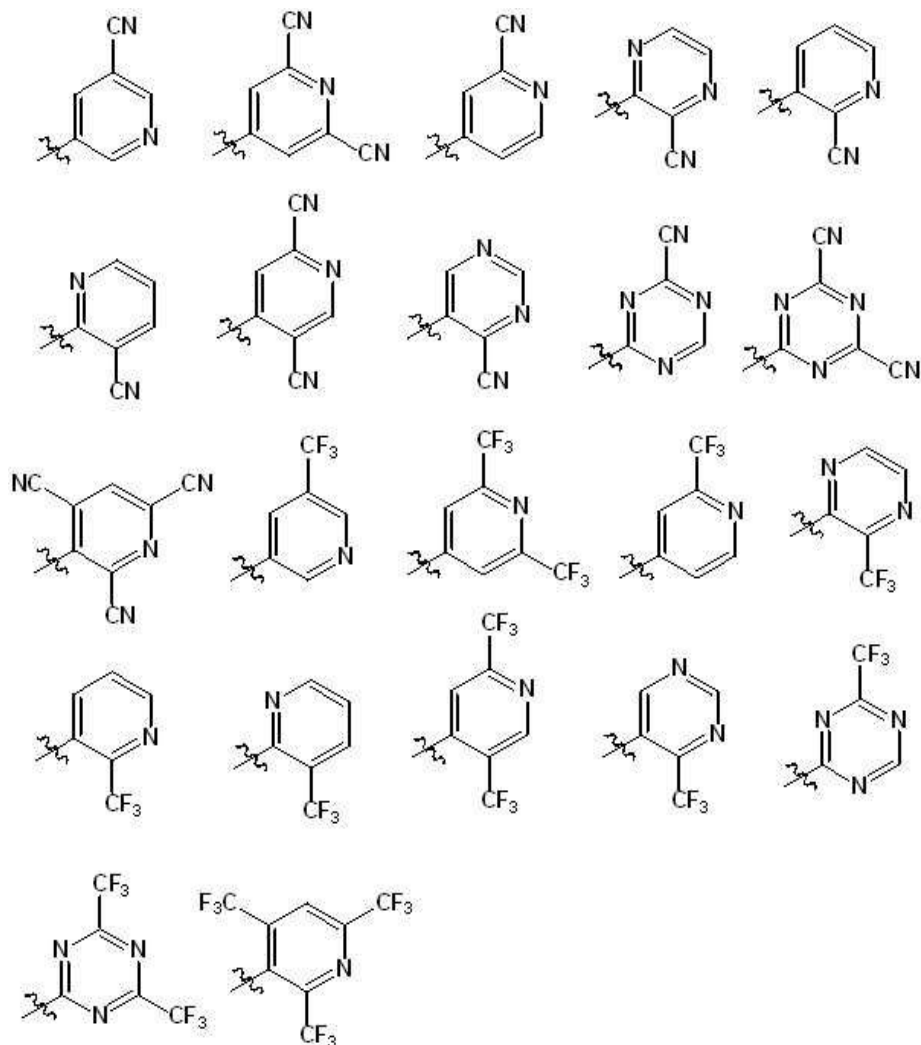
[0024] [화학식 3-1] [화학식 3-2]



[0025]

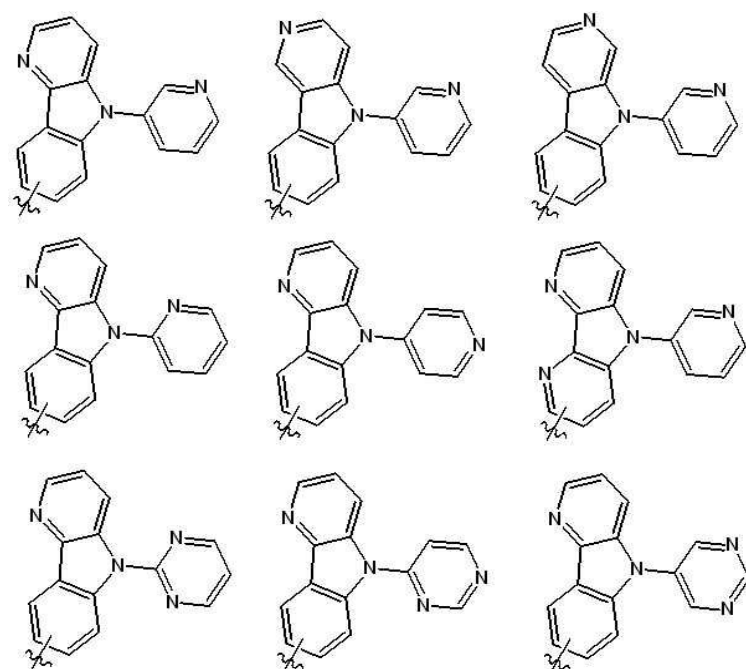
[0026] 화학식 3-1 및 3-2에서, X_2 , R_5 , R_6 , f 및 g 는 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고, Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 O, S 또는 $CR_{26}R_{27}$ 이며, R_{26} 및 R_{27} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이다.

[0027] 화학식 4는 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

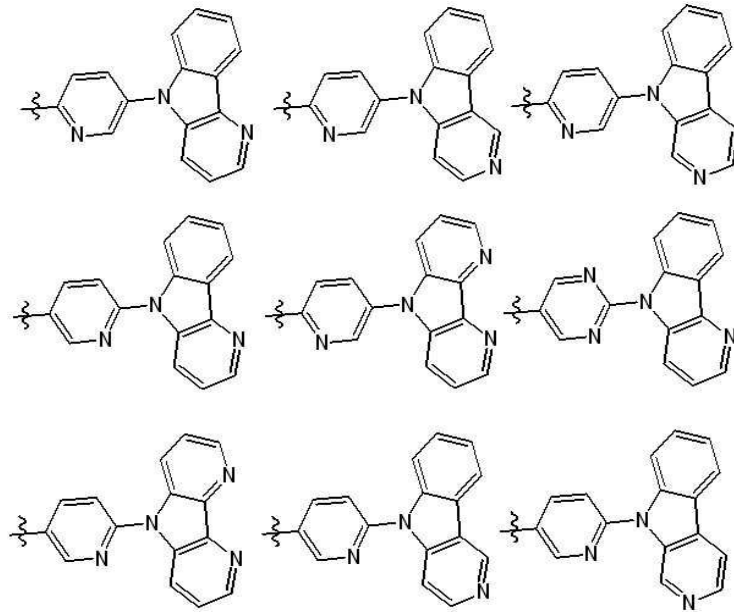


[0028]

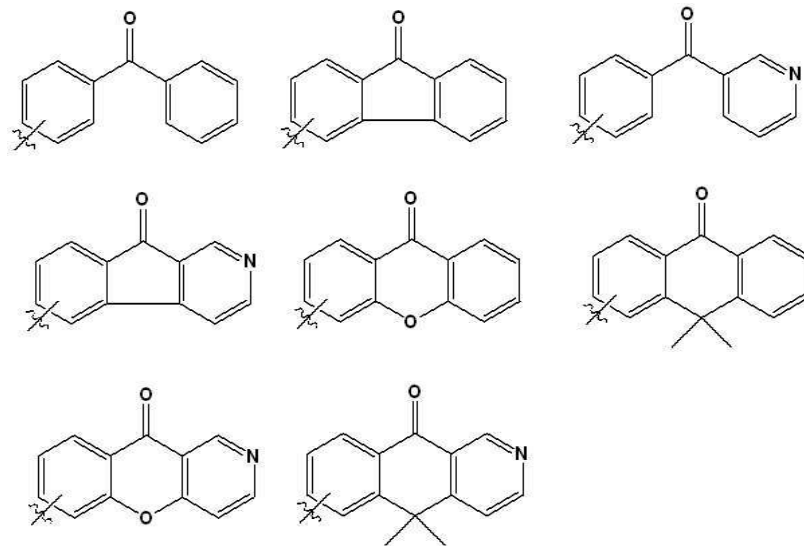
[0029] 화학식 7은 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



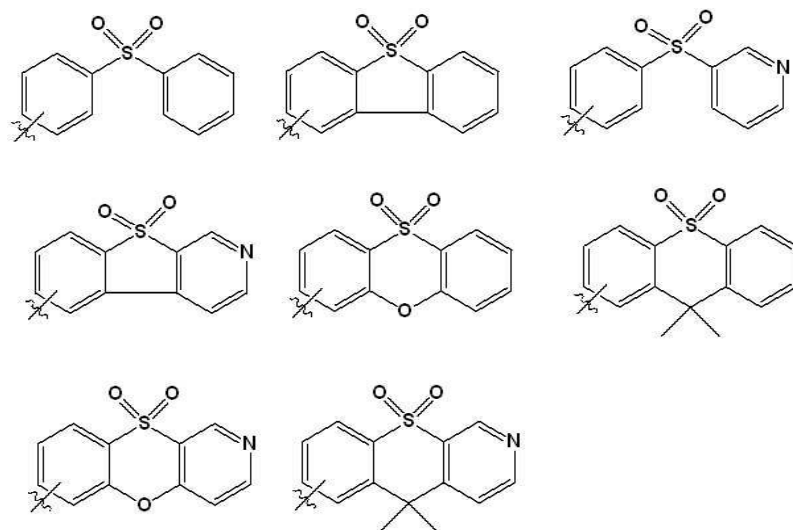
[0030]



화학식 8은 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



화학식 9는 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



- [0036] 화학식 1에서, Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.
- [0037] 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 도펀트가 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다.
- [0038] 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 열 활성 지연 형광용 도펀트일 수 있다.
- [0039] 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 470nm 미만의 파장 영역을 갖는 청색 도펀트일 수 있다.
- [0040] 정공 수송 영역은 제1 전극 상에 배치된 정공 주입층, 정공 주입층 상에 배치된 정공 수송층, 및 정공 수송층 상에 배치된 전자 저지층을 포함하는 것일 수 있다.
- [0041] 전자 수송 영역은 발광층 상에 배치된 정공 저지층, 정공 저지층 상에 배치된 전자 수송층 및 전자 수송층 상에 배치된 전자 주입층을 포함하는 것일 수 있다.
- [0042] 본 발명의 일 실시예는 상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 제공한다.

발명의 효과

- [0043] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 효율이 우수하다.
- [0044] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 유기 전계 발광 소자에 적용될 수 있으며, 고효율화에 기여할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0045] 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

- [0046] 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.
- [0047] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0048] 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.
- [0049] 먼저, 도 1 내지 도 3을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.
- [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.
- [0051] 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.

- [0052] 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.
- [0053] 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.
- [0054] 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.
- [0055] 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.
- [0056] 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.
- [0057] 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.
- [0058] 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,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.
- [0059] 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.
- [0060] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 모두 포함하면, 정공 주입층(HIL)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0061] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은

예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀸논(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 퀸논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0062] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층 및 전자 저지층 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.

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

[0064] 발광층(EML)은 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함한다. 이하에서는 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물에 대해 자세히 설명한다.

[0065] 본 명세서에서,  는 연결되는 부위를 의미한다.

[0066] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로젠 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.

[0067] 예를 들어, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 알킬기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다.

[0068] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.

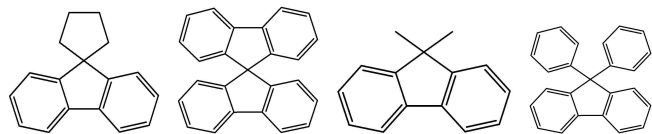
[0069] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 5 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2-에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리카실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0070] 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.

[0071] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 60 이하, 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 또는 6 이상 15 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀴크페닐기, 섹시페닐기, 바이페닐렌기, 트리페닐렌기,

피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0072] 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.



[0073]

[0074] 본 명세서에서, 헤테로고리기는 헤테로 원자로 B, O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 것일 수 있다. 헤테로고리기가 헤테로 원자를 2개 이상 포함할 경우, 2개 이상의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로고리기는 단환식 헤테로고리기 또는 다환식 헤테로고리기일 수 있으며, 헤테로아릴기를 포함하는 개념이다. 헤테로고리기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하, 또는 2 이상 10 이하일 수 있다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 페녹사진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라지노 피라진기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨란기, 페난트롤린기, 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 페노티아진기, 디벤조실롤기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0075] 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.

[0076] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

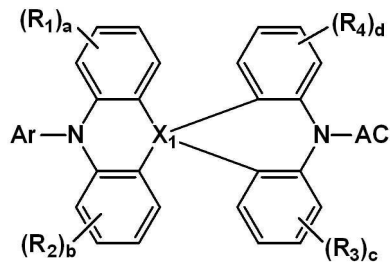
[0077] 본 명세서에서, 아미노기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아미노기는 알킬 아미노기 및 아릴 아미노기를 포함할 수 있다. 아미노기의 예로는 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 페닐아미노기, 디페닐아미노기, 나프틸아미노기, 9-메틸-안트라세닐아미노기, 트리페닐아미노기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0078] 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.

[0079] 본 명세서에서, 포스핀 설파이드기는 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환될 수 있다.

[0080] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0081] [화학식 1]

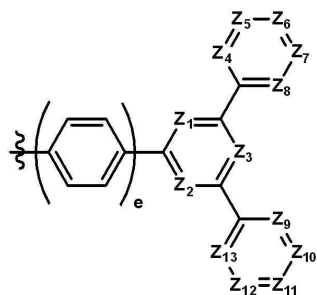


[0082]

[0083] 화학식 1에서, X_1 은 C, Si 또는 Ge이고, Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로 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 헤테로아릴기

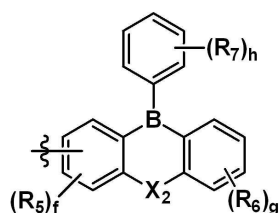
고, a 내지 d는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, AC는 하기 화학식 2 내지 10 중 어느 하나로 표시된다.

[0084] [화학식 2]



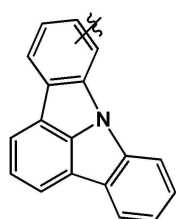
[0085]

[0086] [화학식 3]



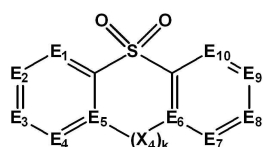
[0087]

[0088] [화학식 6]



[0089]

[0090] [화학식 9]



[0091]

[0092] 화학식 2에서, Z₁ 내지 Z₁₃은 각각 독립적으로 CH 또는 N이고, Z₁ 내지 Z₃ 중 2개 또는 3개는 N이며, Z₄ 내지 Z₁₃ 중 적어도 하나는 N이고, e는 0 이상 2 이하의 정수이다.

[0093] 화학식 3에서, X₂는 0, S 또는 CR₈R₉이고, R₅ 내지 R₉는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 탄화수소 고리 또는 헤테로 고리를 형성하며, f는 0 이상 3 이하의 정수이고, g는 0 이상 4 이하의 정수이며, h는 0 이상 5 이하의 정수이고, 상기 화학식 4에서, i는 0 내지 2의 정수이고, Y₁은 N 또는 CR₁₀이고, Y₂는 N 또는 CR₁₁이고, Y₃는 N 또는 CR₁₂이고, Y₄는 N 또는 CR₁₃이고, Y₅는 N 또는 CR₁₄이며, Y₁ 내지 Y₅ 중 적어도 하나는 N이고, CR₁₀ 내지 CR₁₄는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 시아노기, 또는 트리플루오로메틸기이며, 화학식 1의 X₁이 C인 경우, R₁₀ 내지 R₁₄ 중 적어도 하나는 수소 원자가 아니고, Y₂ 및 Y₄ 중 적어도 하나가 N인 경우, Y₃는 CR₁₂이고, R₁₂는 시아노기가 아니다.

[0094] 화학식 7에서, A₁ 내지 A₁₃은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₅이고, A₁ 내지 A₈ 중 적어도 하나는 N이며, A₉ 내지 A₁₃ 중 적어도 하나는 N이고, A₁ 내지 A₁₃ 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며, R₁₅는 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 헤테로아릴기이다.

[0095] 화학식 8에서, B_1 내지 B_{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{16} 이고, B_1 내지 B_{10} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며, X_3 는 직접 결합(direct linkage), O, S, $CR_{17}R_{18}$, 또는 $SiR_{19}R_{20}$ 이고, j는 0 또는 1이며, j가 1인 경우 B_5 및 B_6 은 C이며, R_{16} 내지 R_{20} 은 각각 독립적으로 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 헤테로아릴기이다.

[0096] 화학식 9에서, E_1 내지 E_{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_{21} 이고, E_1 내지 E_{10} 중 하나는 화학식 1과 연결되는 부위이며, X_3 는 직접 결합(direct linkage), O, S, $CR_{22}R_{23}$, 또는 $SiR_{24}R_{25}$ 이고, k는 0 또는 1이며, k가 1인 경우 E_5 및 E_6 은 C이며, R_{22} 내지 R_{25} 는 각각 독립적으로 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 헤테로아릴기이다.

[0097] 화학식 1에서, a가 2 이상일 경우, 복수의 R_1 은 서로 동일하거나 상이하고, b가 2 이상일 경우, 복수의 R_2 는 서로 동일하거나 상이하고, c가 2 이상일 경우, 복수의 R_3 은 서로 동일하거나 상이하고, d가 2 이상일 경우, 복수의 R_4 는 서로 동일하거나 상이하다.

[0098] 화학식 1에서, a가 0일 경우, R_1 은 수소 원자가 아닐 수 있고, b가 0일 경우, R_2 는 수소 원자가 아닐 수 있으며, c가 0일 경우, R_3 은 수소 원자가 아닐 수 있고, d가 0일 경우, R_4 는 수소 원자가 아닐 수 있다.

[0099] 예를 들어, a 내지 d는 각각 0일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 다환 화합물의 에너지 레벨 조절 등을 위해 a 내지 d 중 적어도 하나가 1 이상이고, 수소 원자가 아닌 치환기가 도입될 수 있다.

[0100] 화학식 1에서, Ar은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있다. 예를 들어, Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 안트라센기, 치환 또는 비치환된 페난트렌기, 또는 치환 또는 비치환된 터페닐기일 수 있다. 예를 들어, Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 예를 들어, Ar은 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0101] 화학식 1의 AC는 전자 수용성기이고, 화학식 1의 AC를 제외한 구조는 전자 공여성기이다. 즉, 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 전자 수용성기와 전자 공여성기를 하나의 분자 내에 포함한다.

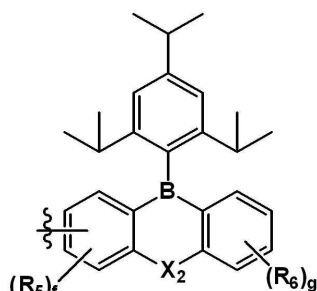
[0102] 화학식 2에서, Z_5 내지 Z_7 , 및 Z_{10} 내지 Z_{12} 중 적어도 하나는 N일 수 있다.

[0103] 화학식 3에서, f가 2 이상일 경우, 복수의 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, g가 2 이상일 경우, 복수의 R_6 은 서로 동일하거나 상이하고, h가 2 이상일 경우, 복수의 R_7 은 서로 동일하거나 상이하다.

[0104] 화학식 3에서, f가 0일 경우, R_5 는 수소 원자가 아닐 수 있고, g가 0일 경우, R_6 은 수소 원자가 아닐 수 있으며, h가 0일 경우, R_7 은 수소 원자가 아닐 수 있다.

[0105] 예를 들어, h는 1 이상이고, R_7 은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기일 수 있다. 화학식 3은 예를 들어, 하기 화학식 3-1로 표시될 수 있다.

[0106] [화학식 3-1]



[0107]

[0108] 화학식 3-1에서, X_2 , R_5 , R_6 , f 및 g 는 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다. 화학식 3-1은 보다 구체적으로 하기 화학식 3-1-1 또는 3-1-2로 표시될 수 있다.

[0109] [화학식 3-1-1] [화학식 3-1-2]

[0110]

[0111] 화학식 3-1-1 및 3-1-2에서, X_2 는 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

[0112] 화학식 3에서, X_2 는 O 또는 S일 수 있다. 화학식 3에서, X_2 는 CR_8R_9 이고, R_8 및 R_9 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기일 수 있다.

[0113] 전술한 바와 같이, 화학식 3에서, R_5 내지 R_7 은 인접하는 기와 서로 결합하여 탄화수소 고리 또는 헤테로 고리를 형성할 수도 있다. 예를 들어, 화학식 3은 하기 화학식 3-2로 표시될 수 있다.

[0114] [화학식 3-2]

[0115]

[0116] 화학식 3-2에서, X_2 는 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고, Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 O, S 또는 $CR_{26}R_{27}$ 이며, R_{26} 및 R_{27} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 5 이하의 알킬기이다. 예를 들어, R_{26} 및 R_{27} 은 각각 치환 또는 비치환된 메틸기일 수 있다.

[0117] 화학식 3-2에서, Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 $CR_{26}R_{27}$ 일 수 있다.

[0118] 화학식 3-2는 보다 구체적으로 하기 화학식 3-2-1 내지 3-2-5 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0119] [화학식 3-2-1] [화학식 3-2-2] [화학식 3-2-3]

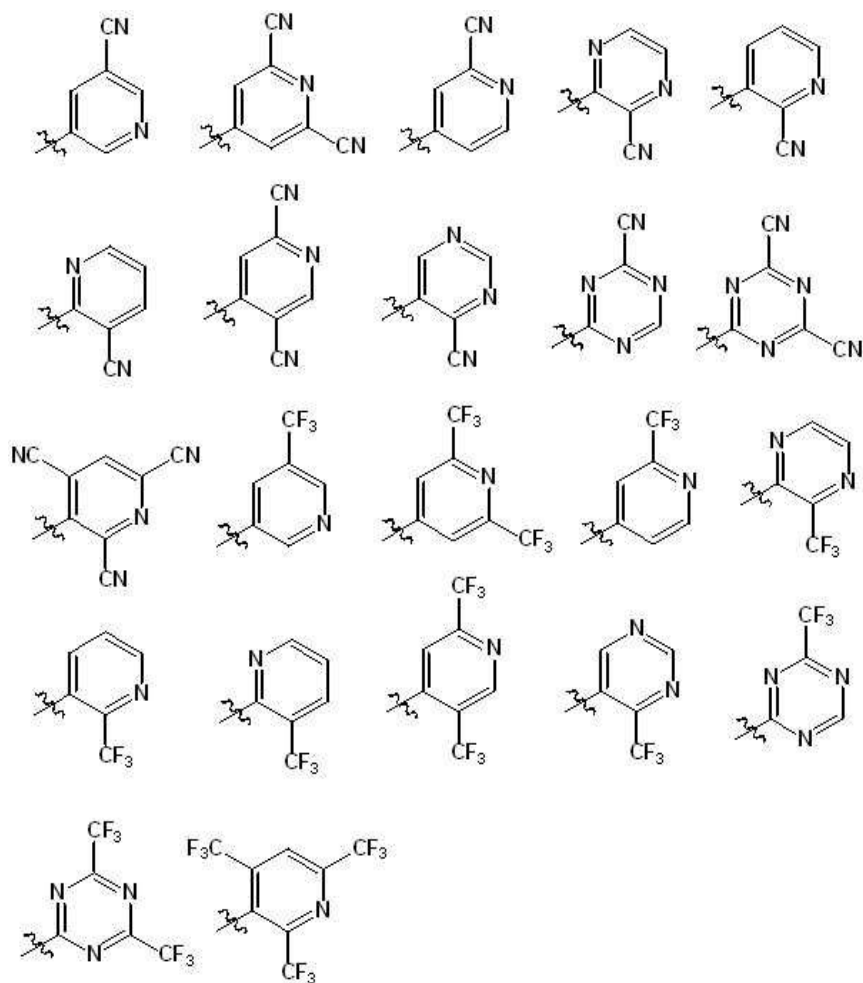
[0120]

[0121] [화학식 3-2-4] [화학식 3-2-5]

[0122]

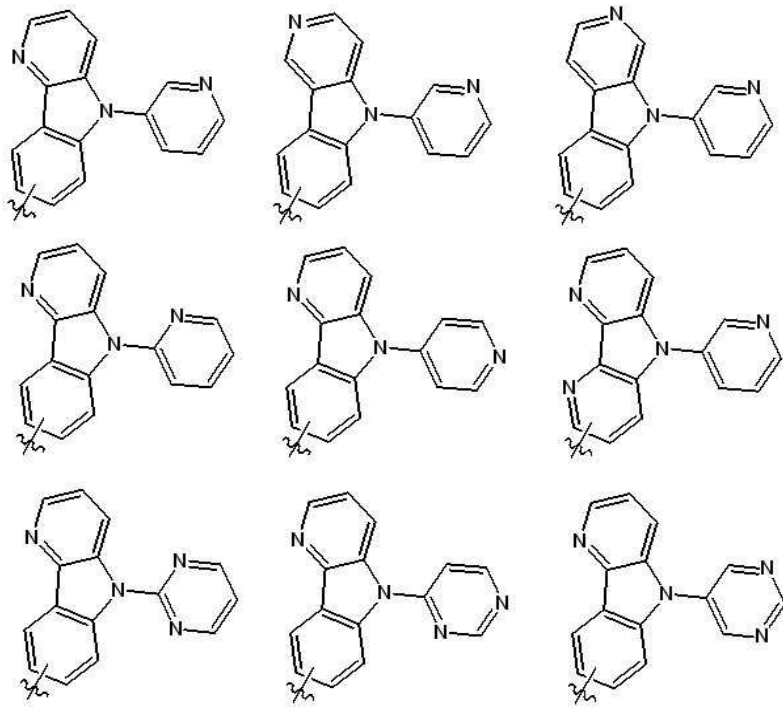
[0123] 화학식 4에서, i는 0일 수 있다.

[0124] 화학식 4는 예를 들어, 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

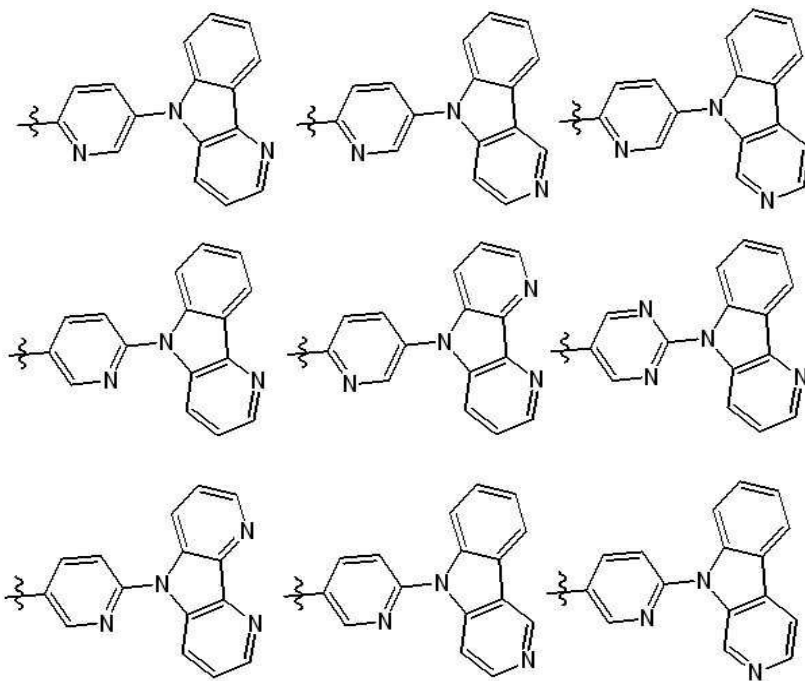


[0125]

[0126] 화학식 7은 예를 들어, 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

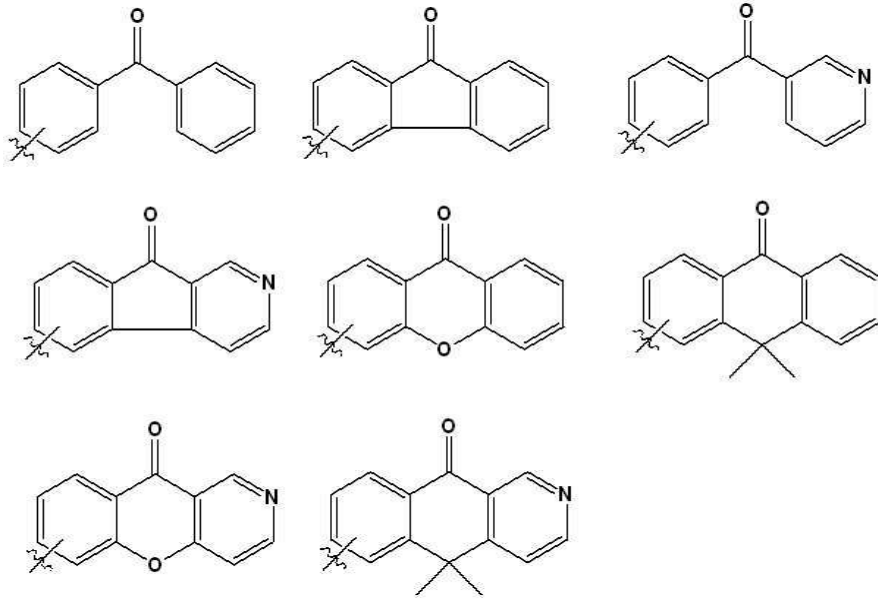


[0127]



[0128]

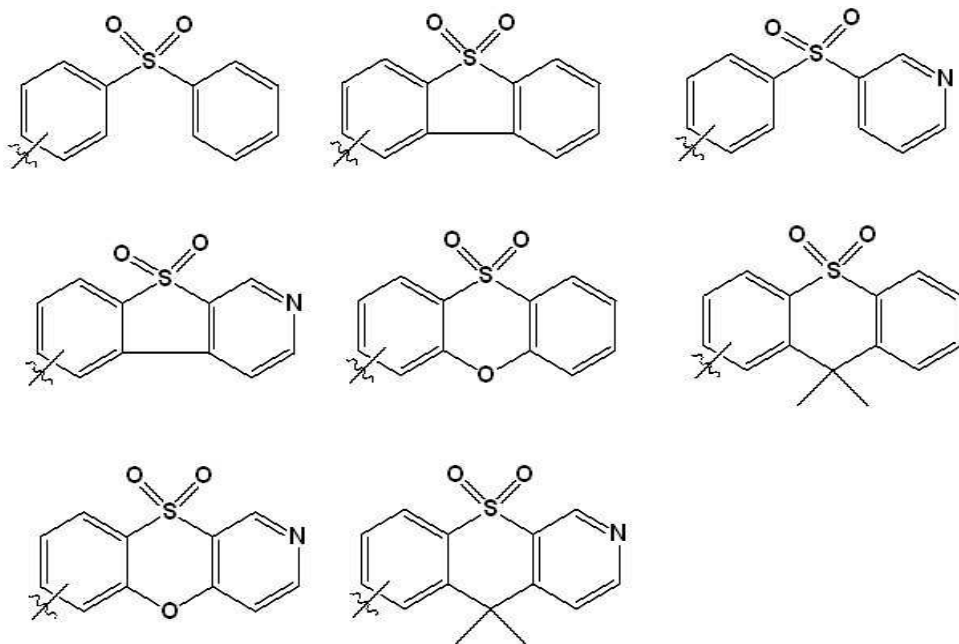
[0129] 화학식 8은 예를 들어, 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.



[0130]

[0131]

화학식 9는 예를 들어, 하기 화학식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

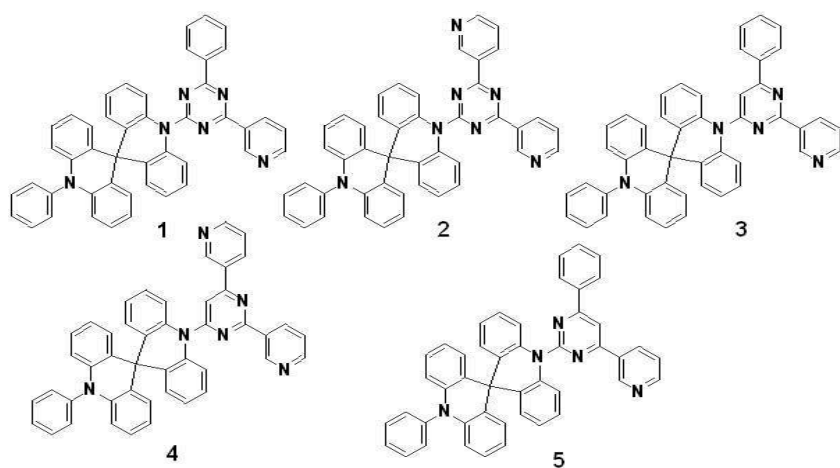


[0132]

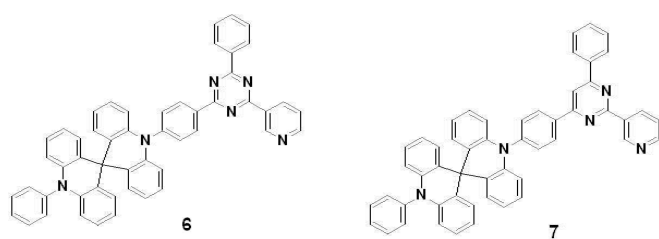
[0133]

화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

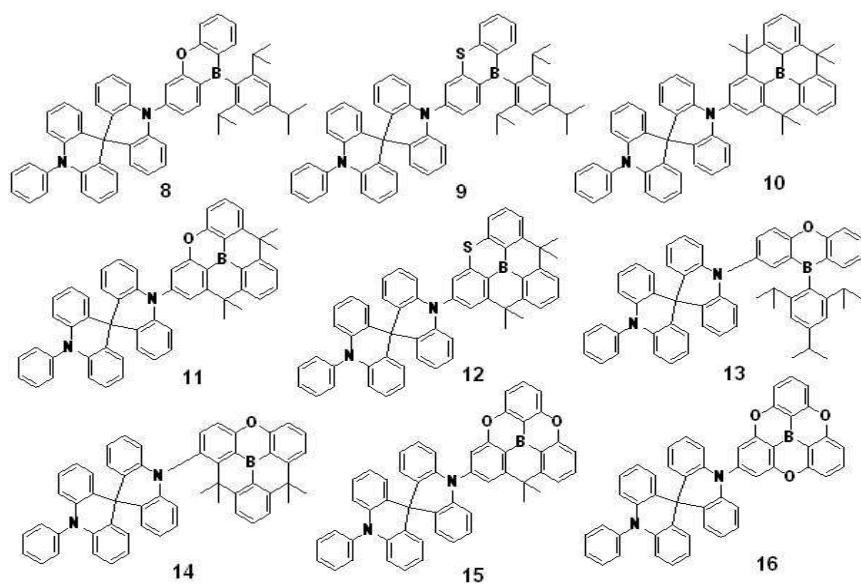
[0134] [화합물군 1]



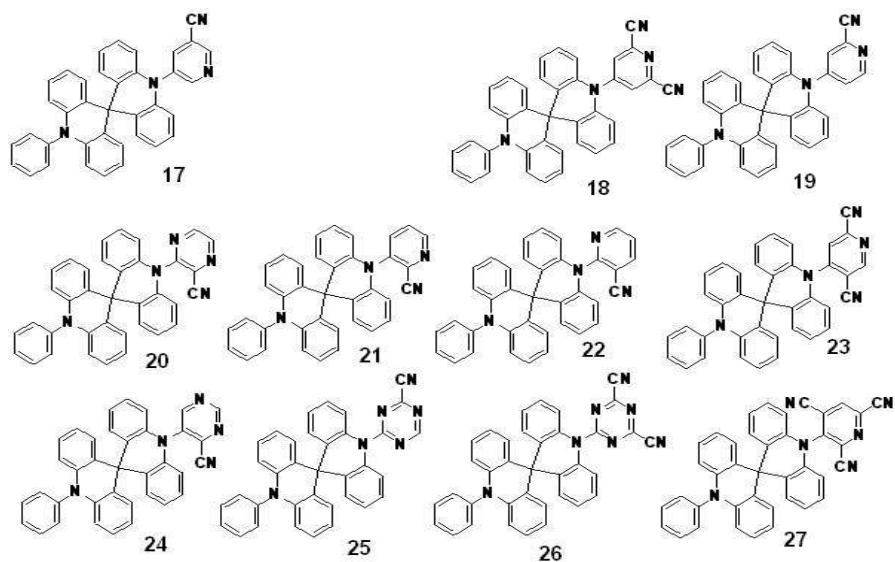
[0135]



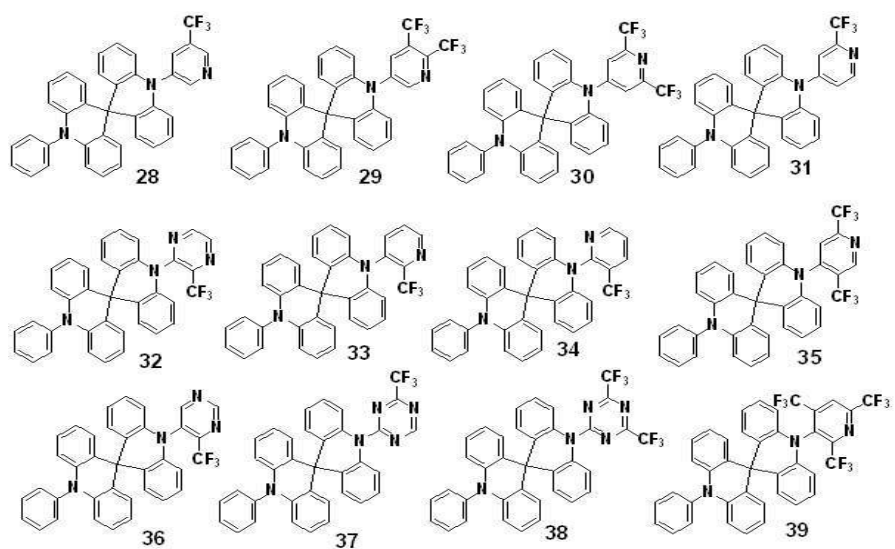
[0136]



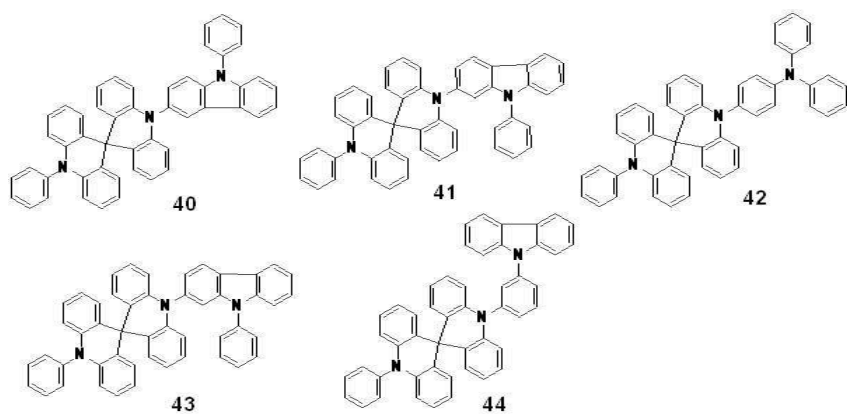
[0137]



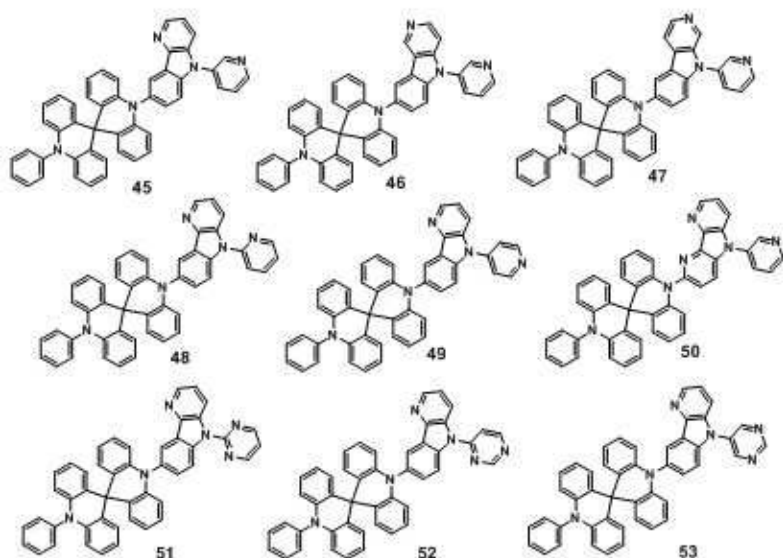
[0138]



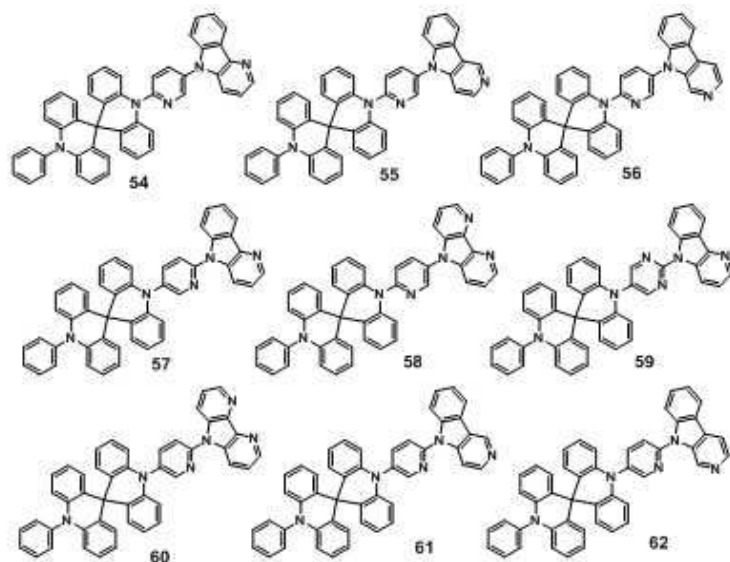
[0139]



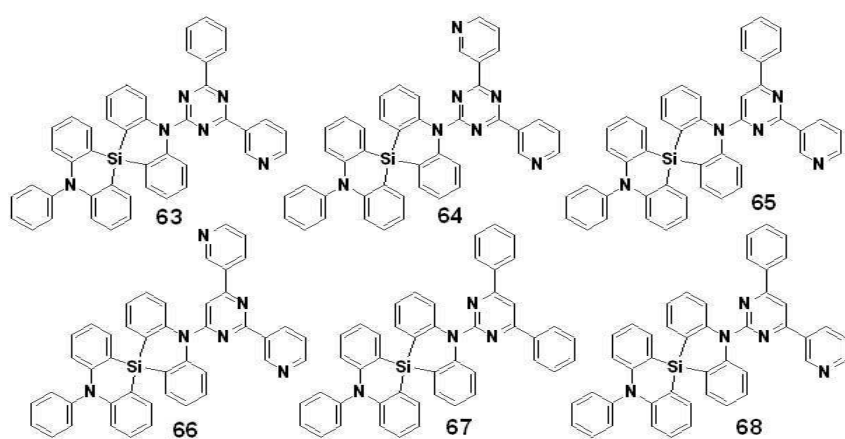
[0140]



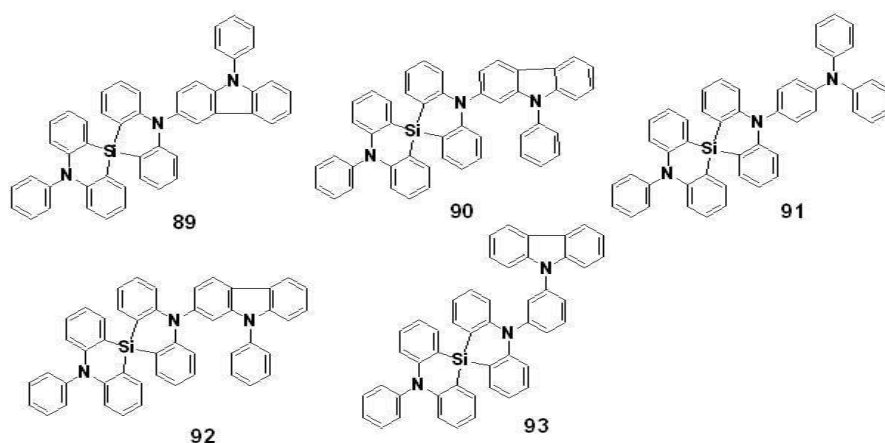
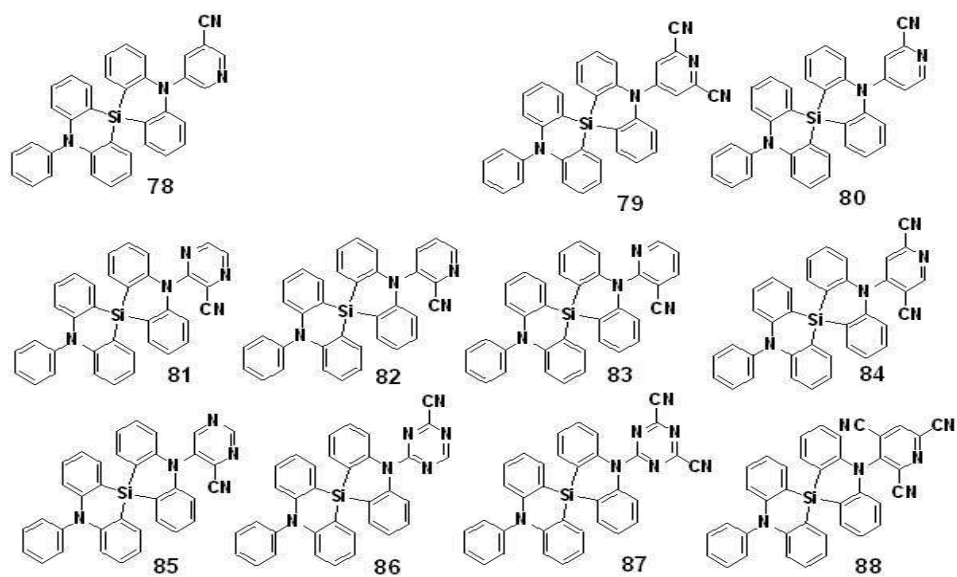
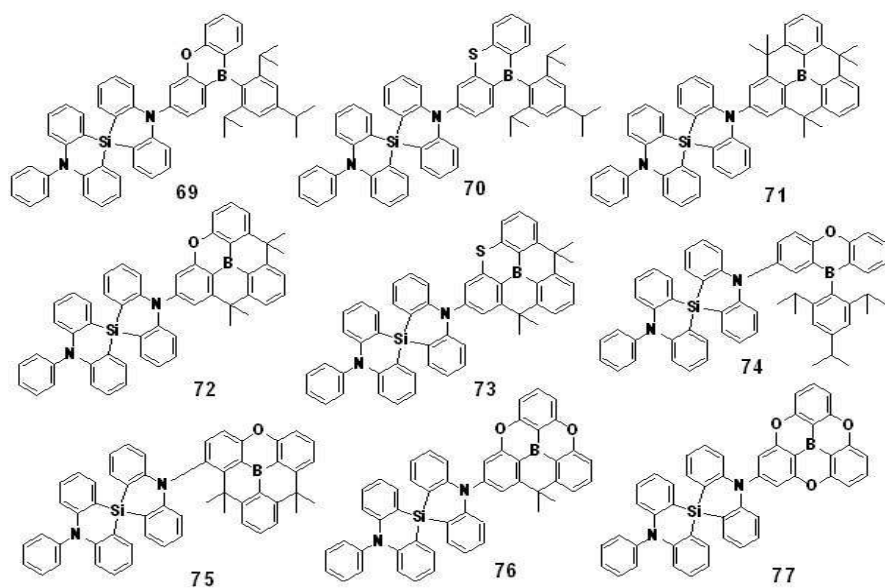
[0141]

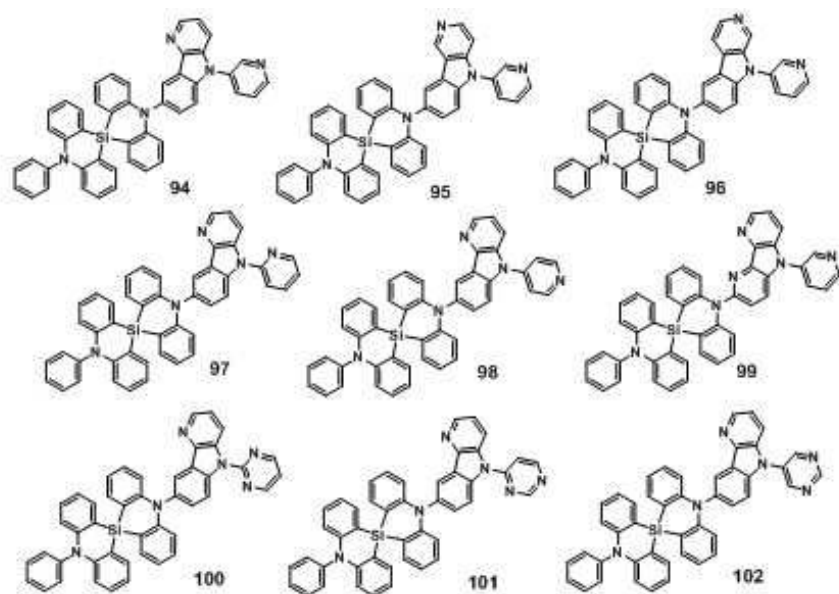


[0142]

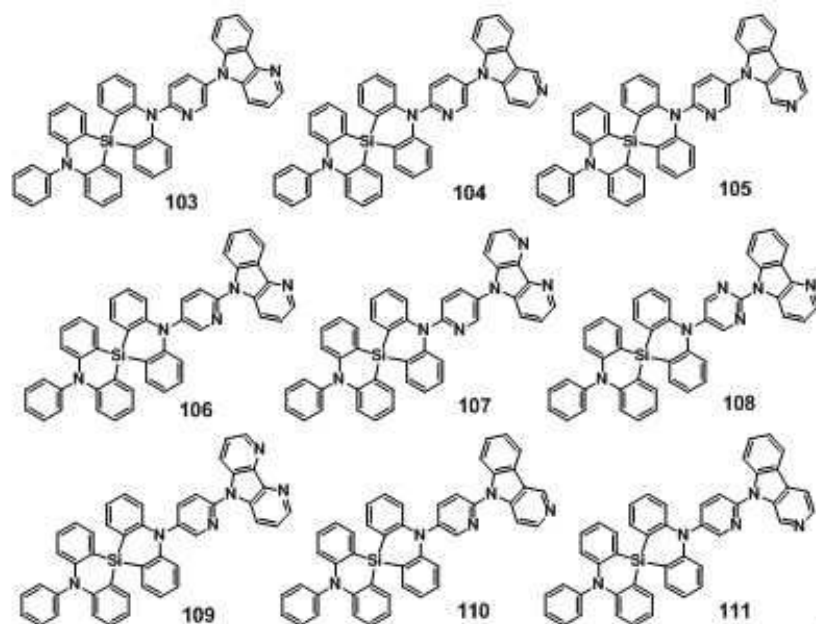


[0143]

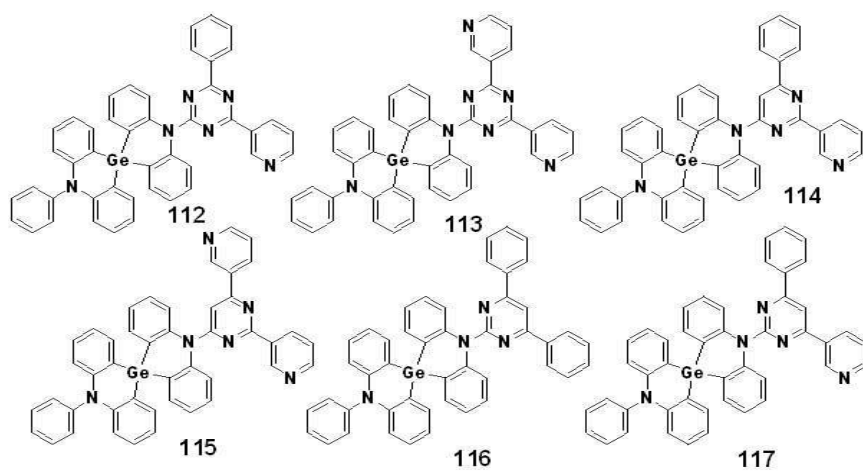




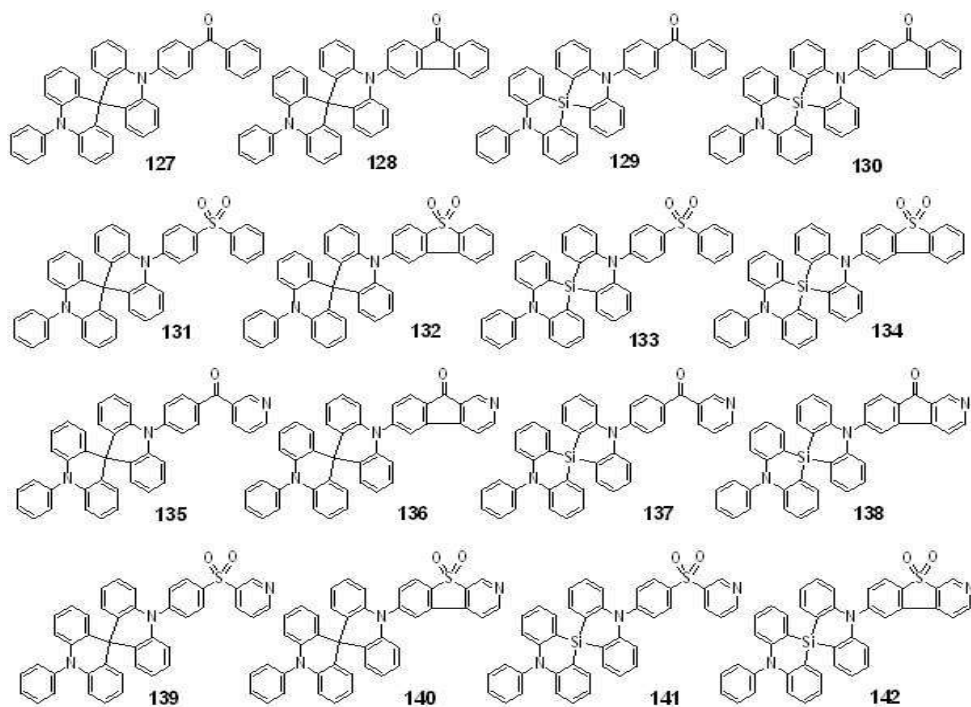
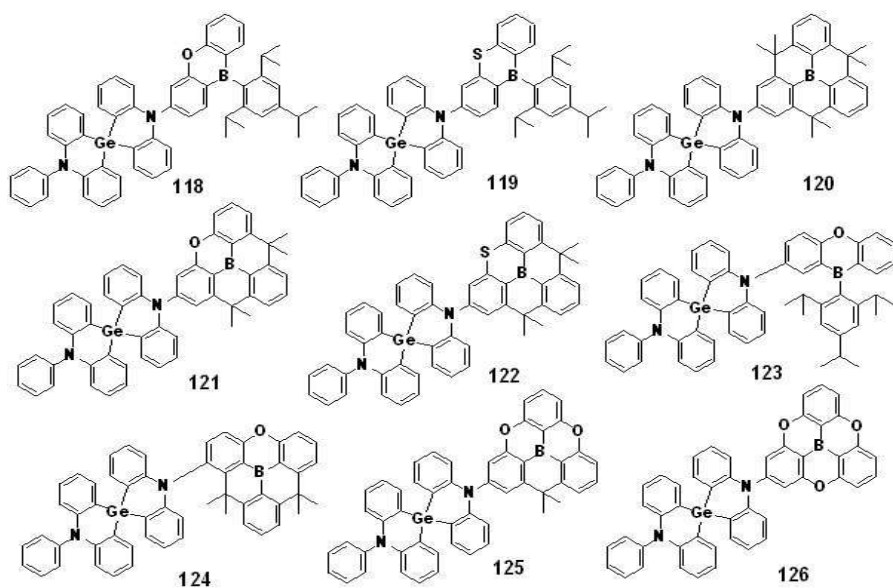
[0147]

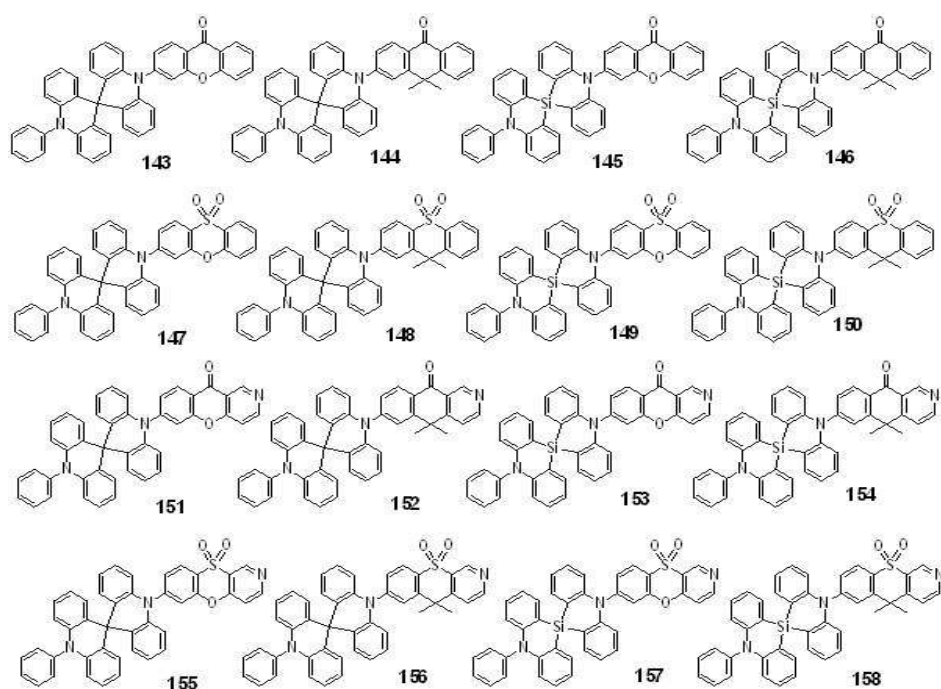


[0148]

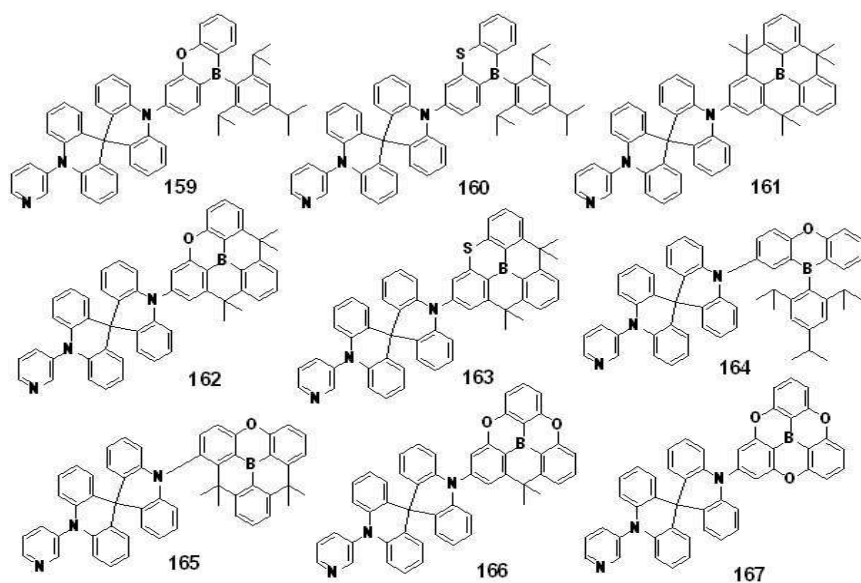


[0149]

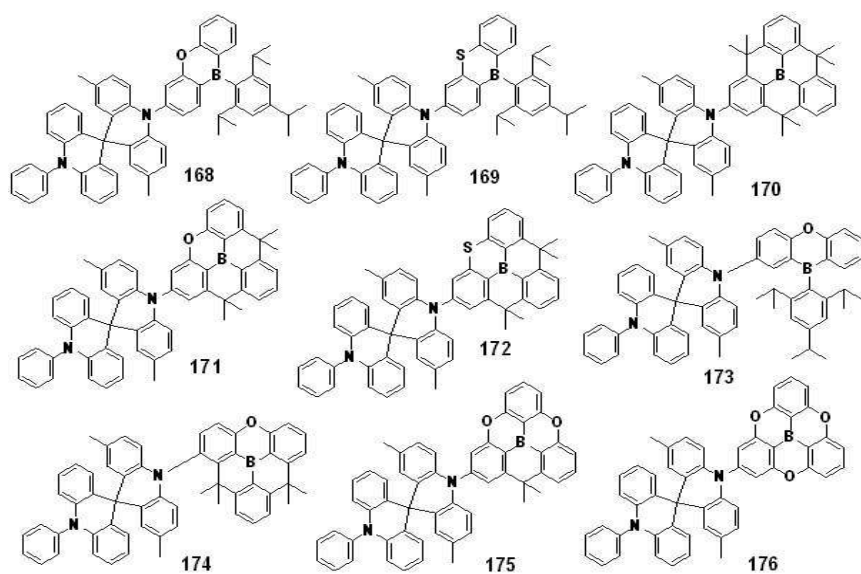




[0152]



[0153]



[0154]

- [0155] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 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 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자용 재료로 적용되어 효율 향상에 기여할 수 있다.
- [0156] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 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 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자용 재료로 적용되어 효율 향상에 기여할 수 있다.
- [0157] 다시 도 1 내지 도 3을 참조하여 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.
- [0158] 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함한다. 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물 외에 공지의 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0159] 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 도펀트가 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 열 활성화 지연 형광용 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 470nm 미만의 파장 영역을 갖는 청색광 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있으며, 예를 들어, 440nm 내지 약 470nm 또는 약 450nm 내지 약 470nm의 파장 영역을 갖는 심청색(deep blue) 광 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있다.
- [0160] 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.
- [0161] 예를 들어, 발광층(EML)은 도펀트로 TPD(N,N,N',N'-tetraphenyl-pyrene-1,6-diamine), BCzVBi(4,4'-Bis(2-(9-ethyl-9H-carbazol-3-yl)vinyl)-1,1'-biphenyl; 4,4'-Bis(9-ethyl-3-carbazovinylen)-1,1'-biphenyl), ACRSA(10-phenyl-10H, 10' H-spiro[acridine-9,9' -anthracene]-10' -one), 4CzPN(3,4,5,6-Tetra-9H-carbazol-9-yl-1,2-benzenedicarbonitrile), 4CzIPN(2,4,5,6-Tetra-9H-carbazol-9-yl-isophthalonitrile), DMAC-DPS(Bis[4-9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine]phenyl)sulfone), 및 PSZ-TRZ(2-phenoxazine-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 또한, 발광층(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.
- [0162] 발광층(EML)은 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다. 발광층(EML)은 480nm 이하 또는 470nm의 파장 영역의 광을 발광하는 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.
- [0163] 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.
- [0164] 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.
- [0165] 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.

[0166] 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.

[0167] 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, $\text{Alq}_3(\text{Tris}(8\text{-hydroxyquinolinato})\text{aluminum})$, 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-yl)phenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), 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 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0168] 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.

[0169] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층(HBL)을 포함할 수 있다. 정공 저지층(HBL)은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 및 Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0170] 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.

[0171] 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.

[0172] 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.

[0173] 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 여

기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.

[0174] 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.

[0175] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 전술한 다환 화합물을 발광층(EML) 재료로 사용하여, 효율이 향상될 수 있다.

[0176] 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.

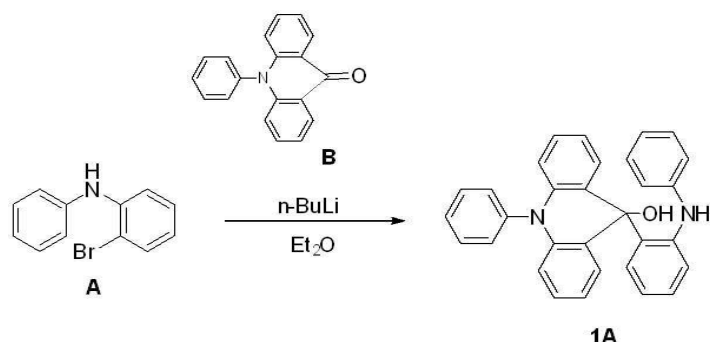
[0177] (합성예)

[0178] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0179] 1. 화합물 8의 합성

[0180] 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물 8은 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다.

[0181] (중간체 1A의 합성)

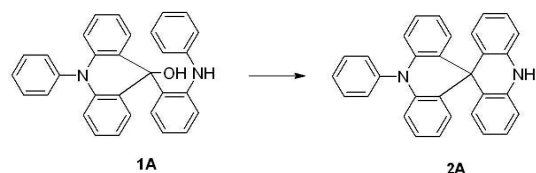


[0182]

[0183] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200mL의 3구 플라스크에 화합물 A 2.0g, 탈수 diethyl ether 30mL를 더하여, 실온에서 1.6M의 n-BuLi를 10mL 적하시킨 후, 실온에서 2시간 교반시켰다. 그 후, 20mL의 탈수 diethyl ether에 녹인 화합물 B를 적하시켜, 그 후철야 교반을 시행했다. 반응 종료 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피(toluene사용)로 정제를 시행, 백색 고체의 중간체 1A를 2.20g(수율 62%) 얻었다.

[0184] FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 1A의 분자량은 440이었다.

[0185] (중간체 2A의 합성)

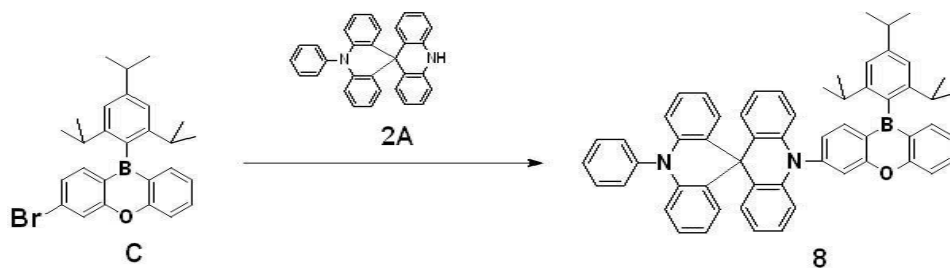


[0186]

[0187] 아르곤(Ar) 분위기 하, 100mL의 3구 플라스크에 화합물 1A 2.0g, toluene 20mL를 더하여, 거기에 Methylsulfonic Acid를 0.73g, polyphosphoric acid를 1.0g 더하여, 4시간 가열 환류 교반을 시행했다. 반응종료 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피(toluene사용)로 정제를 시행, 백색 고체의 중간체 2A를 1.9g(수율 95%) 얻었다.

[0188] FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 2A의 분자량은 422이었다.

[0189] (최종 화합물 8의 합성)



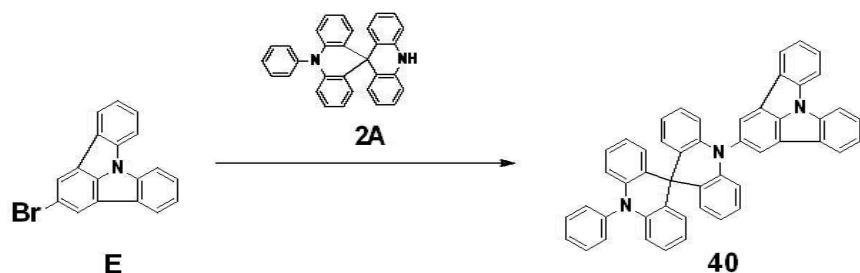
[0190]

[0191] 아르곤(Ar) 분위기 하, 100mL의 3구 플라스크에 화합물 C 1.0g, 중간체 2A를 0.95g, Sodium tert-Butoxide를 0.43g, Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0)을 0.04g, Tri-tert-butylphosphonium tetrafluoroborate를 0.05g, toluene 20mL를 더하여 8시간 가열 환류 교반을 시행했다. 반응종료 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피(toluene, hexane 혼합 용매 사용)로 정제를 시행, 백색 고체의 화합물 8을 1.7g(수율 94%) 얻었다.

[0192] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 8의 분자량은 802이었다.

[0194] 2. 화합물 40의 합성

[0195] 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물 40은 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다.

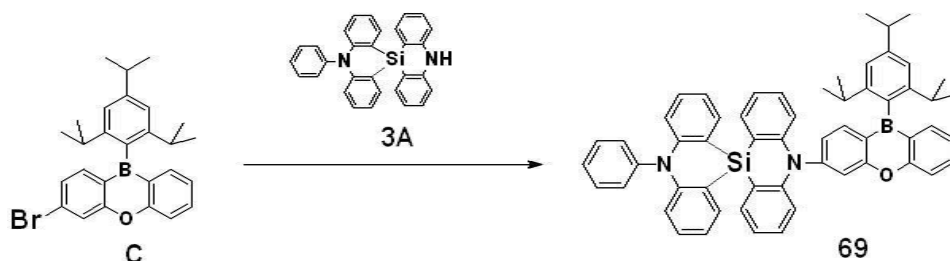


[0196]

[0197] 화합물 8의 합성에서, 화합물 C 대신에 화합물 E를 사용한 것 외에는 동일하게 시행하여 화합물 40을 수율 81%로 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 40의 분자량은 661이었다.

[0199] 3. 화합물 69의 합성

[0200] 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물 69는 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다.

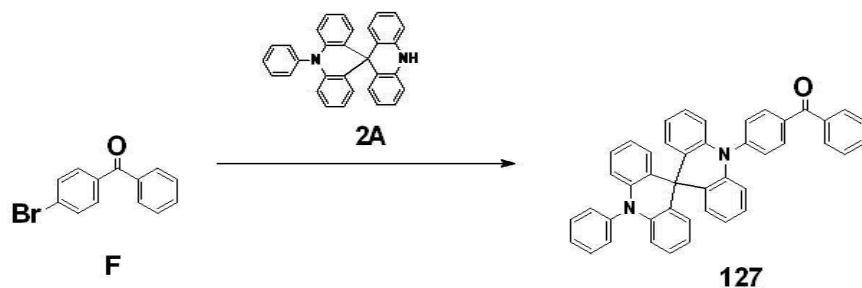


[0201]

[0202] 화합물 8의 합성에서, 중간체 2A 대신에 중간체 3A를 사용한 것 외에는 동일하게 시행하여 화합물 69를 수율 89%로 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 69의 분자량은 818이었다.

[0204] 4. 화합물 127의 합성

[0205] 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물 127은 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다.

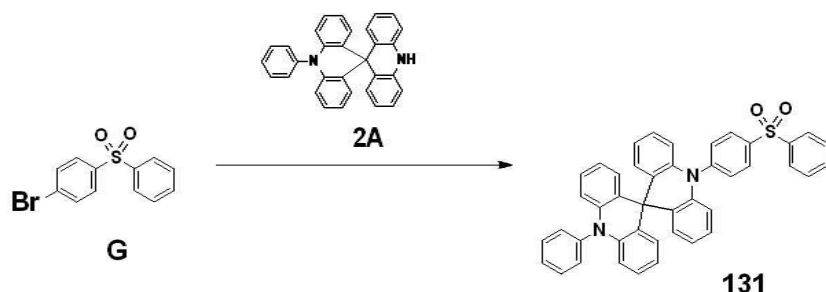


[0206]

[0207] 화합물 8의 합성에서, 화합물 C 대신에 화합물 F를 사용한 것 외에는 동일하게 시행하여 화합물 127을 수율 86%로 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 127의 분자량은 602였다.

[0209] 5. 화합물 131의 합성

[0210] 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물 131은 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다.



[0211]

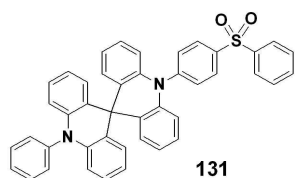
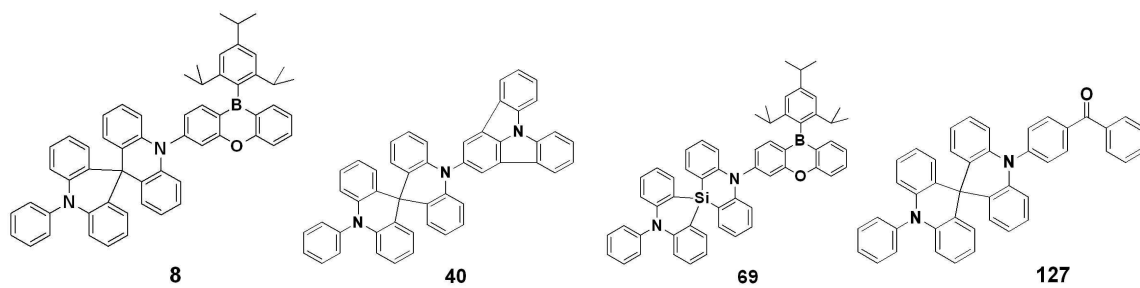
[0212] 화합물 8의 합성에서, 화합물 C 대신에 화합물 G를 사용한 것 외에는 동일하게 시행하여 화합물 131을 수율 91%로 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 131의 분자량은 638였다.

[0214] 전술한 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. 화학식 1로 표시되는 코어 구조에 다양한 치환체를 도입함으로써 유기 전계 발광 소자에 사용되기에 적합한 특성을 가질 수 있다.

[0216] (소자 작성예)

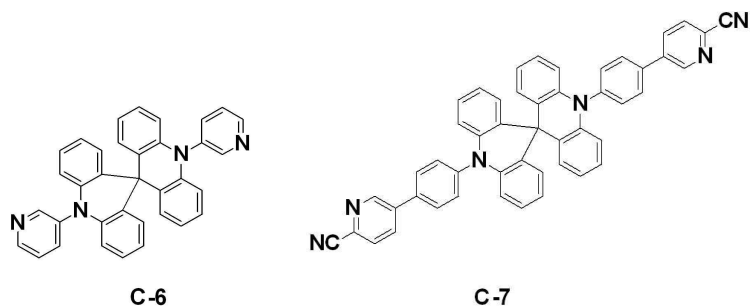
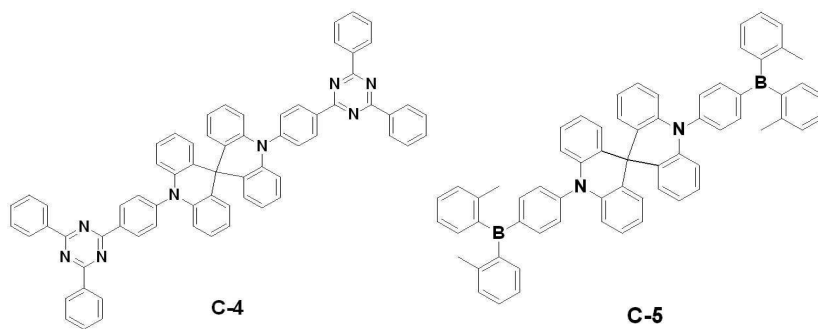
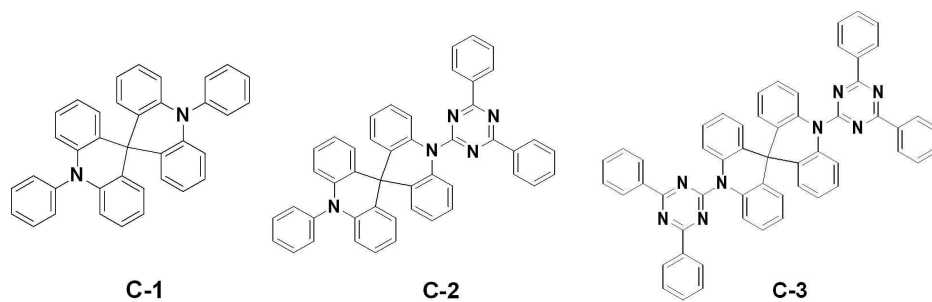
[0217] 상술한 화합물 8, 40, 69, 127 및 131을 발광층 도펀트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 5의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

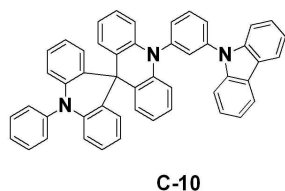
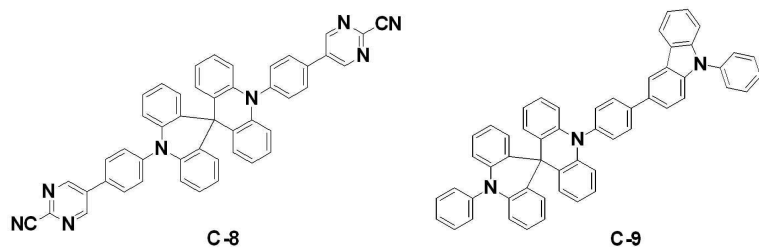
[0218] [실시예 화합물]



하기 화합물 C-1 내지 C-10을 발광층 도펀트 재료로 사용하여 비교예 1 내지 10의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[비교예 화합물]





실시에 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}
실시에 화합물 8	2.56	2.55	0.01
실시에 화합물 40	2.75	2.72	0.03
실시에 화합물 69	2.72	2.71	0.01
실시에 화합물 127	2.52	2.52	0.00
실시에 화합물 131	2.86	2.85	0.01
비교예 화합물 C-1	3.67	3.15	0.52
비교예 화합물 C-2	2.96	2.96	0.00
비교예 화합물 C-3	3.48	3.15	0.33
비교예 화합물 C-4	2.41	2.41	0.00
비교예 화합물 C-5	2.46	2.46	0.00
비교예 화합물 C-6	3.30	3.13	0.17
비교예 화합물 C-7	2.54	2.53	0.01
비교예 화합물 C-8	2.36	2.35	0.01
비교예 화합물 C-9	3.38	3.06	0.32
비교예 화합물 C-10	3.49	3.14	0.35

상기 표 1의 결과를 참조하면, 실시에 화합물 8, 40, 69, 127 및 131, 비교예 화합물 C-2, C-4 내지 C-9은 낮은 ΔE_{ST} 값을 나타내고 있어 열 활성 지연 형광을 발현한다고 생각할 수 있다. 한편, 비교예 화합물 C-1, C-3, C-9 및 C-10은 높은 ΔE_{ST} 값을 나타내고 있어 열 활성 지연 형광을 발현하지 않는다고 생각된다. 실시예 1 내지 5 및 비교예 1 내지 10의 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 실시에 화합물 또는 비교예 화합물을 20% 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.

실시에 1 내지 5 및 비교예 1 내지 10에 따른 유기 전계 발광 소자의 최대 발광 파장 및 외부 양자 효율을 측정하여, 하기 표 2에 나타내었다. 표 2의 EQE는 10 mA/cm²에서의 값이다.

표 2

	발광층 도펀트 재료	λ_{max} (nm)	EQE (%)
실시에 1	실시에 화합물 8	468	23.8
실시에 2	실시에 화합물 40	461	19.9

실시예 3	실시예 화합물 69	459	22.5
실시예 4	실시예 화합물 127	469	21.8
실시예 5	실시예 화합물 131	459	20.5
비교예 1	비교예 화합물 C-1	413	1.2
비교예 2	비교예 화합물 C-2	489	3.2
비교예 3	비교예 화합물 C-3	496	2.8
비교예 4	비교예 화합물 C-4	501	17.5
비교예 5	비교예 화합물 C-5	498	15.1
비교예 6	비교예 화합물 C-6	420	2.1
비교예 7	비교예 화합물 C-7	470	5.5
비교예 8	비교예 화합물 C-8	512	8.2
비교예 9	비교예 화합물 C-9	415	1.1
비교예 10	비교예 화합물 C-10	412	1.3

[0232] 상기 표 2의 결과를 참조하면, 실시예 화합물 8, 40, 69, 127 및 131은 모두 발광 파장이 470nm 미만 이하의 심청색 도펀트로써 적합한 발광 파장을 지니며, 또 열 활성화 지연 형광에 의한 고효율을 실현했다. 비교예 1, 6, 9, 10은 발광 효율이 상당히 낮으며, 발광 파장도 단파장이다. 비교예 4, 5, 8은 비교적 높은 효율을 띄고 있지만, 장파장화 하고 있어 심청색 발광을 구현하지 못하고 있다. 비교예 7은 심청색에 가까운 파장을 나타내고 있지만 효율이 실시예에 비교하여 낮다. 비교예 2는 심청색을 띄지 않으며, 또한 높은 효율도 띄지 않는 결과가 되었다. 비교예 2는 계산치의 E_{ST} 가 작음에도 불구하고 열 활성화 지연 형광을 발현하고있지 않을 가능성이 있다. 비교예 3은 효율이 낮으며, 또한 장파장화로 심청색은 아니다.

[0233] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 심청색 발광용 열 활성화 지연 형광 도펀트로 활용 가능하다.

[0234] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 심청색을 구현함과 동시에 효율이 우수하다.

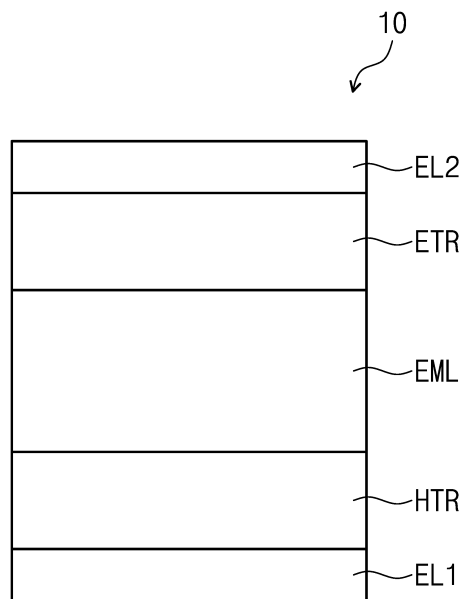
[0235] 이상, 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

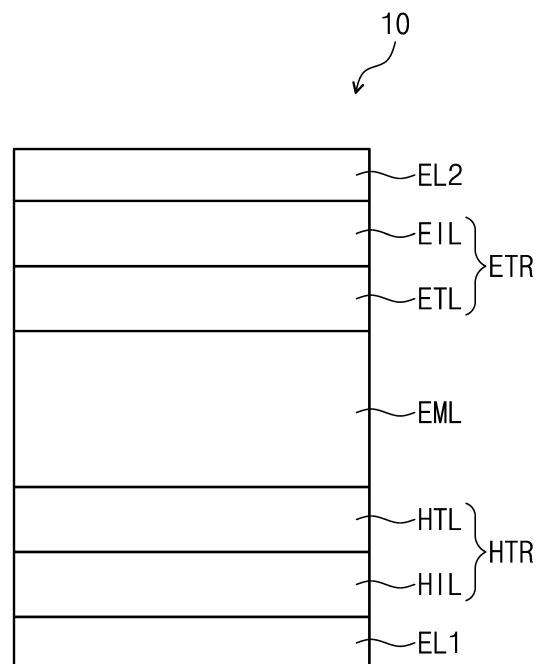
[0236] 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극
HTR: 정공 수송 영역 HIL: 정공 주입층
HTL: 정공 수송층 EML: 발광층
ETR: 전자 수송 영역 ETL: 전자 수송층
EIL: 전자 주입층 EL2: 제2 전극

도면

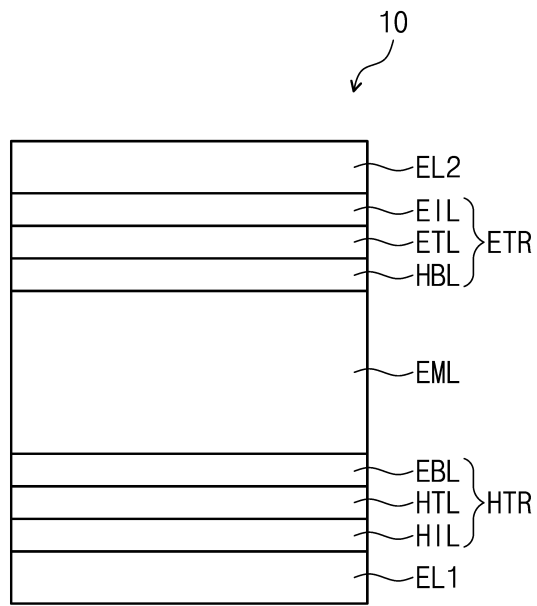
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	用于有机电致发光器件的多环化合物和有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020190117038A	公开(公告)日	2019-10-16
申请号	KR1020180039925	申请日	2018-04-05
[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	아카시, 노부타카 스자키, 유지		
IPC分类号	C09K11/06 C07D471/04 C07D471/10 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D471/04 C07D471/10 H01L51/5012 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C07D519/00 C07F5/027 C07F7/10 C07F7/30 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1029 C09K2211/104 C09K2211/1092 C09K2211/1096 H01L51/0052 H01L51/0067 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/0074 H01L51/0094 H01L51/50 H01L51/5056 H01L51/506 C07F7/0816 H05B33/14 C07F7/081 C09K2211/1018 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；以及第二电极。设置在第一电极上的空穴传输区；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；设置在电子传输区域上的第二电极，其中发光层包括由化学式1表示的多环化合物。在化学式1中，X₁为C，Si或Ge，并且AC为电子接受基团。

