



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0068791
(43) 공개일자 2020년06월16일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

H01L 51/00 (2006.01) C07D 245/04 (2006.01)
C07D 285/00 (2006.01) C07D 403/14 (2006.01)
C07D 417/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

H01L 51/0071 (2013.01)
C07D 245/04 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0155173

(22) 출원일자 2018년12월05일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

이정섭

경기도 화성시 동탄순환대로20길 31 (목동, e편한세상 동탄) 2113동 503호

정혜인

경기도 수원시 권선구 권선로694번길 26 (권선동, 권선SKVIEW) 105동 1203호

박혜정

서울특별시 강서구 양천로63길 51 (염창동, 염창동강변월드메르디앙아파트) 101-401

(74) 대리인

특허법인 고려

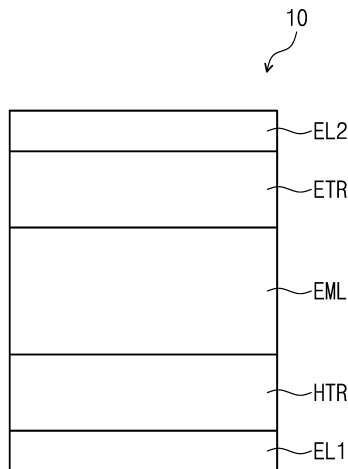
전체 청구항 수 : 총 21 항

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

(57) 요약

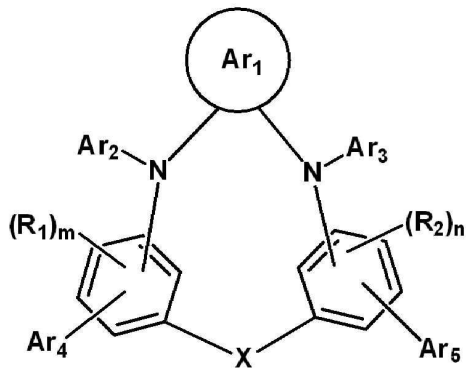
일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극, 정공 수송 영역, 발광층, 전자 수송 영역 및 제2 전극을 (뒷면에 계속)

대표도 - 도1



포함하고, 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하여 개선된 발광 효율을 나타낼 수 있다.

[화학식 1]



(52) CPC특허분류

C07D 285/00 (2013.01)

C07D 403/14 (2013.01)

C07D 417/14 (2013.01)

C07D 495/04 (2013.01)

C09K 11/06 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

제1 전극;

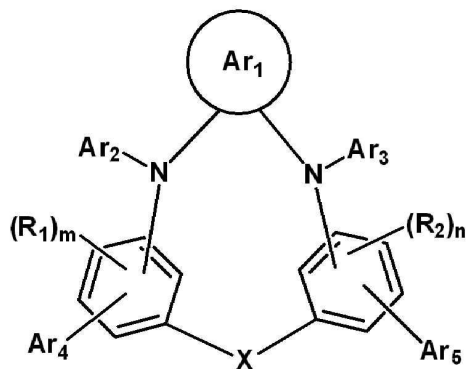
상기 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역;

상기 정공 수송 영역 상에 배치되고, 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 발광층;

상기 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극; 을 포함하는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 S, O, C(=O), NR_a, 또는 BR_b이고,

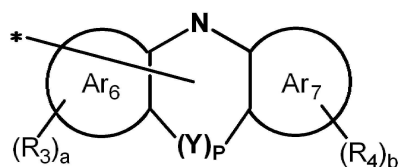
R₁, R₂, R_a, 및 R_b는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

m 및 n은 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수이며,

Ar₁ 내지 Ar₃은 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기이고,

Ar₄ 및 Ar₅는 각각 독립적으로, 하기 화학식 2로 표시된다:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

p는 0 또는 1이고,

p가 1일 때, Y는 직접 결합 또는 CR_cR_d이고,

Ar₆ 및 Ar₇은 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소

원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기이고,

R_3 , R_4 , R_c , 및 R_d 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

청구항 2

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 지연 형광을 방출하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 3

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하는 지연 형광 발광층이고,

상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 4

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 청색광을 방출하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 5

제 1항에 있어서,

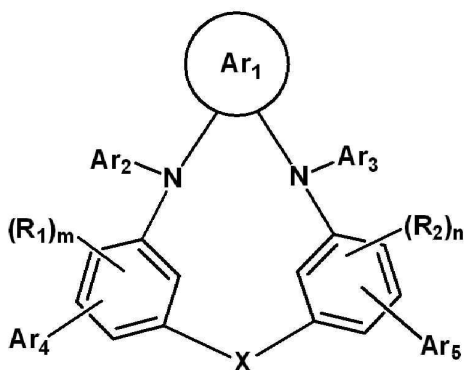
상기 발광층은 잉크젯(inkjet) 방식으로 제공되는 유기 전계 발광 소자.

청구항 6

제 1항에 있어서,

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

[화학식 1-1]



상기 화학식 1-1에서,

X, Ar_1 내지 Ar_5 , R_1 , R_2 , m, 및 n은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 7

제 1항에 있어서,

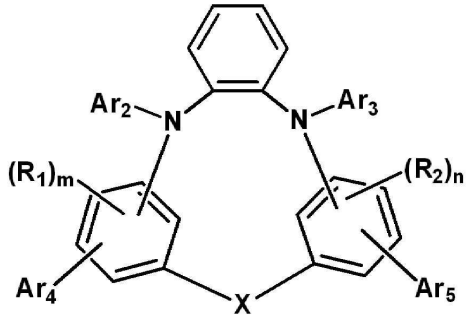
Ar_1 은 치환 또는 비치환된 페닐렌기인 유기 전계 발광 소자.

청구항 8

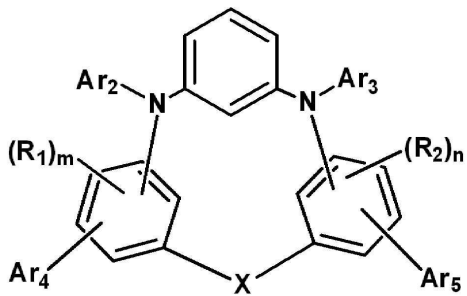
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2A 또는 화학식 1-2B로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-2A]



[화학식 1-2B]



상기 화학식 1-2A 및 화학식 1-2B에서,

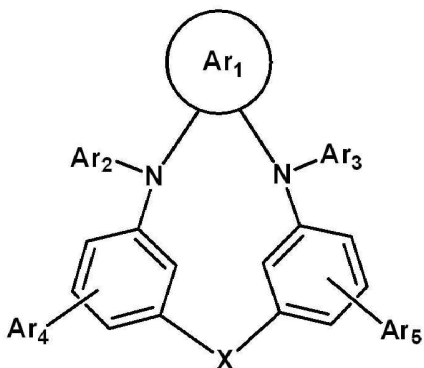
X, Ar₂ 내지 Ar₅, R₁, R₂, m, 및 n은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 9

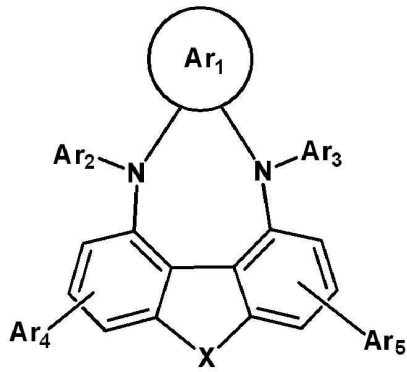
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-3A 또는 화학식 1-3B로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-3A]



[화학식 1-3B]



상기 화학식 1-3A 및 화학식 1-3B에서,

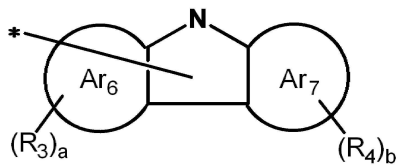
X, 및 Ar₁ 내지 Ar₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 10

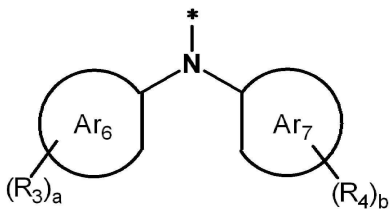
제 1항에 있어서,

상기 화학식 2는 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



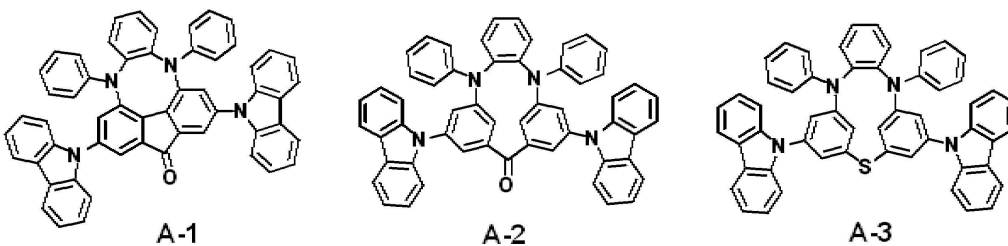
상기 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서,

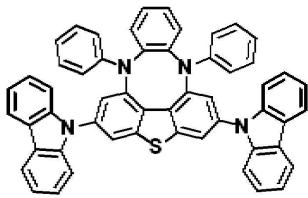
Ar₆, Ar₇, R₃, R₄, a, 및 b는 상기 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 11

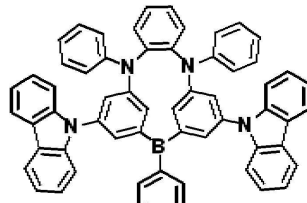
제 1항에 있어서, 상기 발광층은 하기 화합물군 1의 화합물들 중 적어도 하나를 포함하는 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]

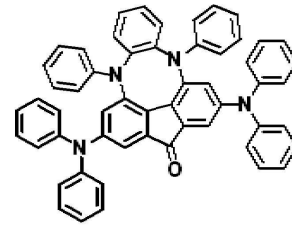




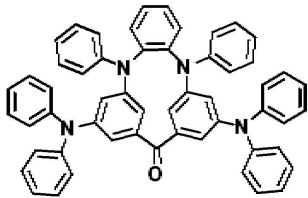
A-4



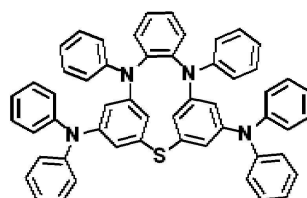
A-5



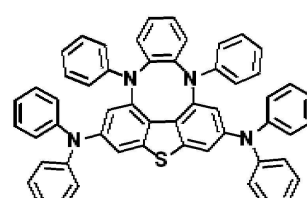
A-6



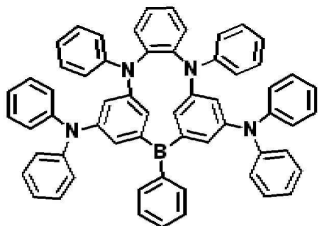
A-7



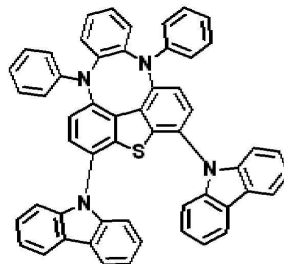
A-8



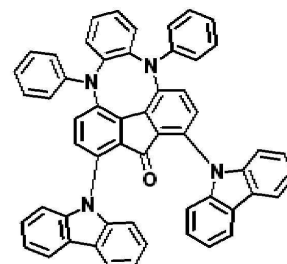
A-9



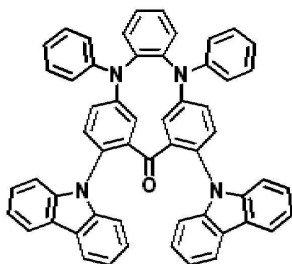
A-10



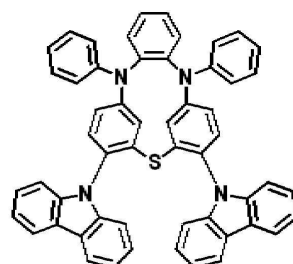
A-11



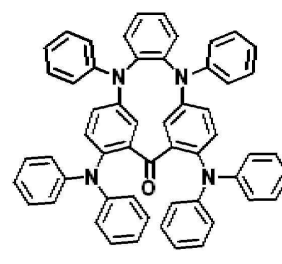
A-12



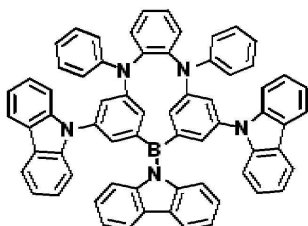
A-13



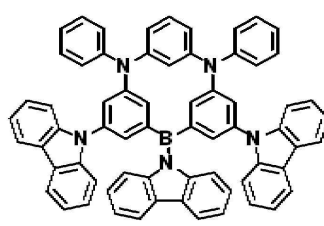
A-14



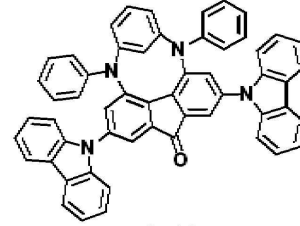
A-15



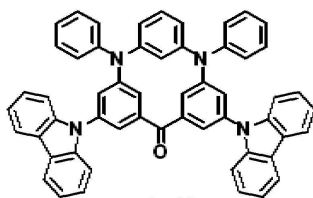
A-16



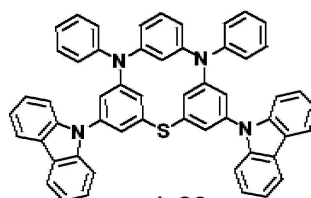
A-17



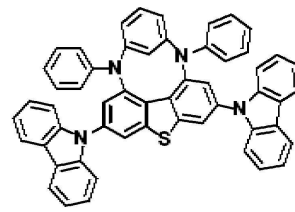
A-18



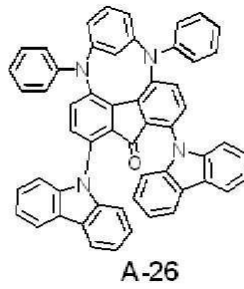
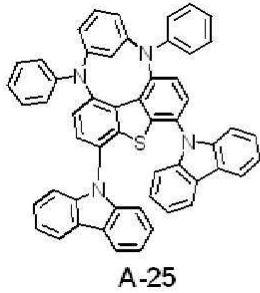
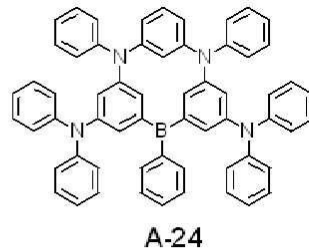
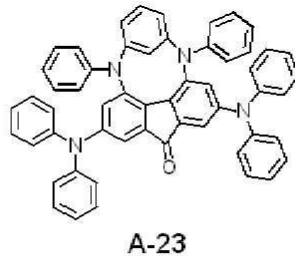
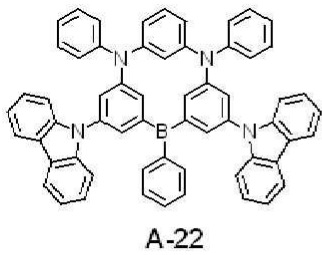
A-19



A-20



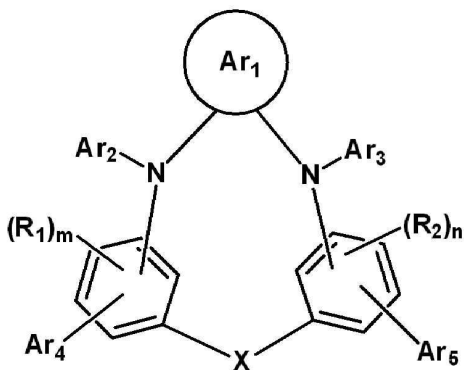
A-21



청구항 12

하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 S, O, C(=O), NR_a, 또는 BR_b이고,

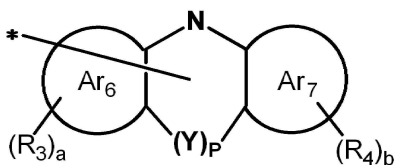
R₁, R₂, R_a, 및 R_b는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

m 및 n은 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수이며,

Ar₁ 내지 Ar₃은 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기이고,

Ar₄ 및 Ar₅는 각각 독립적으로, 하기 화학식 2로 표시된다:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

p는 0 또는 1이고,

p가 1일 때, Y는 직접 결합 또는 CR_cR_d이고,

Ar₆ 및 Ar₇은 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기이고,

R₃, R₄, R_c, 및 R_d는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

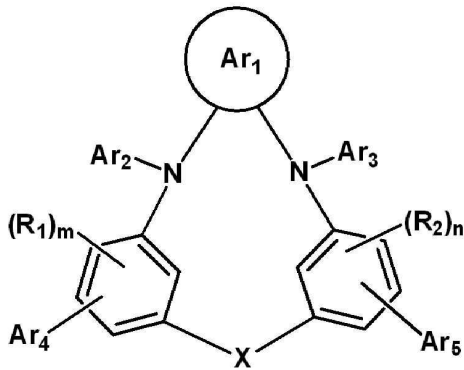
a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

청구항 13

제 12항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 1-1]



상기 화학식 1-1에서,

X, Ar₁ 내지 Ar₅, R₁, R₂, m, 및 n은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 14

제 12항에 있어서,

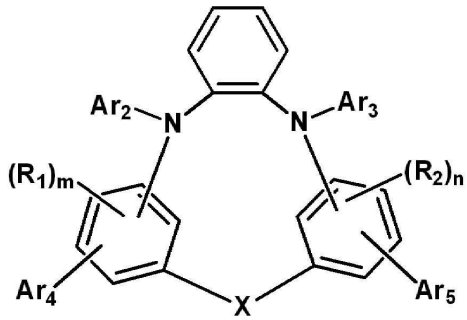
Ar₁은 치환 또는 비치환된 페닐렌기인 다환 화합물.

청구항 15

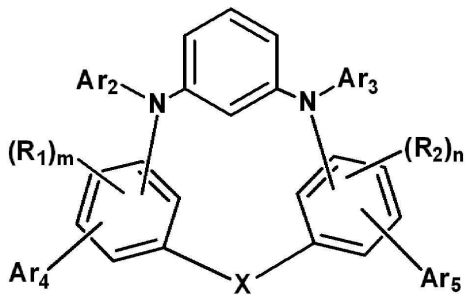
제 12항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2A 또는 화학식 1-2B로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 1-2A]



[화학식 1-2B]



상기 화학식 1-2A 및 화학식 1-2B에서,

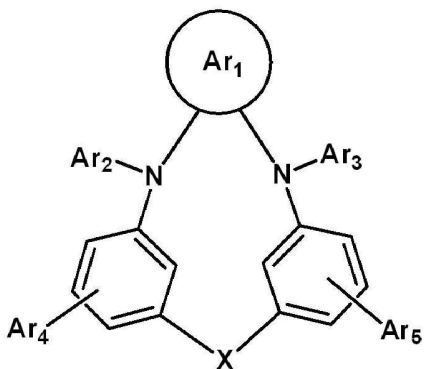
X, Ar₂ 내지 Ar₅, R₁, R₂, m, 및 n은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 16

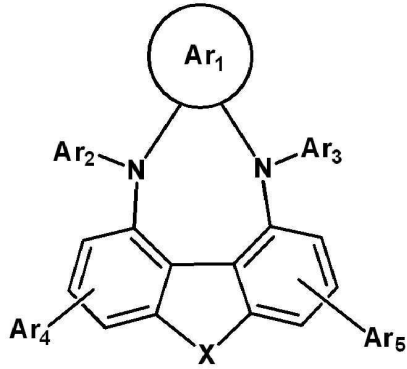
제 12항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-3A 또는 화학식 1-3B로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 1-3A]



[화학식 1-3B]



상기 화학식 1-3A 및 화학식 1-3B에서,

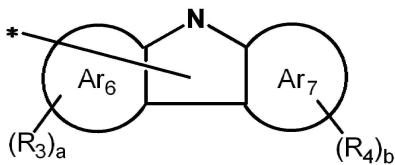
X, 및 Ar₁ 내지 Ar₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 17

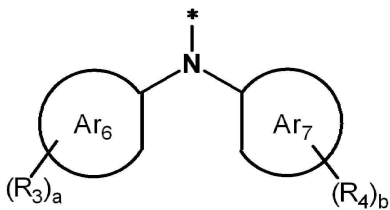
제 12항에 있어서,

상기 화학식 2는 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서,

Ar₆, Ar₇, R₃, R₄, a, 및 b는 상기 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 18

제 12항에 있어서,

Ar₂ 및 Ar₃은 치환 또는 비치환된 페닐기인 다환 화합물.

청구항 19

제 12항에 있어서,

Ar₄ 및 Ar₅는 동일한 다환 화합물.

청구항 20

제 12항에 있어서,

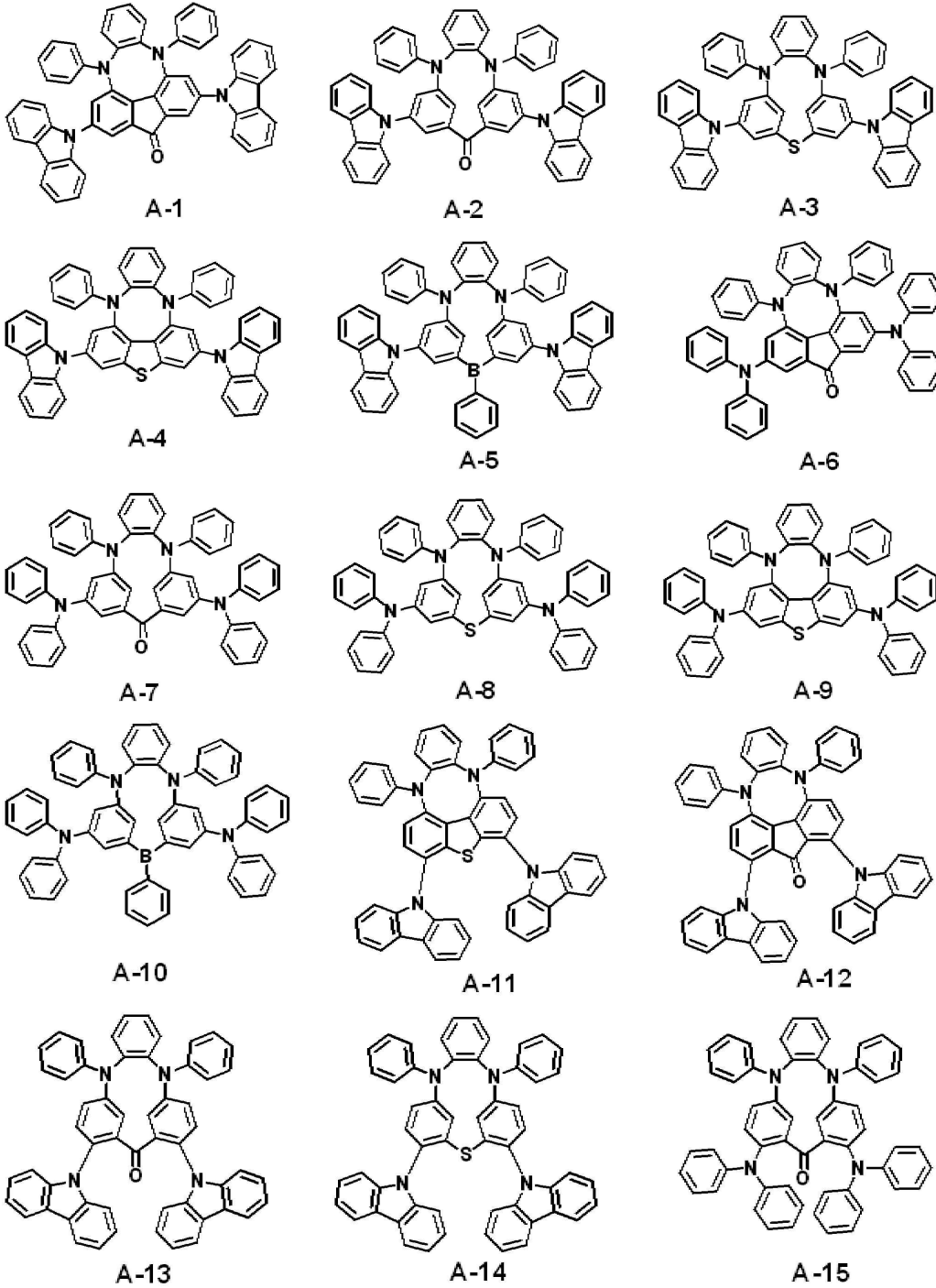
상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 열활성 지연 형광 발광 재료인 다환 화합물.

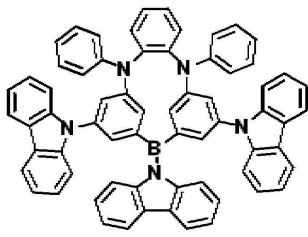
청구항 21

제 12항에 있어서,

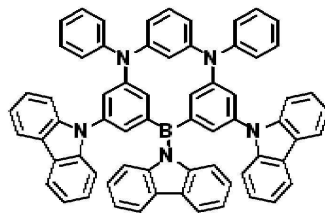
상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나인 다환 화합물:

[화합물군 1]

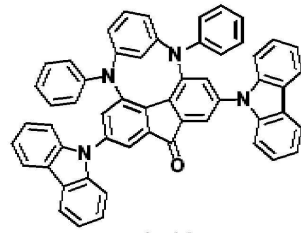




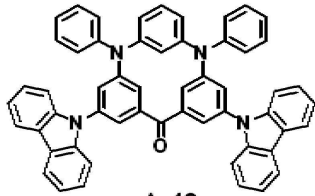
A-16



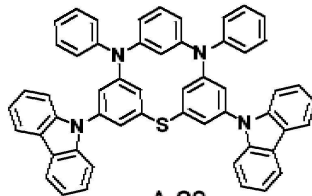
A-17



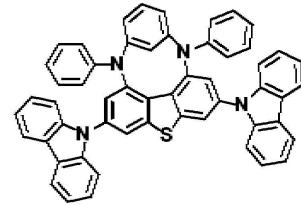
A-18



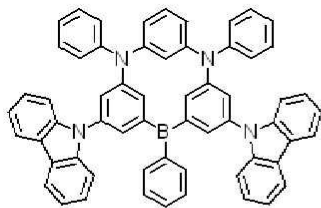
A-19



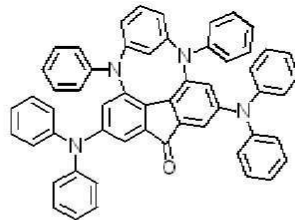
A-20



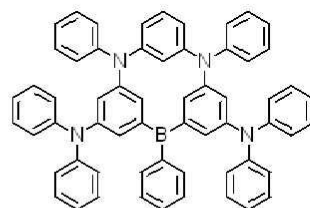
A-21



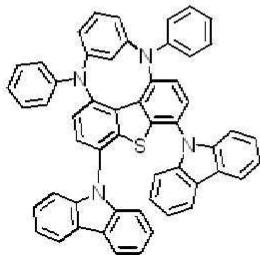
A-22



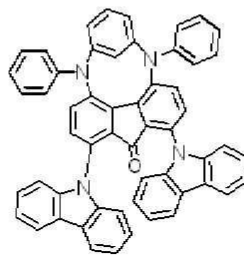
A-23



A-24



A-25



A-26

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 다환 화합물에 관한 것이며, 보다 상세하게는 발광 재료로 사용되는 다환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

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

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

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

발명의 내용

해결하려는 과제

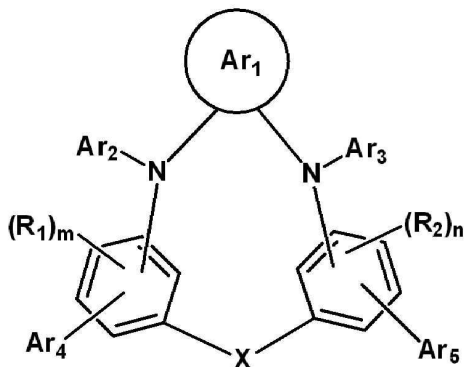
[0005] 본 발명의 목적은 발광 효율 및 소자 수명이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

[0006] 본 발명의 다른 목적은 유기 전계 발광 소자의 발광 효율과 소자 수명을 개선할 수 있는 다환 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0007] 일 실시예는 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 제공한다.

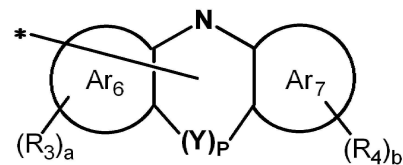
[0008] [화학식 1]



[0009]

[0010] 상기 화학식 1에서, X는 S, O, C(=O), NR_a, 또는 BR_b이고, R₁, R₂, R_a, 및 R_b는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는기와 서로 결합하여 고리를 형성한다. m 및 n은 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수이며, Ar₁ 내지 Ar₃은 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기이고, Ar₄ 및 Ar₅는 각각 독립적으로, 하기 화학식 2로 표시된다.

[0011] [화학식 2]

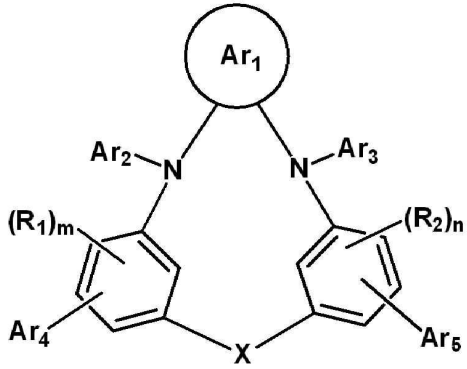


[0012]

[0013] 상기 화학식 2에서, p는 0 또는 1이고, p가 1일 때, Y는 직접 결합 또는 CR_cR_d이고, Ar₆ 및 Ar₇은 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기이다. R₃, R₄, R_c, 및 R_d는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는기와 서로 결합하여 고리를 형성하고, a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

[0014] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0015] [화학식 1-1]



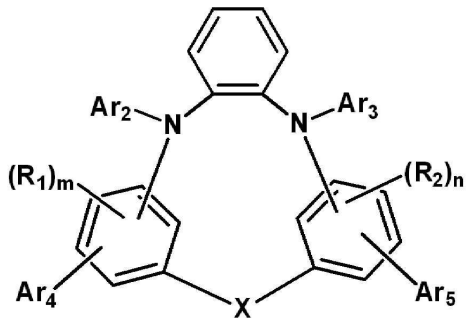
[0016]

[0017] 상기 화학식 1-1에서, X, Ar₁ 내지 Ar₅, R₁, R₂, m, 및 n은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0018] Ar₁은 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다.

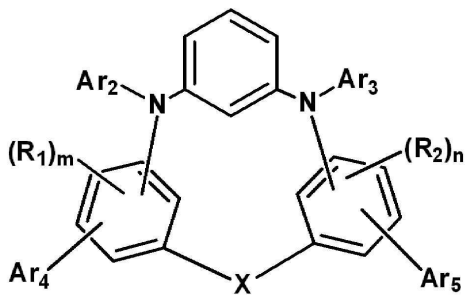
[0019] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2A 또는 화학식 1-2B로 표시될 수 있다.

[0020] [화학식 1-2A]



[0021]

[0022] [화학식 1-2B]

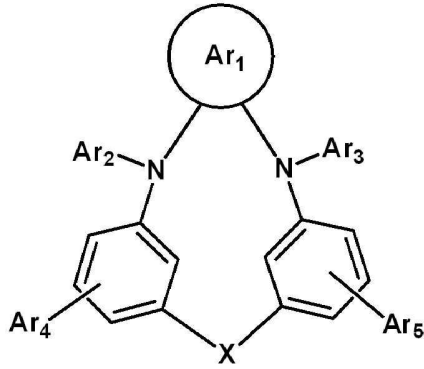


[0023]

[0024] 상기 화학식 1-2A 및 화학식 1-2B에서, X, Ar₂ 내지 Ar₅, R₁, R₂, m, 및 n은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

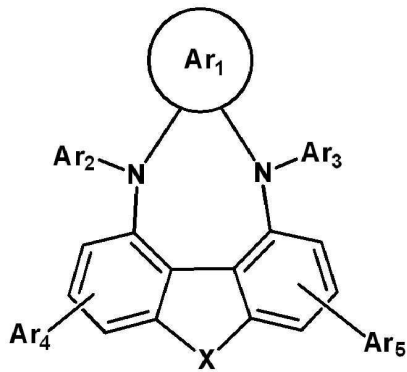
[0025] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-3A 또는 화학식 1-3B로 표시될 수 있다.

[0026] [화학식 1-3A]



[0027]

[0028] [화학식 1-3B]

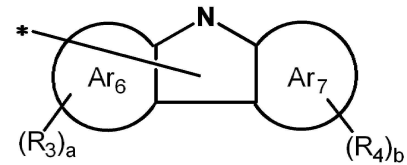


[0029]

[0030] 상기 화학식 1-3A 및 화학식 1-3B에서, X, 및 Ar₁ 내지 Ar₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

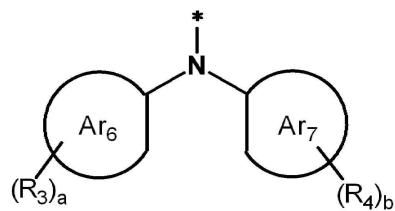
[0031] 상기 화학식 2는 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시될 수 있다.

[0032] [화학식 2-1]



[0033]

[0034] [화학식 2-2]



[0035]

[0036] 상기 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서, Ar₆, Ar₇, R₃, R₄, a, 및 b는 상기 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

[0037] Ar₂ 및 Ar₃는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0038] Ar₄ 및 Ar₅는 동일할 수 있다.

[0039] 상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 열활성 지연 형광 발광 재료일 수 있다.

[0040] 다른 실시예는 제1 전극; 상기 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역; 상기 정공 수송 영역 상에 배치되고, 상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 발광층; 상기 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역; 및 상기 전

자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극; 을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

- [0041] 상기 발광층은 지연 형광을 방출할 수 있다.
- [0042] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하는 지연 형광 발광층이고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0043] 상기 발광층은 청색광을 방출할 수 있다.
- [0044] 상기 발광층은 잉크젯(inkjet) 방식으로 제공되는 것일 수 있다.

발명의 효과

- [0045] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 낮은 구동 전압 및 고효율의 개선된 소자 특성을 나타낼 수 있다.
- [0046] 일 실시예의 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광층에 포함되어 유기 전계 발광 소자의 고효율화에 기여할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0047] 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

- [0048] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.
- [0049] 본 명세서에서, 어떤 구성요소(또는 영역, 층, 부분 등)가 다른 구성요소 "상에 있다", "연결 된다", 또는 "결합된다"고 언급되는 경우에 그것은 다른 구성요소 상에 직접 배치/연결/결합될 수 있거나 또는 그들 사이에 제3의 구성요소가 배치될 수도 있다는 것을 의미한다.
- [0050] 동일한 도면부호는 동일한 구성요소를 지칭한다. 또한, 도면들에 있어서, 구성요소들의 두께, 비율, 및 치수는 기술적 내용의 효과적인 설명을 위해 과장된 것이다.
- [0051] "및/또는"은 연관된 구성들이 정의할 수 있는 하나 이상의 조합을 모두 포함한다.
- [0052] 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0053] 또한, "아래에", "하측에", "위에", "상측에" 등의 용어는 도면에 도시된 구성들의 연관관계를 설명하기 위해 사용된다. 상기 용어들은 상대적인 개념으로, 도면에 표시된 방향을 기준으로 설명된다.
- [0054] 다르게 정의되지 않는 한, 본 명세서에서 사용된 모든 용어 (기술 용어 및 과학 용어 포함)는 본 발명이 속하는 기술 분야의 당업자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 갖는다. 또한, 일반적으로 사용되는 사전에서 정의된 용어와 같은 용어는 관련 기술의 맥락에서 의미와 일치하는 의미를 갖는 것으로 해석되어야 하고, 이상적인 또는 지나치게 형식적인 의미로 해석되지 않는 한, 명시적으로 여기에서 정의됩니다.
- [0055] "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [0056] 이하, 도면들을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자 및 이에 포함된 일 실시예의 다환 화합물에 대하여 설명한다.

- [0057] 도 1 내지 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 1 내지 도 3을 참조하면, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)은 서로 마주하고 배치되며, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에는 복수의 유기층들이 배치될 수 있다. 복수의 유기층들은 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 및 전자 수송 영역(ETR)을 포함할 수 있다. 즉, 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 순차적으로 적층된 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR), 및 제2 전극(EL2)을 포함할 수 있다. 한편, 복수의 유기층들 중 적어도 하나의 유기층은 잉크젯(inkjet) 방식으로 제공되는 것일 수 있다. 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 및 전자 수송 영역(ETR) 등의 유기층들은 잉크젯 방식으로 형성되는 것일 수 있다. 구체적으로 발광층(EML)은 잉크젯 방식으로 제공되는 것일 수 있다.
- [0058] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 발광층(EML)에 후술하는 일 실시예의 다환 화합물을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 발광층(EML) 이외에 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 복수의 유기층들 중 적어도 하나의 유기층에 후술하는 일 실시예의 다환 화합물을 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 일 실시예의 다환 화합물을 발광층(EML)의 발광 재료로 포함하며, 정공 수송 영역(HTR) 및 전자 수송 영역(ETR)에 포함된 적어도 하나의 유기층에 후술하는 일 실시예의 다환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0059] 한편, 도 2는 도 1과 비교하여, 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL) 및 전자 수송층(ETL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 또한, 도 3은 도 1과 비교하여 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 및 전자 저지층(EBL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL), 전자 수송층(ETL), 및 정공 저지층(HBL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다.
- [0060] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 금속 합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제1 전극(EL1)은 애노드(anode)일 수 있다. 또한, 제1 전극(EL1)은 화소 전극일 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. 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.
- [0061] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 버퍼층(미도시), 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 예를 들어, 약 50Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.
- [0062] 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.
- [0063] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질 및 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(미도시), 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층(미도시), 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0064] 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.
- [0065] 정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine)

화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4"-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine), TDATA(4,4'4"-Tris(N,N-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4"-tris(N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino)-triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.

[0066] 정공 수송층(HTL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorene)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 더 포함할 수도 있다.

[0067] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 50Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0068] 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-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0069] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층(미도시) 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층(미도시)은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층(미도시)에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

[0070] 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.

[0071] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 일 실시예의 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

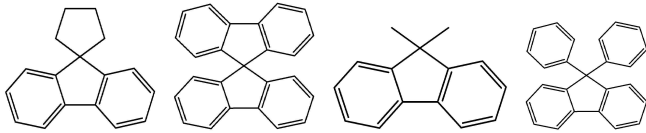
[0072] 일 실시예의 다환 화합물은 복수 개의 전자 공여부들(Electron Donor) 및 전자 공여부들 사이에 배치된 전자 수용부(Electron Acceptor)를 포함하는 것일 수 있다. 전자 수용부는 전자 공여부들을 서로 연결하는 것일 수 있다. 전자 수용부는 복수 개의 전자 공여부들과 결합한 것일 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 다환 화합물은 2개의 전자 공여부들 및 1개의 전자 수용부를 포함하는 것일 수 있다.

[0073] 또한, 일 실시예의 다환 화합물에서 전자 수용부는 아릴 아미노 부위에 의해 고정된 입체 구조를 갖는 것일 수 있다. 예를 들어, 전자 수용부는 아릴 아미노 부위 들과 결합하여 축합환을 형성하는 것일 수 있다. 일 실시예에서 전자 수용부는 아릴 아미노 부위와 결합되어 축합환을 형성함으로써 평면상의 입체 구조를 가질 수 있으며 이로 인해 일 실시예의 다환 화합물이 발광 재료로 사용될 경우 발광되는 광의 반치폭이 감소될 수 있다.

[0074] 일 실시예의 다환 화합물에서 전자 공여부는 치환 또는 비치환된 카바졸기 또는 치환 또는 비치환된 디아릴아미노기일 수 있다. 또한, 일 실시예의 다환 화합물에서 전자 수용부는 S, O, C(=O), NR_a, 또는 BR_b 등을 포함하는

것일 수 있다. 한편, R_a 및 R_b 에 대하여는 후술하는 화학식 1에서 설명하는 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

- [0075] 한편, 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 옥시기, 티오기, 설퍼닐기, 설폰닐기, 카보닐기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 탄화수소 고리기, 아릴기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 비페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.
- [0076] 본 명세서에서, "인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성"한다는 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리를 형성하는 것을 의미할 수 있다. 탄화수소 고리는 지방족 탄화수소 고리 및 방향족 탄화수소 고리를 포함한다. 헤테로 고리는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리를 포함한다. 인접하는 기와 서로 결합하여 형성된 고리는 단환 또는 다환일 수 있다. 또한, 서로 결합하여 형성된 고리는 다른 고리와 연결되어 스피로 구조를 형성하는 것일 수도 있다.
- [0077] 본 명세서에서, "인접하는 기"는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기 또는 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 인접한 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 1,2-디메틸벤젠(1,2-dimethylbenzene)에서 2개의 메틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있고, 1,1-디에틸시클로펜텐(1,1-diethylcyclopentene)에서 2개의 에틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있다.
- [0078] 본 명세서에서, 할로겐 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0079] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 50 이하, 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 6 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2-에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-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.
- [0080] 본 명세서에서, 탄화수소 고리는 지방족 탄화수소 고리 및 방향족 탄화수소 고리를 포함한다. 헤테로 고리는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리를 포함한다. 탄화수소 고리 및 헤테로 고리는 단환 또는 다환일 수 있다.
- [0081] 본 명세서에서, 탄화수소 고리기는 지방족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기, 또는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기일 수 있다. 탄화수소 고리기의 고리 형성 탄소수 5 이상 60 이하일 수 있다.
- [0082] 본 명세서에서, 헤테로 고리기는 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리형성 원자로 포함하는 헤테로 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기일 수 있다. 헤테로 고리기의 고리 형성 탄소수 5 이상 60 이하일 수 있다.
- [0083] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 또는 6 이상 15 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀸크페닐기, 섹시페닐기, 트리페닐에닐기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0084] 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.



[0085]

[0086]

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

[0087]

본 명세서에서, 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 헤테로아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0088]

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.

[0089]

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.

[0090]

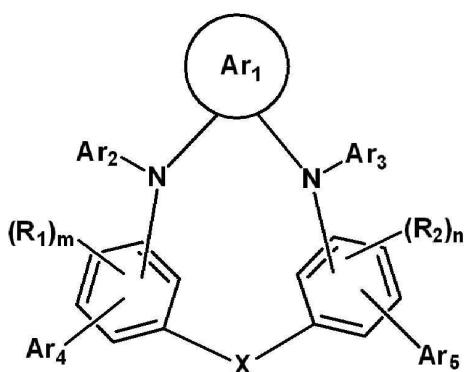
본 명세서에서, "—"은 연결되는 부분을 의미한다.

[0091]

일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함할 수 있다.

[0092]

[화학식 1]



[0093]

[0094]

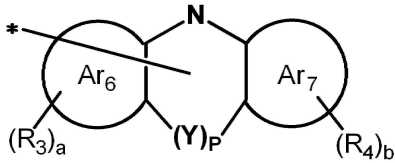
상기 화학식 1에서 X는 S, O, C(=O), NR_a, 또는 BR_b이다. 화학식 1에서 R₁, R₂, R_a, 및 R_b는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하는 것일 수 있다. m 및 n은 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수이며, m 및 n이 각각 2 이상의 정수인 경우 복수의 R₁ 또는 복수의 R₂는 동일하거나 서로 상이할 수 있다.

[0095]

화학식 1에서 Ar₁ 내지 Ar₃은 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리

형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기이고, Ar₄ 및 Ar₅는 각각 독립적으로, 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

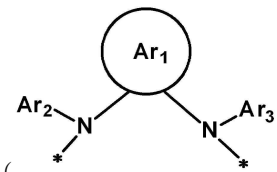
[화학식 2]



상기 화학식 2에서, p는 0 또는 1이고, p가 1일 때, Y는 직접 결합 또는 CR_cR_d일 수 있다. 화학식 2에서, Ar₆ 및 Ar₇은 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기일 수 있다.

R₃, R₄, R_c, 및 R_d는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하는 것일 수 있다. 또한, a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. a 및 b가 각각 2 이상의 정수인 경우 복수의 R₃ 또는 복수의 R₄는 동일하거나 서로 상이할 수 있다.

화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물에서 Ar₄ 및 Ar₅는 전자 공여부이고 X를 포함하는 화학식 1의 코어 부분은 전자 수용부일 수 있다. 즉, 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 전자 공여부-전자 수용부-전자 공여부의 구조를 갖는 것일 수 있다.



일 실시예의 다환 화합물에서 X를 포함하는 전자 수용부는 아릴 아민 부위()와 결합하여 고정된 고리를 갖는 것일 수 있다.

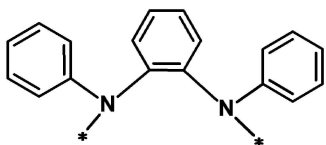
화학식 1에서 Ar₁은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소고리일 수 있다. 예를 들어, Ar₁은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 방향족 탄화수소고리일 수 있다. 구체적으로 일 실시예의 다환 화합물에서 Ar₁은 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다.

화학식 1로 표시되는 다환 화합물에서 Ar₂ 및 Ar₃는 각각 독립적으로, 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 고리기일 수 있다. 예를 들어, Ar₂ 및 Ar₃는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 방향족 탄화수소고리일 수 있다. 구체적으로 일 실시예의 다환 화합물에서 Ar₂ 및 Ar₃는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

일 실시예에서 Ar₂ 및 Ar₃은 동일한 것일 수 있다. 예를 들어, Ar₂ 및 Ar₃은 비치환된 페닐기일 수 있다.

화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물에서 아릴 아민 부위는 전자 수용부와 결합하여 전자 수용부를 평면 형태의 입체 구조로 고정시킬 수 있다. 일 실시예의 다환 화합물에서 아릴 아민 부위는 아래 화학식 A로 표시될 수 있다.

[화학식 A]



[0107]

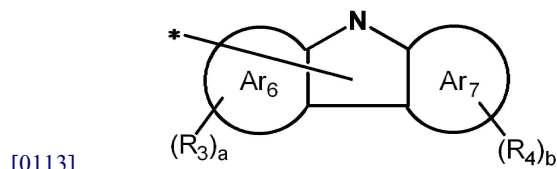
[0108] 화학식 A에서 "—"은 화학식 1의 코어 부분에서 페닐렌 링커와 결합되는 부분일 수 있다.

[0109] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물에서 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 또는 인접하는 R₁ 및 R₂는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

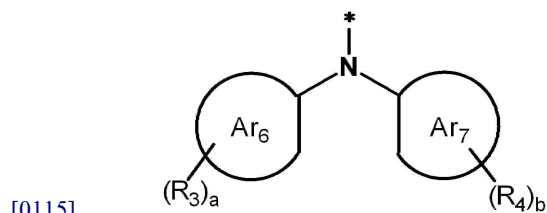
[0110] 예를 들어, R₁ 및 R₂는 수소 원자 또는 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. 또는, 이웃하는 R₁ 및 R₂는 서로 결합하여 X를 고리형성 원자로 포함하는 헤테로고리 또는 탄화수소 고리를 형성할 수 있다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 다환 화합물에서 R₁이 치환된 페닐렌 고리와 R₂가 치환된 페닐렌 고리는 서로 결합하여 플루오레논(Fluorenone), 디벤조티오펜, 또는 디벤조퓨란 등을 형성할 수 있다.

[0111] Ar₄ 및 Ar₅는 각각 독립적으로 상기 화학식 2로 표시되며, 화학식 2는 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시될 수 있다. 화학식 2-1은 화학식 2에서 p가 1이며 Y가 직접 결합인 경우를 나타낸 것이고, 화학식 2-2는 화학식 2에서 p가 0인 경우를 나타낸 것이다.

[0112] [화학식 2-1]



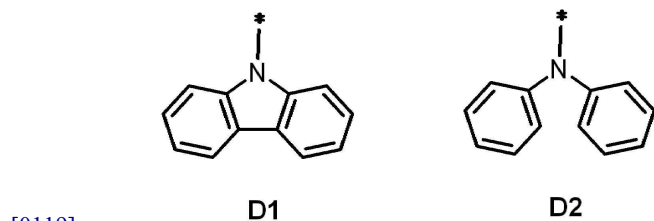
[0114] [화학식 2-2]



[0116] 화학식 2, 화학식 2-1, 및 화학식 2-2에서, Ar₆ 및 Ar₇는 각각 독립적으로 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기, 또는 고리형성 원자로 질소 원자를 미포함하는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로고리기일 수 있다.

[0117] 일 실시예에서, Ar₆ 및 Ar₇는 동일한 것일 수 있다. 일 실시예에서, Ar₆ 및 Ar₇는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리기일 수 있다. 예를 들어, Ar₆ 및 Ar₇는 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 방향족 탄화수소 고리일 수 있다. 구체적으로 Ar₆ 및 Ar₇는 벤젠 고리일 수 있다.

[0118] 예를 들어, Ar₆ 및 Ar₇는 각각 독립적으로 하기 D1 또는 D2로 표시되는 것 일수 있다.

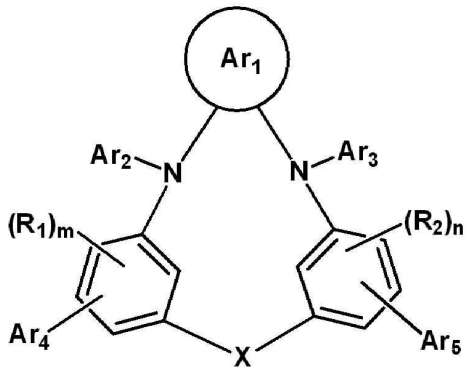


[0120] 즉, 화학식 2-1은 치환 또는 비치환된 카바졸기이고, 화학식 2-2는 치환 또는 비치환된 디페닐아민기일 수 있다.

[0121] 한편, 화학식 1로 표시되는 다환 화합물에서 Ar₄ 및 Ar₅는 동일한 것일 수 있다.

[0122] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0123] [화학식 1-1]



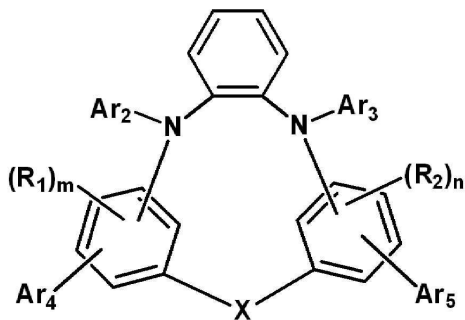
[0124]

[0125] 화학식 1-1은 상기 화학식 1과 비교하여 아릴 아민 부위의 결합 위치가 특정된 것에 해당한다. 예를 들어, 일 실시예의 다환 화합물에서 아릴 아민 부위와 X는 페닐렌 링커에 대하여 메타 위치로 결합된 것일 수 있다.

[0126] 화학식 1-1에서 X, Ar₁ 내지 Ar₅, R₁, R₂, m, 및 n에 대하여는 상술한 화학식 1에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

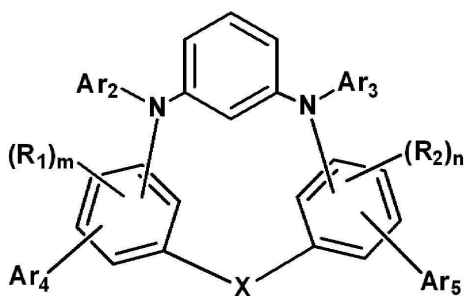
[0127] 한편, 화학식 1은 하기 화학식 1-2A 또는 화학식 1-2B로 표시될 수 있다.

[0128] [화학식 1-2A]



[0129]

[0130] [화학식 1-2B]



[0131]

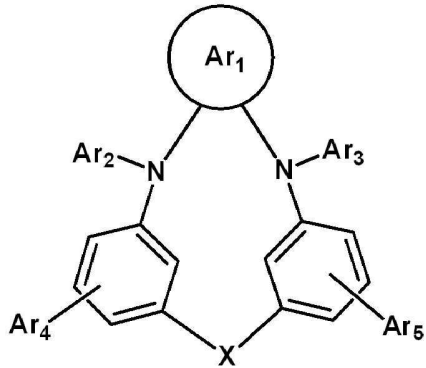
[0132] 상기 화학식 1-2A 및 화학식 1-2B에서 X, Ar₁ 내지 Ar₅, R₁, R₂, m, 및 n에 대하여는 상술한 화학식 1에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

[0133] 한편, 화학식 1-2A와 화학식 1-2B는 화학식 1에서 Ar₁이 페닐렌인 경우를 나타낸 것이다. 다만, 화학식 1-2A와 화학식 1-2B는 페닐렌인 Ar₁에 결합되는 아릴아민기의 위치가 서로 상이한 것에 해당한다. 화학식 1-2A를 참조하면 아릴아민기(*-NAr₂ 및 *-NAr₃)는 페닐렌의 오르쏘 위치로 각각 결합된 것일 수 있다. 또한, 화학식 1-2B를 참조하면 아릴아민기(*-NAr₂ 및 *-NAr₃)는 페닐렌의 메타 위치로 각각 결합된 것일 수 있다.

[0134] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 하기 화학식 1-3A 또는 화학식 1-3B로 표시될 수 있다. 화학식

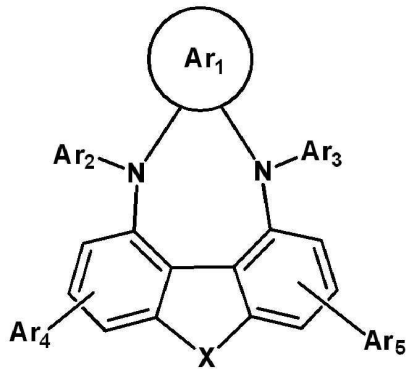
1-3A는 화학식 1에서 m 및 n이 모두 0인 경우, 또는 R₁ 및 R₂가 모두 수소 원자인 경우를 나타낸 것이다. 또한, 화학식 1-3B는 이웃하는 R₁ 및 R₂가 결합하여 고리를 형성한 경우를 나타낸 것일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1-3B는 인접하는 R₁ 및 R₂가 직접 결합을 형성하고 X를 고리 형성 원자로 포함하여 고리를 형성한 것일 수 있다.

[0135] [화학식 1-3A]



[0136]

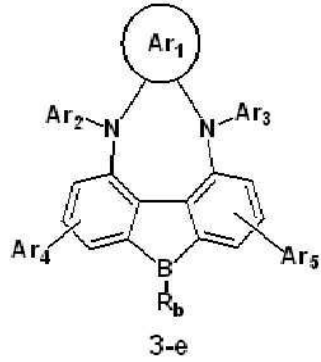
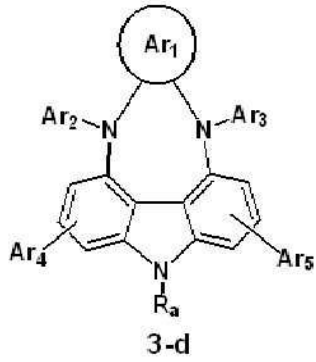
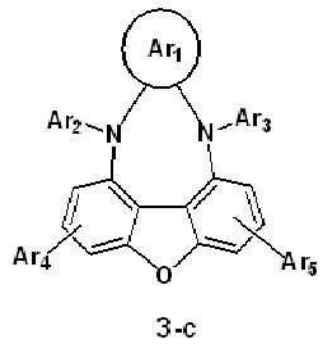
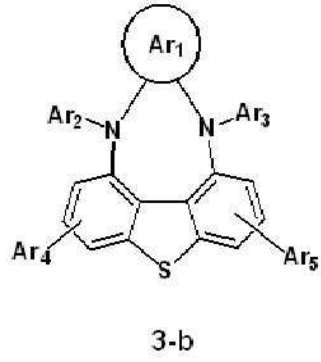
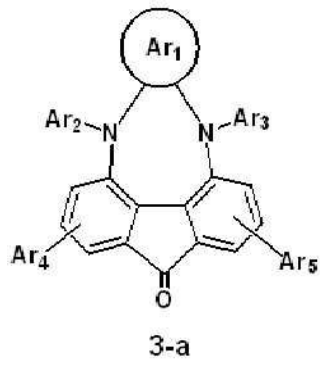
[0137] [화학식 1-3B]



[0138]

[0139] 화학식 1-3A 및 화학식 1-3B에서, X, 및 Ar₁ 내지 Ar₅에 대하여는 상술한 상기 화학식 1에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

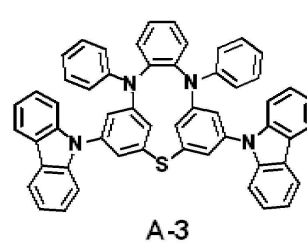
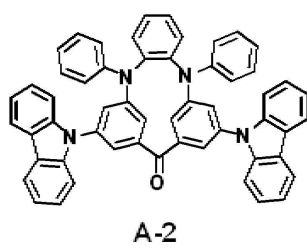
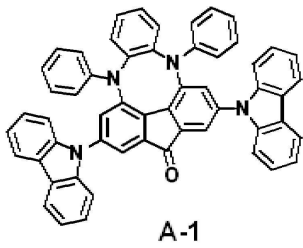
[0140] 예를 들어, 화학식 1-3B는 하기의 화학식 3-a 내지 화학식 3-e 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 화학식 3-a 내지 화학식 3-e에서 Ar₁ 내지 Ar₅에 대하여는 상술한 상기 화학식 1에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.



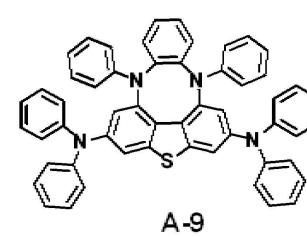
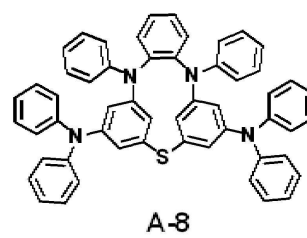
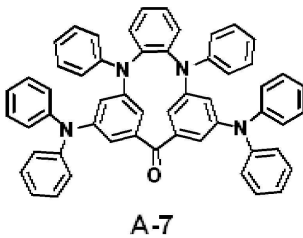
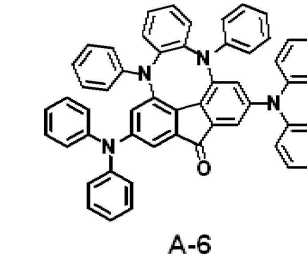
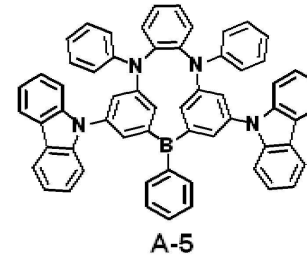
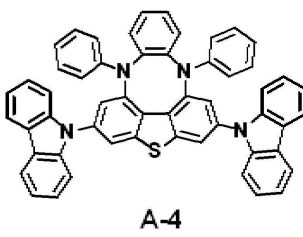
[0141]

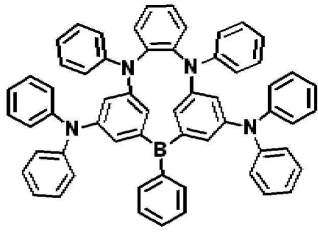
[0142] 일 실시예의 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나일 수 있다.

[0143] [화합물군 1]

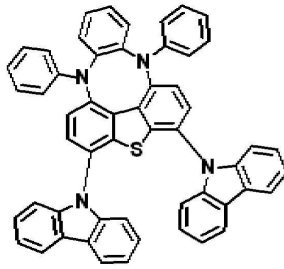


[0144]

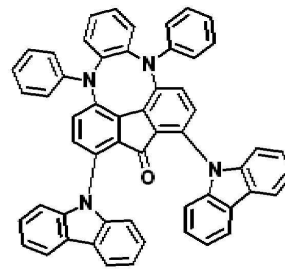




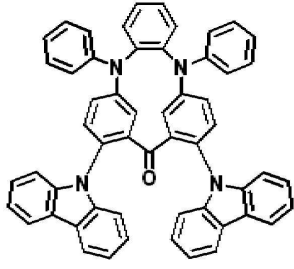
A-10



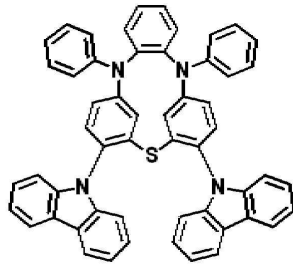
A-11



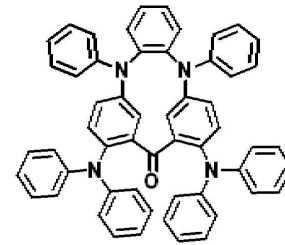
A-12



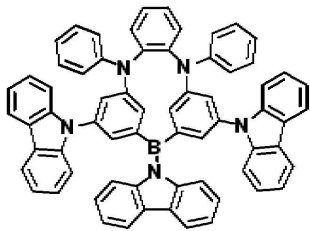
A-13



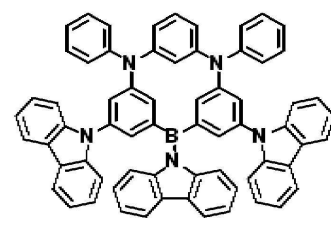
A-14



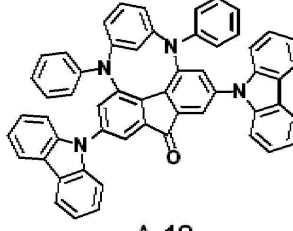
A-15



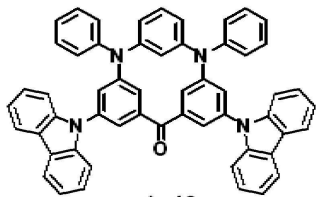
A-16



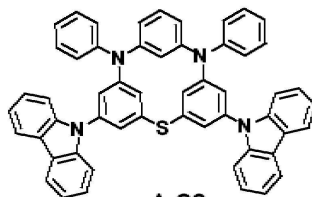
A-17



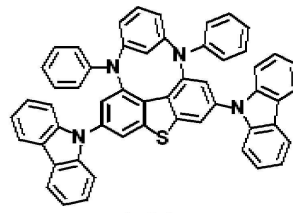
A-18



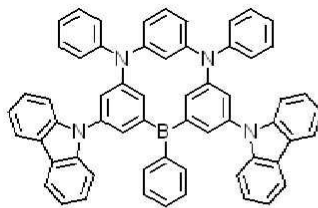
A-19



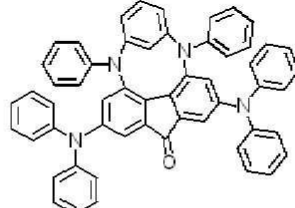
A-20



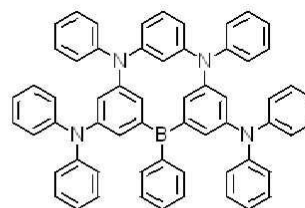
A-21



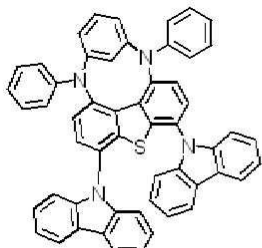
A-22



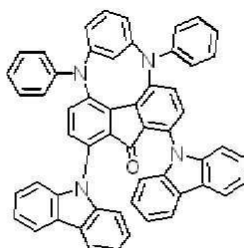
A-23



A-24



A-25



A-26

[0145] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나의 다환 화합물을 발광층(EML)에 포함할 수 있다.

- [0146] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 열활성 지연 형광 발광 재료일 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 지연 형광을 방출하는 것일 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)은 열활성 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)을 방출하는 것일 수 있다.
- [0147] 또한, 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 청색광을 방출하는 것일 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 480nm 이하의 영역의 청색광을 방출하는 것일 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며 발광층(EML)은 적색광 또는 녹색광을 방출하는 것일 수 있다.
- [0148] 한편, 도면에 도시되지는 않았으나 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 복수의 발광층들을 포함하는 것일 수 있다. 복수의 발광층들은 순차적으로 적층되어 제공되는 것일 수 있으며, 예를 들어 복수의 발광층들을 포함하는 유기 전계 발광 소자(10)는 백색광을 방출하는 것일 수 있다. 복수의 발광층들을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 탠덤(Tandem) 구조의 유기 전계 발광 소자일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 복수의 발광층들을 포함하는 경우 적어도 하나의 발광층(EML)은 상술한 일 실시예의 다환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0149] 일 실시예에서, 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함하며 상술한 다환 화합물을 도펀트로 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 지연 형광 발광용 호스트 및 지연 형광 발광용 도펀트를 포함할 수 있고, 상술한 다환 화합물을 지연 형광 발광용 도펀트로 포함할 수 있다. 발광층(EML)은 상술한 화합물군 1에 표시된 다환 화합물들 중 적어도 하나를 열활성 지연 형광 도펀트로 포함할 수 있다.
- [0150] 일 실시예에서 발광층(EML)은 지연 형광 발광층이고, 발광층(EML)은 공지의 호스트 재료 및 상술한 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 일 실시예에서 다환 화합물은 TADF 도펀트로 사용되는 것일 수 있다.
- [0151] 한편, 일 실시예에서 발광층(EML)은 공지의 호스트 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예에서 발광층(EML)은 호스트 재료로, 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 cyclotriposphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO₃ (Hexaphenylcyclotrisiloxane), DPSiO₄ (Octaphenylcyclotetra siloxane), 또는 PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran), mCBP(3,3'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며, 제시된 호스트 재료 이외에 공지의 지연 형광 발광 호스트 재료가 포함될 수 있다.
- [0152] 한편, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 공지의 도펀트 재료를 더 포함할 수 있다. 일 실시예에서 발광층(EML)은 도펀트로 스티릴 유도체(예를 들어, 1, 4-bis[2-(3-N-ethylcarbazolyl)vinyl]benzene(BCzVB), 4-(di-p-tolylamino)-4'-[(di-p-tolylamino)styryl]stilbene(DPAVB), N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(diphenylamino)styryl)naphthalen-2-yl)vinyl)phenyl)-N-phenylbenzenamine(N-BDAVBi), 페릴렌 및 그 유도체(예를 들어, 2, 5, 8, 11-Tetra-t-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체(예를 들어, 1, 1-dipyrene, 1, 4-dipyrenylbenzene, 1, 4-Bis(N, N-Diphenylamino)pyrene) 등의 2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene(TBP)) 등을 포함할 수 있다.
- [0153] 도 1 내지 도 3에 도시된 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서, 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, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0154] 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.
- [0155] 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.

- [0156] 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.
- [0157] 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), BAlq(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.
- [0158] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, LiQ(8-hydroxyquinolinolato-lithium), 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.
- [0159] 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.
- [0160] 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.
- [0161] 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.
- [0162] 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.
- [0163] 한편, 도면에 도시되지는 않았으나, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 제2 전극(EL2) 상에는 캡핑층(미도시)이 더 배치될 수 있다. 캡핑층(미도시)은 예를 들어, α-NPD, NPB, TPD, m-MTDATA, Alq₃, CuPc, TPD15(N₄,N₄,N₄' ,N₄'-tetra (biphenyl-4-yl) biphenyl-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"- Tris (carbazol sol-9-yl) triphenylamine), N, N'-bis (naphthalen-1-yl) 등을 포함하는 것일 수 있다.
- [0164] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 상술한 일 실시예의 다환 화합물을 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 발광층(EML)에 포함하여 낮은 구동 전압과 높은 발광 효율 특성을 나타낼 수 있다. 또한, 일 실시예에 따른 다환 화합물은 열활성 지연 형광 도펀트일 수 있으며, 발광층(EML)은 일 실시예의 다환

화합물을 포함하여 열활성 지연 형광 발광함으로써 높은 발광 효율 특성을 나타낼 수 있다.

[0165] 한편, 상술한 일 실시예의 다환 화합물은 발광층(EML) 이외의 유기층에서 유기 전계 발광 소자(10)용 재료로 포함될 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 상술한 다환 화합물을 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 적어도 하나의 유기층 또는 제2 전극(EL2) 상에 배치된 캡핑층(미도시)에 포함할 수도 있다.

[0166] 상술한 일 실시예의 다환 화합물은 복수 개의 전자 공여부들 및 전자 공여부들을 연결하는 전자 수용부를 포함하는 것으로, 하나의 분자 안에 전자 공여부와 전자 수용부를 모두 포함하여 분자 내에서의 전자 이동이 용이할 수 있다. 또한, 일 실시예의 다환 화합물은 전자 공여부와 전자 수용부 사이에 쌍극자(dipole)가 형성되어 분자 내부의 쌍극자 모멘트가 증가됨으로써 발광 재료로 사용시 발광 효율을 보다 개선시킬 수 있다.

[0167] 또한, 일 실시예의 다환 화합물은 전자 수용부를 평면 형태로 고정시키는 아릴 아민 부위를 포함하여, 일 실시예의 다환 화합물을 포함하는 발광층에서 방출되는 광의 반치폭을 감소시킬 수 있다. 이에 따라 일 실시예의 유기 전계 발광 소자가 방출하는 광의 색순도가 높아져 개선된 표시 품질을 나타낼 수 있다.

[0168] 또한, 일 실시예의 다환 화합물은 열활성 지연 형광 발광함으로써 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 보다 증가시킬 수 있다.

[0169] 이하에서는, 실시예 및 비교예를 참조하면서, 본 발명의 일 실시 형태에 따른 다환 화합물 및 일 실시예의 유기 전계 발광 소자에 대해서 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 나타내는 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 일 예시이며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0170] [실시예]

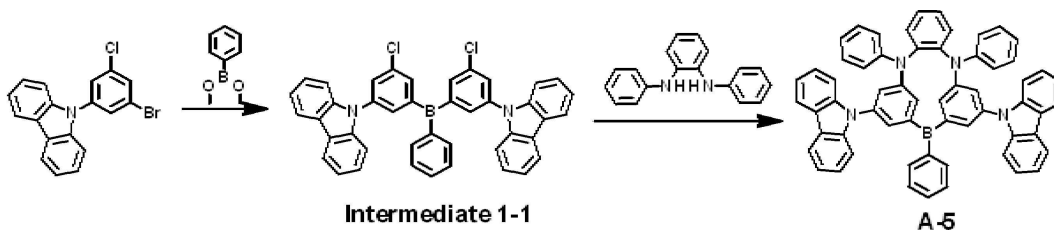
[0171] 1. 다환 화합물의 합성

[0172] 먼저, 본 실시 형태에 따른 다환 화합물의 합성 방법에 대해서, 화합물 A-5, A-9, A-10, 및 A-24의 합성 방법을 예시하여 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 설명하는 다환 화합물의 합성법은 일 실시예로서, 본 발명의 실시 형태에 따른 다환 화합물의 합성법이 하기의 실시예에 한정되지 않는다.

[0173] (1) 화합물 A-5의 합성

[0174] 일 실시예에 따른 다환 화합물 A-5는 예를 들어 하기 반응식 1에 의해 합성될 수 있다.

[0175] [반응식 1]



[0176] <중간체 1-1의 합성>

[0177] Dimethyl phenylboronate(1eq)와 9-(3-bromo-5-chlorophenyl)-9H-carbazole(2.1eq)을 500ml의 톨루엔에 용해시켰다. Pd(PPh₃)₄(0.02eq)를 첨가하였다. 추가로 Toluene 400 ml 및 2M K₂CO₃ 포화용액 70ml를 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 종결된 후 MC(methylene chloride) 400ml와 증류수 150ml로 세척 및 추출한 다음, 용매를 제거한 후 생성된 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 원하는 중간체 1-1(수율 55.4%)를 수득하였다. 질량 분석기로 측정된 분자량으로부터 중간체 1-1인 것을 확인하였다. (HRMS for C₄₂H₂₇BCl₂N₂ [M]⁺ : calcd : 641, found : 640)

[0179] <화합물 A-5의 합성>

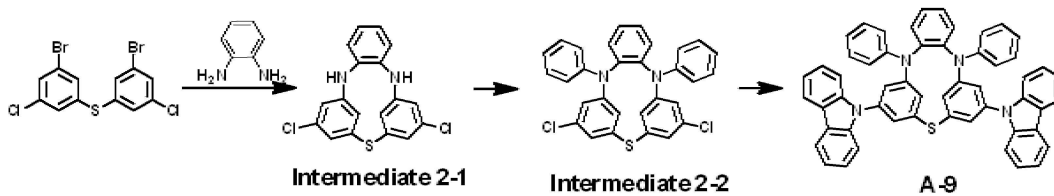
[0180] 중간체 1-1(1eq)와 N1,N2-diphenylbenzene-1,2-diamine(1eq)을 넣은 플라스크에 Pd(dba)₃(0.03eq), (t-Bu)₃P(0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 8시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각한 후 MC로 추출하고 증류수로 세정하였다. MgSO₄로 건조시키고 감압 증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 화합물 A-

5(수율 78.87%)를 얻었다. 질량 분석기로 측정한 분자량으로부터 화합물 A-5인 것을 확인하였다. (HRMS for $C_{60}H_{41}BN_4$ [M]⁺ : calcd : 828, found : 827)

[0181] (2)화합물 A-9의 합성

[0182] 일 실시예에 따른 다환 화합물 A-9는 예를 들어 하기 반응식 2에 의해 합성될 수 있다.

[0183] [반응식 2]



[0184]

[0185] <중간체 2-1의 합성>

[0186] benzene-1,2-diamine(1eq)와 bis(3-bromo-5-chlorophenyl)sulfane(1eq) 을 넣고 Pd(dba)₃(0.03eq), (t-Bu)₃P(0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 8시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각한 후 MC로 추출하고 증류수로 세정하였다. MgSO₄로 건조시키고 감압증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 화합물 2-1(수율 78.87%)을 얻었다. 질량 분석기로 측정한 분자량으로부터 중간체 2-1인 것을 확인하였다. (HRMS for $C_{18}H_{12}Cl_2N_2S$ [M]⁺ : calcd : 359, found : 358)

[0187] <중간체 2-2의 합성>

[0188] 중간체 2.2 (1eq)와 Bromobenzen (2.2eq) 을 넣고 Pd(dba)₃(0.03eq), (t-Bu)₃P(0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 8시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각한 후 MC로 추출하고 증류수로 세정하였다. MgSO₄로 건조시키고 감압 증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 화합물 2-1(수율 87%)을 얻었다. 질량 분석기로 측정한 분자량으로부터 중간체 2-2인 것을 확인하였다.(HRMS for $C_{18}H_{12}Cl_2N_2S$ [M]⁺ : calcd : 359, found : 358)

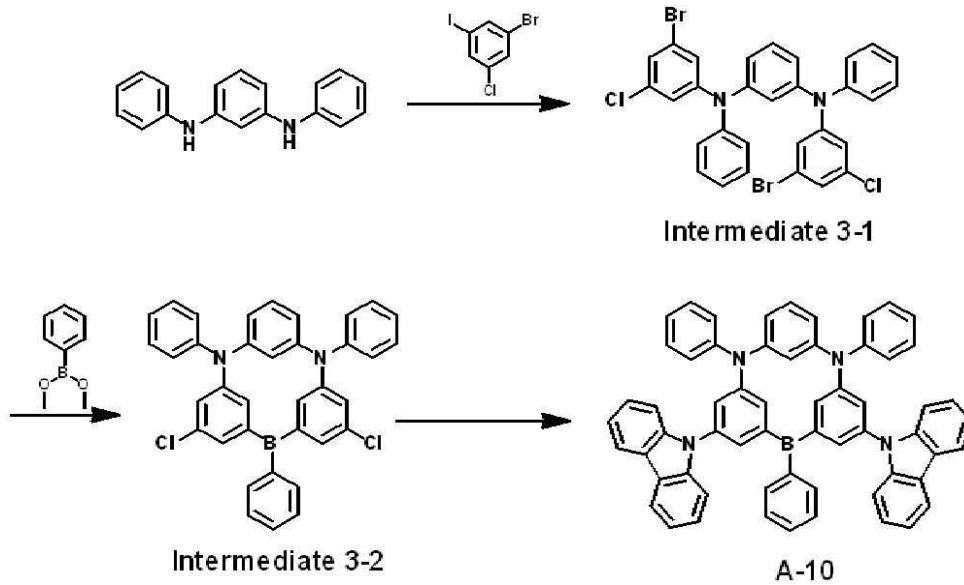
[0189] <화합물 A-9의 합성>

[0190] 중간체 2-2(1eq) 와 카바졸(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 8시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각한 후 MC로 추출하고 증류수로 세정하였다. MgSO₄로 건조시키고 감압 증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 화합물 A-9(수율 88.44%)를 얻었다. 질량 분석기로 측정한 분자량으로부터 화합물 A-9인 것을 확인하였다.(HRMS for $C_{54}H_{36}N_4S$ [M]⁺ : calcd : 772, found : 771)

[0191] (3)화합물 A-10의 합성

[0192] 일 실시예에 따른 다환 화합물 A-10은 예를 들어 하기 반응식 3에 의해 합성될 수 있다.

[0193] [반응식 3]



[0194]

[0195] <중간체 3-1의 합성>

[0196] N1,N3-diphenylbenzene-1,3-diamine(1eq)와 1-bromo-3-chloro-5-iodobenzene(2.1eq)을 넣고 Pd(dba)₃(0.03eq), (t-Bu)₃P(0.06eq) 및 톨루엔(0.1M 1eq 시약 기준)을 첨가한 다음 3시간 동안 120℃ 온도에서 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출하고 증류수로 세정하였다. MgSO₄로 건조시키고 감압 증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 중간체 3-1(수율 81.7%)을 얻었다. 질량 분석기로 측정된 분자량으로부터 중간체 3-1인 것을 확인하였다.(HRMS for C₁₈H₁₂Cl₂N₂S [M]⁺ : calcd : 639, found : 638)

[0197] <중간체 3-2의 합성>

[0198] 중간체 3-1(1eq)와 dimethyl phenylboronate(1eq)을 500ml의 톨루엔에 용해시켰다. 다음을 Pd(PPh₃)₄(0.02eq)를 첨가하였다. 추가로 톨루엔 400 ml 및 2M K₂CO₃ 포화용액 70ml를 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 종결된 후 MC 400ml와 증류수 150ml로 세척 및 추출한 다음, 용매를 제거하고 생성된 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 원하는 중간체 3-2(수율 66.7%)를 수득하였다. 질량 분석기로 측정된 분자량으로부터 중간체 3-2인 것을 확인하였다.(HRMS for C₃₆H₂₅BCl₂N₂ [M]⁺ : calcd : 567, found : 566)

[0199] <화합물 A-10의 합성>

[0200] 중간체 3-2(1eq)와 카바졸(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 8시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 MC로 추출한 후 증류수로 세정하였다. MgSO₄로 건조시키고 감압 증류한 후 잔사를 컬럼으로 분리하여 화합물 A-10(수율 85.6%)을 얻었다. 질량 분석기로 측정된 분자량으로부터 화합물 A-10인 것을 확인하였다.(HRMS for C₆₀H₄₁BN₄ [M]⁺ : calcd : 828, found : 827)

[0201] (4)화합물 A-24의 합성

[0202] 화합물 A-10의 합성 방법에서, N1,N3-diphenylbenzene-1,3-diamine을 대신하여 N1,N2-diphenylbenzene-1,2-diamine를 사용한 것을 제외하고는 화합물 A-10의 합성 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-24를 합성하였다. 질량 분석기로 측정된 분자량으로부터 화합물 A-24인 것을 확인하였다.(HRMS for C₆₀H₄₁BN₄ [M]⁺ : calcd : 828, found : 827)

[0203] 2. 화합물의 에너지 준위 평가

[0204] 아래 표 1에서는 실시예 화합물인 화합물 A-5, 화합물 A-9, 화합물 A-10, 및 화합물 A-24의 HOMO 에너지 준위, LUMO 에너지 준위, 최저 일중항 여기 에너지 준위(S1 level)와 최저 삼중항 여기 에너지 준위(T1 level), 및 Δ

E_{ST} 값을 나타내었다.

[0205] 표 1에서의 에너지 준위 값들은 비경험적 분자 궤도법에 의해 계산되었다. 구체적으로 Gaussian 사의 Gaussian 09를 사용하여 B3LYP/6-31G(d)로 계산되었다. ΔE_{ST} 는 최저 일중항 여기 에너지 준위(S1 level)와 최저 삼중항 여기 에너지 준위(T1 level)의 차이를 나타낸 것이다.

표 1

화합물 종류	HOMO (eV)	LUMO (eV)	S1 (eV)	T1 (eV)	ΔE_{ST} (eV)
화합물 A-5	-5.26	-2.315	2.87	2.72	0.08
화합물 A-9	-5.685	-2.775	2.87	2.65	0.03
화합물 A-10	-5.63	-2.560	2.73	2.73	0.13
화합물 A-24	-5.61	-2.455	3.05	2.79	0.15

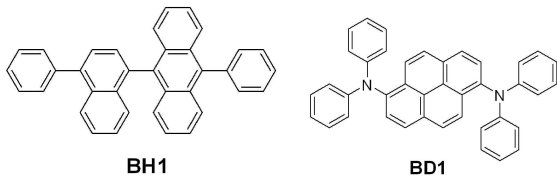
[0207] 실시예 화합물들인 화합물 A-5, 화합물 A-9, 화합물 A-10, 및 화합물 A-24의 ΔE_{ST} 값이 0.2 eV 이하의 값을 가진다. 이로부터 화합물 A-5, 화합물 A-9, 화합물 A-10, 및 화합물 A-24는 열활성 지연 형광 도펀트 재료로 사용될 수 있을 것으로 판단된다.

[0208] 3. 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 제작 및 평가

[0209] (유기 전계 발광 소자의 제작)

[0210] 일 실시예의 다환 화합물을 발광층에 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자를 아래의 방법으로 제조하였다. 상술한 화합물 A-5, A-9, A-10, 및 A-24의 다환 화합물을 발광층의 도펀트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 실시예 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0211] 비교예 1은 하기 BH-1을 호스트 재료로 사용하고 BD-1을 도펀트 재료로 사용하여 제작한 유기 전계 발광 소자에 해당한다. 비교예 2는 비교예 화합물 C1을 발광층의 도펀트 재료로 사용하여 제작된 유기 전계 발광 소자에 해당한다.

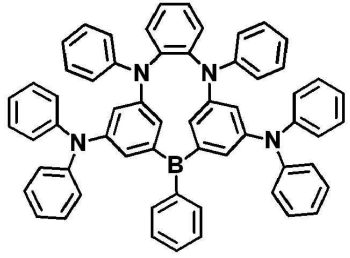
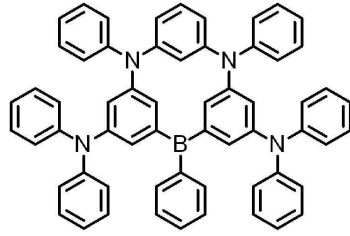
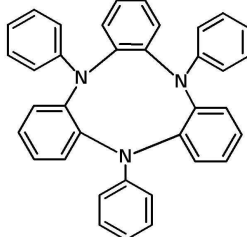


[0212]

[0213] 실시예 1 내지 실시예 4 및 비교예 2에서 사용한 화합물은 표 2에 나타내었다.

표 2

화합물 A-5	<p style="text-align: center;">A-5</p>	화합물 A-9	<p style="text-align: center;">A-9</p>
------------	--	------------	--

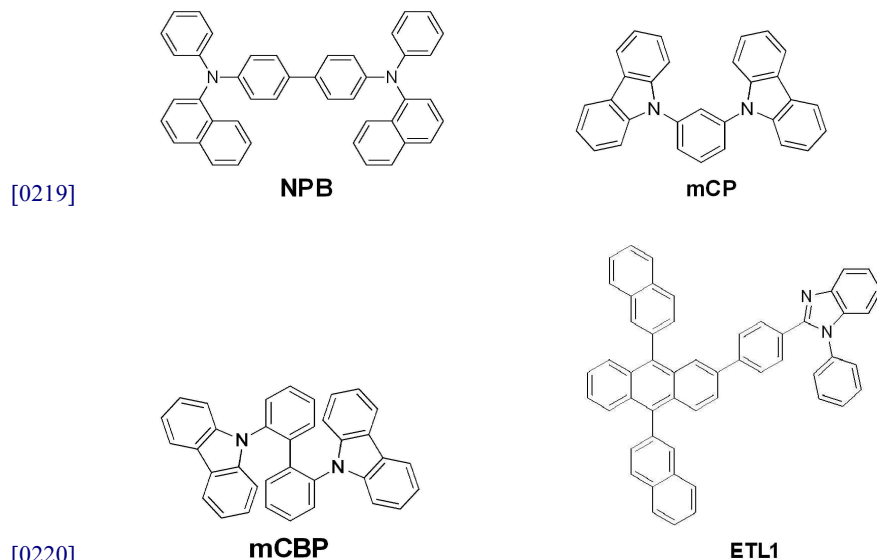
<p>화합물 A-10</p>	 <p style="text-align: center;">A-10</p>	<p>화합물 A-24</p>	 <p style="text-align: center;">A-24</p>
<p>비교예 화합물 C1</p>			

[0215] 유리 기판 상에 두께 1200Å의 ITO를 패터닝한 후, 이소프로필 알코올 및 초순수로 세척하고 초음파로 세정한 후 30 분 동안 UV를 조사하고 이후 오존 처리를 실시하였다. 그 후, 40Å 두께로 NPB를 증착하여 정공 주입층을 형성하고, 다음으로 10Å 두께로 mCP를 증착하여 정공 수송층을 형성하였다.

[0216] 정공 수송층 상에 mCBP와 본 발명 일 실시예의 다환 화합물 또는 비교예 화합물 C-1을 85:15의 비율로 공증착하여 두께 200Å의 발광층을 형성하였다. 즉, 공증착하여 형성된 발광층은 실시예 1 내지 실시예 4에서는 각각 화합물 A-5, A-9, A-10, 및 A-24를 mCBP와 혼합하여 증착하였고, 비교예 2에서는 비교예 화합물 C1을 mCBP와 혼합하여 증착하였다.

[0217] 발광층 상에 ETL1 물질로 두께 300Å의 전자 수송층을 형성하고, 다음으로, 알루미늄(Al)으로 두께 1200Å의 제 2 전극을 형성하였다.

[0218] 실시예 및 비교예의 유기 전계 발광 소자 제작에 사용된 화합물들은 아래에 개시하였다.



[0221] (유기 전계 발광 소자의 특성 평가)

[0222] 표 3에서는 실시예 1 내지 실시예 4, 및 비교예 1 및 비교예 2에 대한 유기 전계 발광 소자의 평가 결과를 나타내었다. 표 2에서는 제작된 유기 전계 발광 소자의 구동 전압, 발광 효율 및 외부 양자 효율(EQE)을 비교하여 나타내었다. 표 2에 나타낸 실시예 및 비교예에 대한 특성 평가 결과에서는 발광 효율은 전류 밀도 10mA/cm²에 대한 전류 효율 값을 나타낸 것이다.

표 3

소자 작성예	발광층 도펀트 물질	구동전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	EQE (%)
실시예 1	화합물 A-4	4.7	16.4	6.9
실시예 2	화합물 A-9	4.4	17.1	6.78
실시예 3	화합물 A-10	5.2	16.7	6.98
실시예 4	화합물 A-24	4.9	19.54	7.0
비교예 1	BD1	7.44	4.84	2.99
비교예 2	비교예 화합물 C1	5.5	13.7	6.7

[0223]

표 3의 결과를 참조하면, 본 발명의 일 실시예의 다환 화합물을 발광층 재료로 사용한 유기 전계 발광 소자의 실시예들의 경우 비교예들에 비하여 낮은 구동 전압, 및 높은 발광 효율과 높은 외부 양자 효율을 나타내는 것을 알 수 있다.

[0225]

한편, 비교예 1은 일반적인 형광 발광용 도펀트 재료인 BD1을 발광층에 포함한 것으로 실시예 1 내지 실시예 4의 경우 비교예 1에 비하여 높은 발광 효율을 나타내는 것으로부터 실시예들의 다환 화합물은 열활성 지연 형광 발광하는 것임을 확인할 수 있다.

[0226]

즉, 비교예 1의 도펀트 화합물과 비교하여 실시예에 사용된 본 발명 다환 화합물들의 경우 전자 공여부와 전자 수용부를 하나의 화합물 단위에 포함하여 지연 형광 발광을 할 수 있어 높은 소자 효율을 나타낼 수 있다. 또한, 비교예 2는 실시예 1 내지 실시예 4에서 사용한 호스트 물질을 동일하게 사용하였으며 도펀트로 비교예 화합물 C1을 사용하였으며, 비교예 화합물 C1은 복수 개의 전자 공여부들 및 전자 공여부들을 연결하는 전자 수용부를 포함하는 일 실시예의 다환 화합물들과 상이한 구조를 가짐으로써 비교예 2는 실시예들에 비하여 상대적으로 높은 구동 전압, 및 낮은 발광 효율과 낮은 외부 양자 효율 값을 나타내는 것을 알 수 있다. 즉, 실시예에 사용된 다환 화합물들의 경우 비교예에 사용된 도펀트 화합물들과 비교할 때 낮은 구동 전압으로도 우수한 소자 효율을 나타낼 수 있다.

[0227]

이상에서는 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하였지만, 해당 기술 분야의 숙련된 당업자 또는 해당 기술 분야에 통상의 지식을 갖는 자라면, 후술될 특허청구범위에 기재된 본 발명의 사상 및 기술 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할 수 있을 것이다.

[0228]

따라서, 본 발명의 기술적 범위는 명세서의 상세한 설명에 기재된 내용으로 한정되는 것이 아니라 특허청구범위에 의해 정하여져야만 할 것이다.

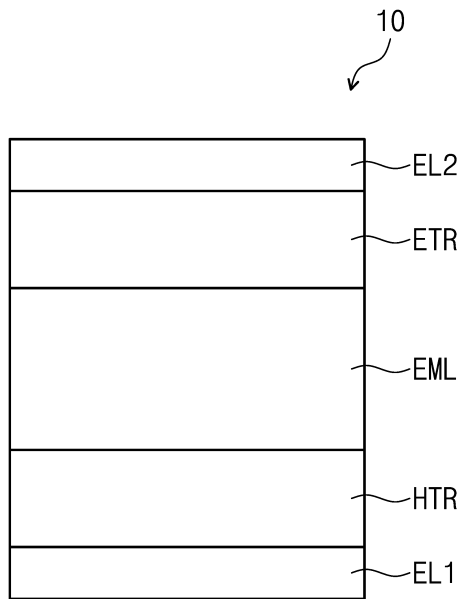
부호의 설명

[0229]

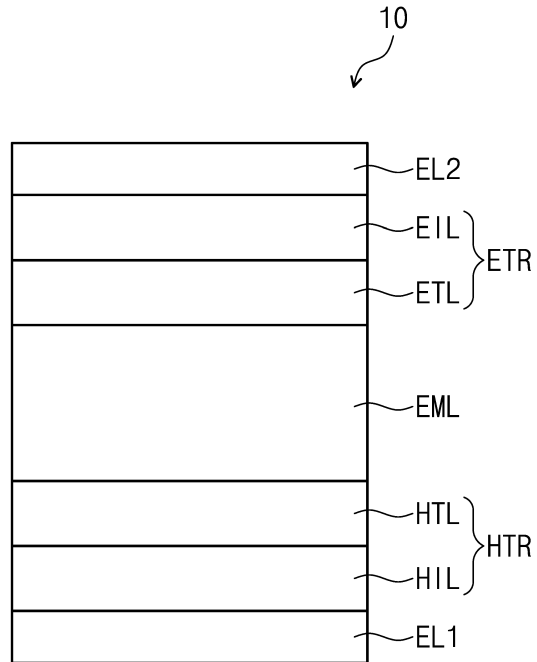
- 10 : 유기 전계 발광 소자
- EL1 : 제1 전극
- EL2 : 제2 전극
- HTR : 정공 수송 영역
- EML : 발광층
- ETR : 전자 수송 영역

도면

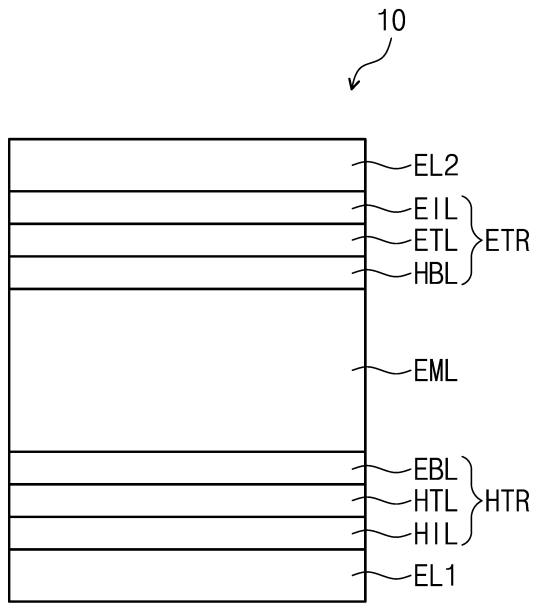
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	有机电致发光元件和用于有机电致发光元件的多环化合物		
公开(公告)号	KR1020200068791A	公开(公告)日	2020-06-16
申请号	KR1020180155173	申请日	2018-12-05
[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		
[标]发明人	이정섭 정혜인 박혜정		
发明人	이정섭 정혜인 박혜정		
IPC分类号	H01L51/00 C07D245/04 C07D285/00 C07D403/14 C07D417/14 C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0071 C07D245/04 C07D285/00 C07D403/14 C07D417/14 C07D495/04 C09K11/06 H01L51/5012 H01L51/5024 C07D495/06 C07F5/027 C09K2211/1018 C09K2211/1022 H01L51/0005 H01L51/0061 H01L51/008 H01L51/5016		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

一个实施方案的有机电致发光器件包括第一电极，空穴传输区域，发光层，电子传输区域和第二电极，并且发光层可以通过包含由下式1表示的多环化合物而表现出提高的发光效率。。 [公式1]

