



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0078755
(43) 공개일자 2020년07월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/008 (2013.01)
H01L 51/0071 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0167210
(22) 출원일자 2018년12월21일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
고쿠리쓰다이가쿠호진 규슈다이가쿠
일본국 후쿠오카현 후쿠오카시 니시쿠 모토오카
744
(72) 발명자
미야자키, 유키
일본 가나가와현 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초
2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내
후지타, 요시마사
일본 가나가와현 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초
2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인 고려

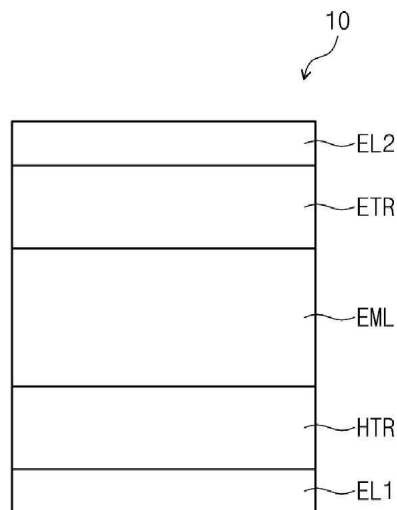
전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

본 발명은 전자 공여부 및 전자 수용부를 포함하는 다환 화합물을 발광층에 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 전자 공여부는 아크리딘 유도체 또는 디벤조 아자실린 유도체를 포함하고, 전자 수용부는 고리 형성 원자로 B, 및 B와 직접 결합하는 O 또는 S를 포함하며, 세 개 또는 다섯 개의 육각 고리가 축합된 헤테로고리기를 포함 함으로써 소자의 고효율화가 달성 된다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/0094 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

H01L 51/5048 (2013.01)

(72) 발명자

야스다, 다쿠마

일본 후쿠오카현 후쿠오카시 니시쿠 모토오카 744

국립 대학 법인 규슈 대학 내

마쓰오, 교헤이

일본 후쿠오카현 후쿠오카시 니시쿠 모토오카 744

국립 대학 법인 규슈 대학 내

명세서

청구범위

청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 제2 전극; 및

상기 제1 전극 및 상기 제2 전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함하는 복수의 유기층들을 포함하고,

상기 발광층은 전자 공여부 및 상기 전자 공여부와 결합된 전자 수용부를 포함하는 다환 화합물을 포함하고,

상기 전자 공여부는 아크리딘 유도체 또는 디벤조 아자실린 유도체를 포함하고

상기 전자 수용부는 고리 형성 원자로 B, 및 B와 직접 결합하는 O 또는 S를 포함하며, 세 개 또는 다섯 개의 육각 고리가 축합된 헤테로고리기를 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 2

제1 항에 있어서,

상기 전자 수용부는 디벤조 티아보리닌 유도체 또는 디벤조 옥사보리닌 유도체를 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 3

제2 항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고,

상기 도펀트가 상기 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 4

제1 항에 있어서,

상기 다환 화합물의 일중항 에너지 준위와 삼중항 에너지 준위의 차이(ΔE_{ST})는 0.2eV 이하인 유기 전계 발광 소자.

청구항 5

제1 항에 있어서,

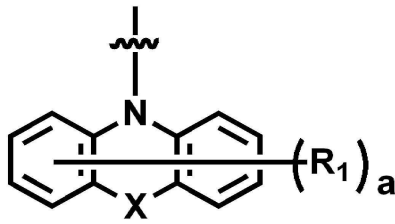
상기 발광층은 440nm 이상 500nm 이하의 파장영역의 광을 발광하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 6

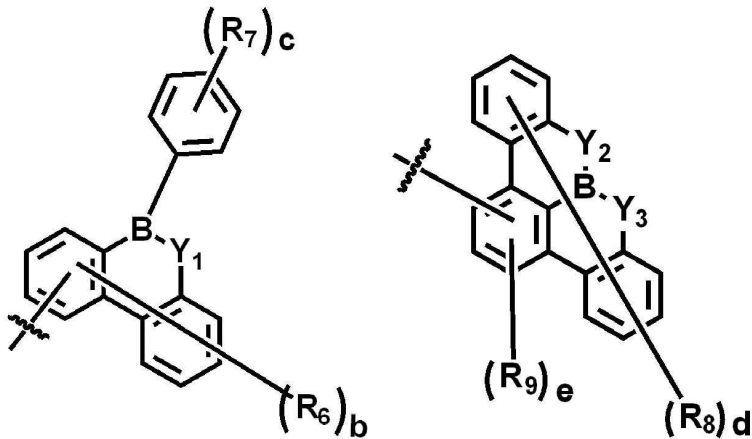
제1 항에 있어서,

상기 전자 공여부는 하기 화학식 1로 표시되고, 상기 전자 수용부는 하기 화학식 2-1 또는 하기 화학식 2-2로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



[화학식 2-1] [화학식 2-2]



상기 화학식 1에서,

R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기이고,

a 는 0 이상 8 이하의 정수이고,

X 는 CR_2R_3 또는 SiR_4R_5 이고,

R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

상기 화학식 2-1 및 상기 화학식 2-2에서,

Y_1 내지 Y_3 은 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

R_6 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 실라이드기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기이고,

b 는 0 이상 7 이하의 정수이고,

c 는 0 이상 5 이하의 정수이고,

d 는 0 이상 8 이하의 정수이고,

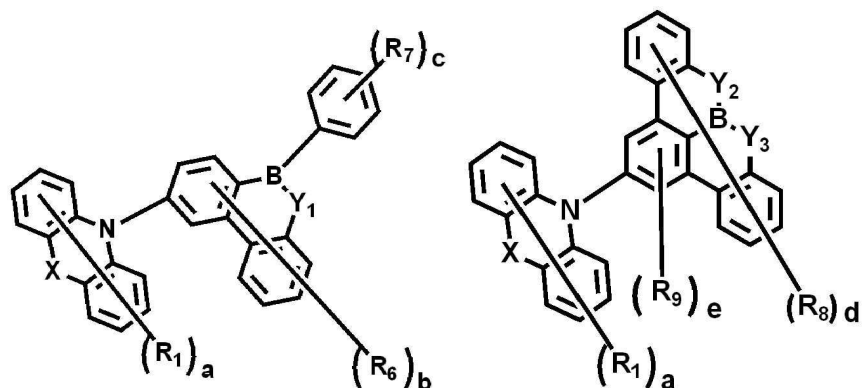
e 는 0 이상 2 이하의 정수이다.

청구항 7

제6 항에 있어서,

상기 다환 화합물은 하기 화학식 3-1 또는 하기 화학식 3-2로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 3-1] [화학식 3-2]



상기 화학식 3-1 및 상기 화학식 3-2에서,

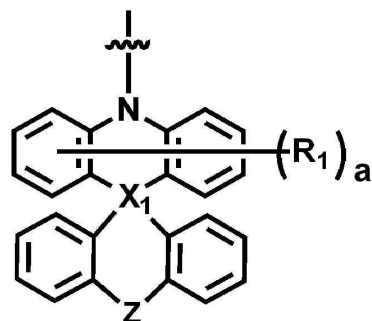
R_1 , X , Y_1 내지 Y_3 , R_6 내지 R_9 , 및 a 내지 e 는 상기 화학식 1, 상기 화학식 2-1, 및 상기 화학식 2-2에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 8

제6 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 4로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

X_1 은 C 또는 Si이고,

Z 는 직접결합, O, 또는 S이고,

R_1 및 a 는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 9

제6 항에 있어서,

Y_2 및 Y_3 은 동일한 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제6 항에 있어서,

R_1 은 수소 원자, 불소 원자, 메틸기, t-부틸기 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴 아

민기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 아크리디닐기인 유기 전계 발광 소자.

청구항 11

제6 항에 있어서,

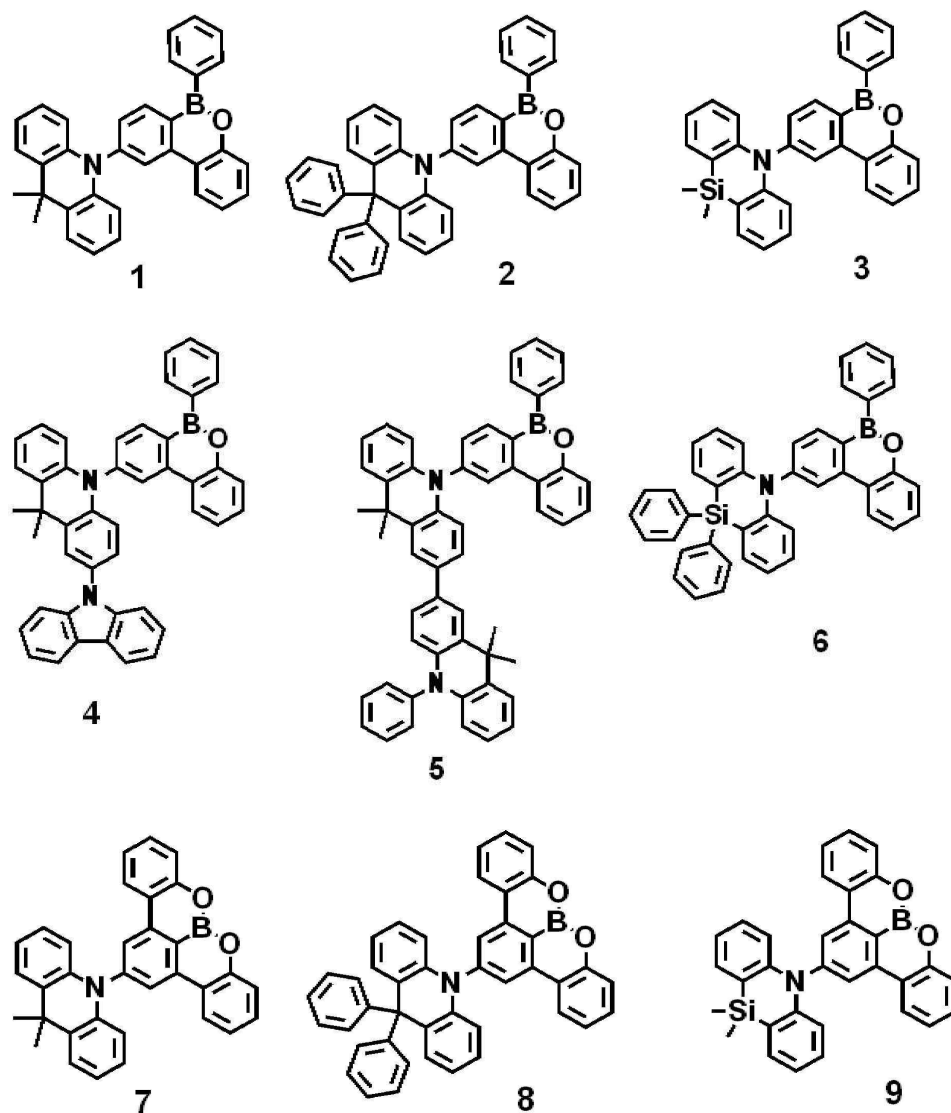
R₂ 내지 R₅는 메틸기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 디벤조스피로 고리를 형성하는 유기 전계 발광 소자.

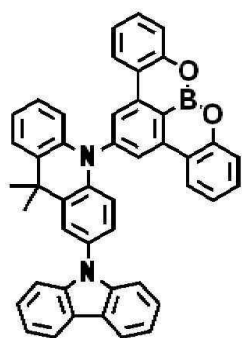
청구항 12

제1 항에 있어서,

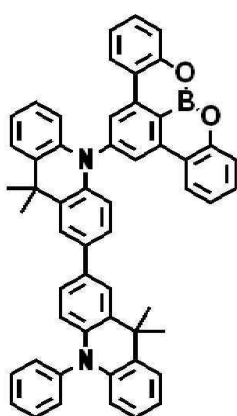
상기 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나를 포함하는 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]

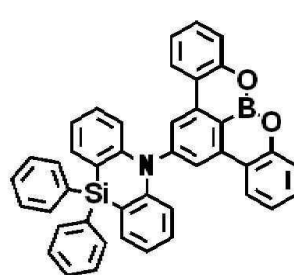




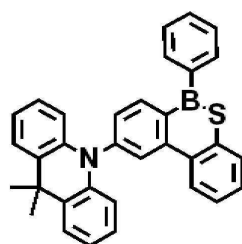
10



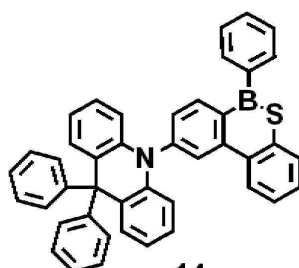
11



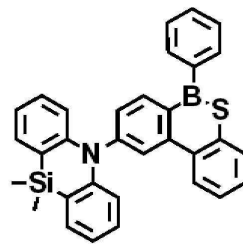
12



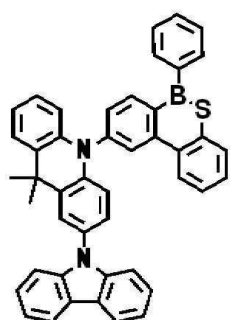
13



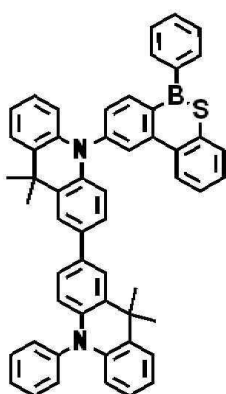
14



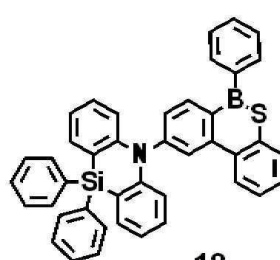
15



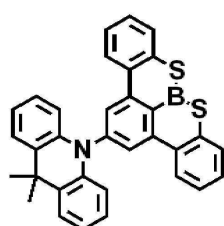
16



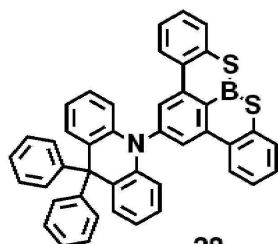
17



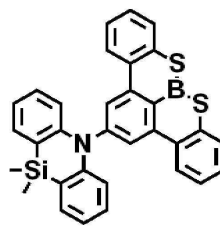
18



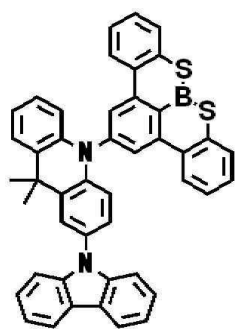
19



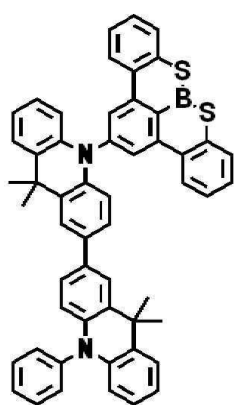
20



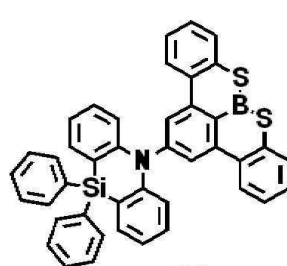
21



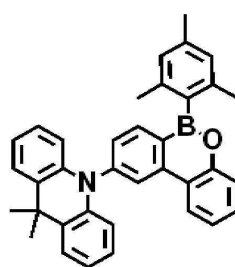
22



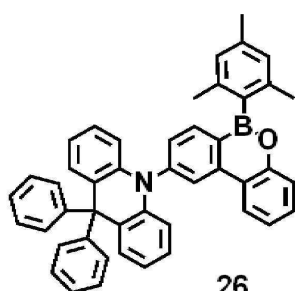
23



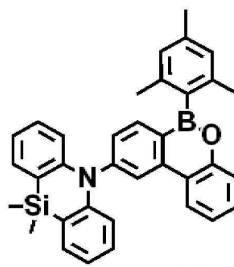
24



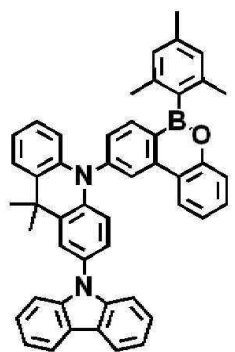
25



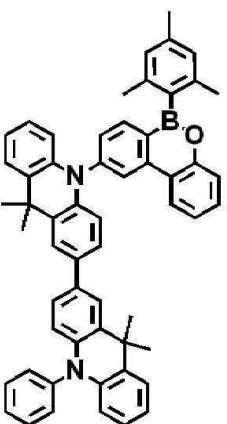
26



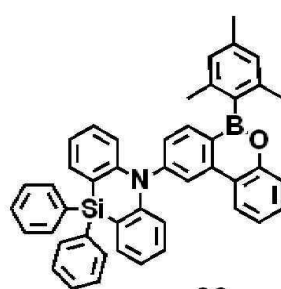
27



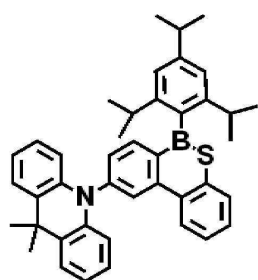
28



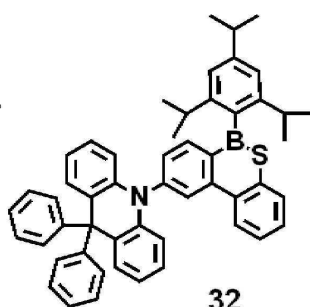
29



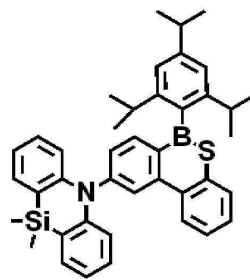
30



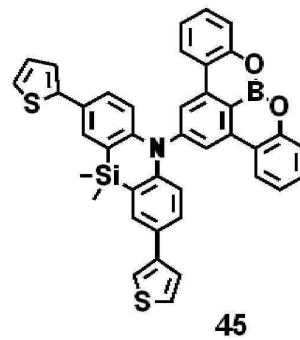
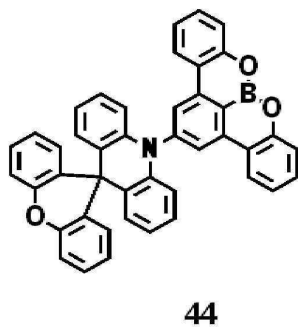
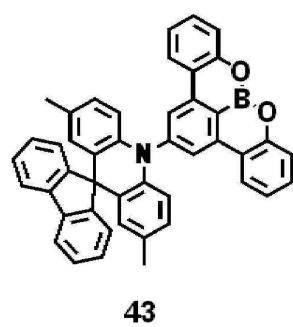
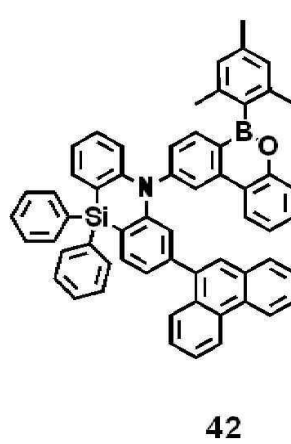
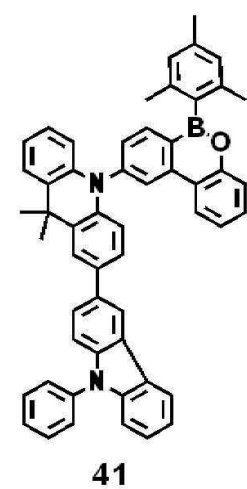
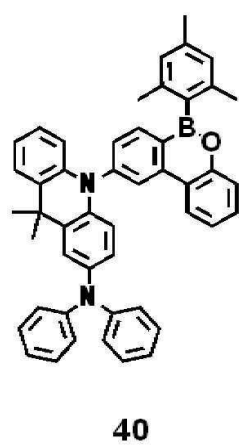
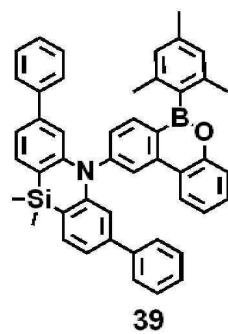
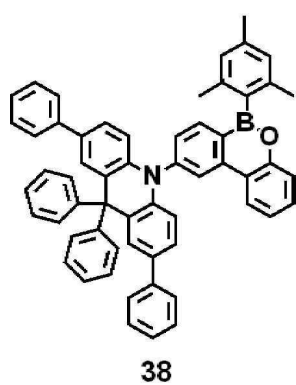
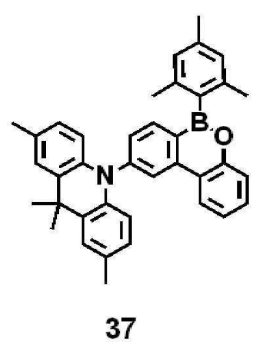
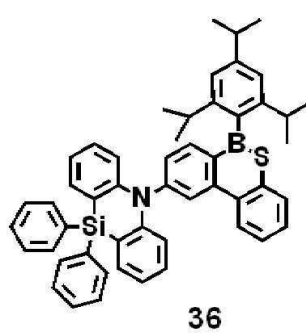
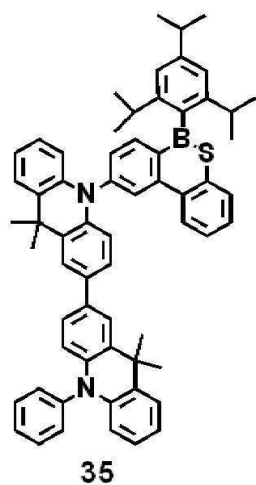
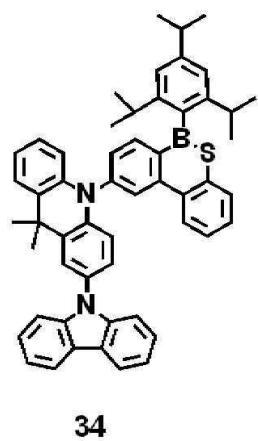
31

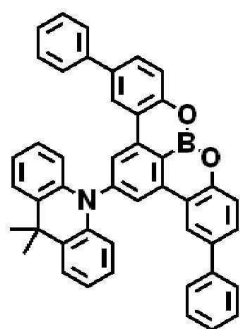


32

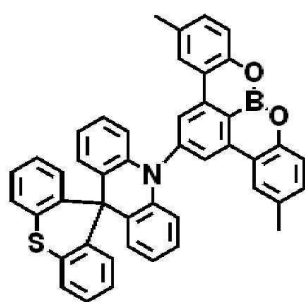


33

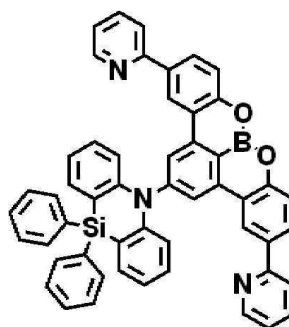




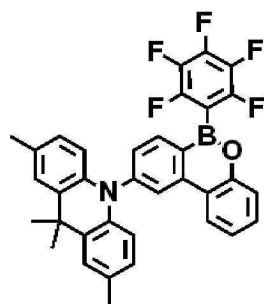
46



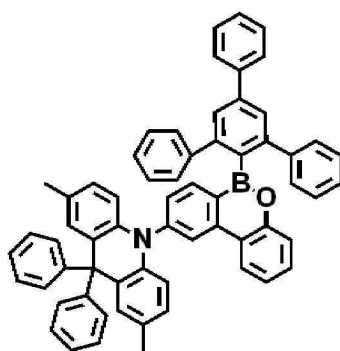
47



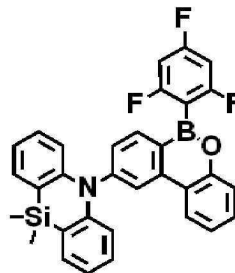
48



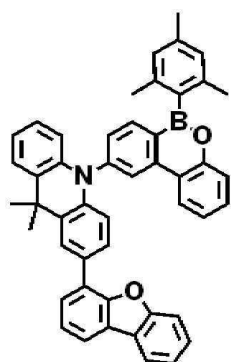
49



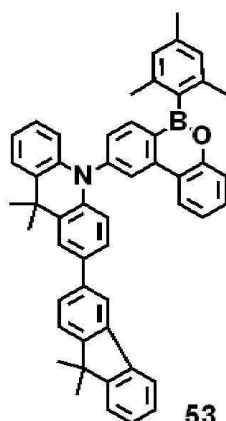
50



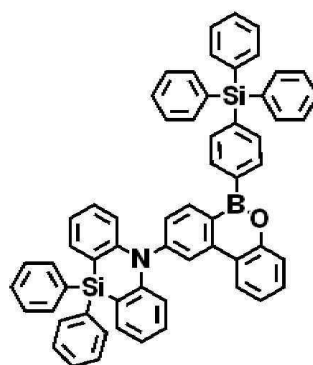
51



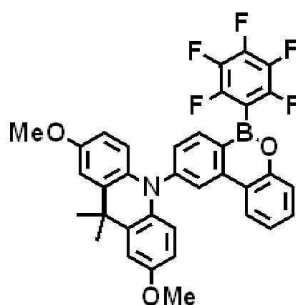
52



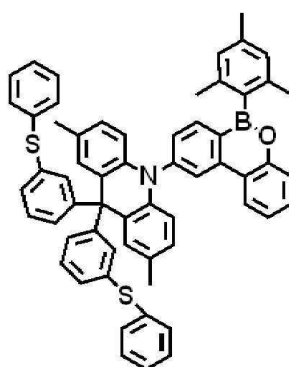
53



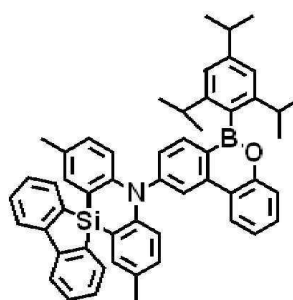
54



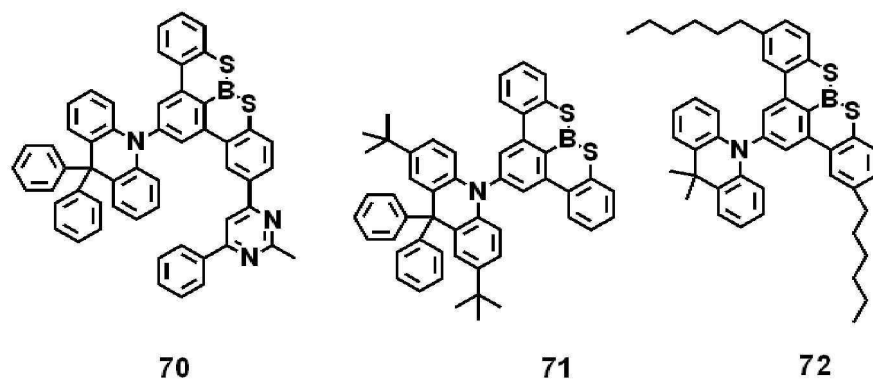
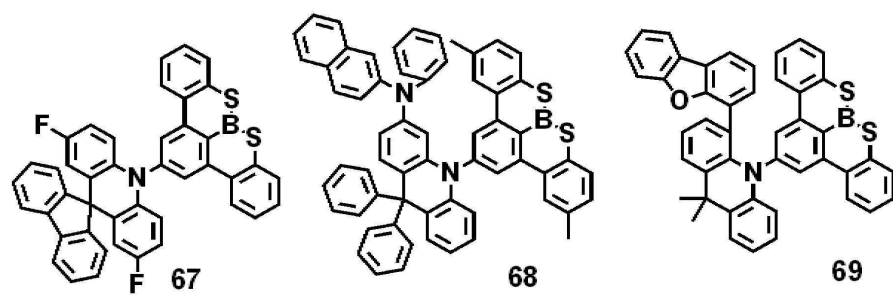
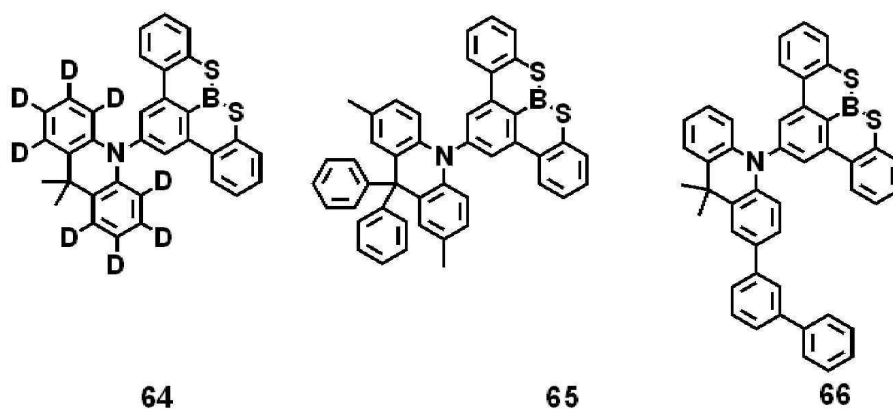
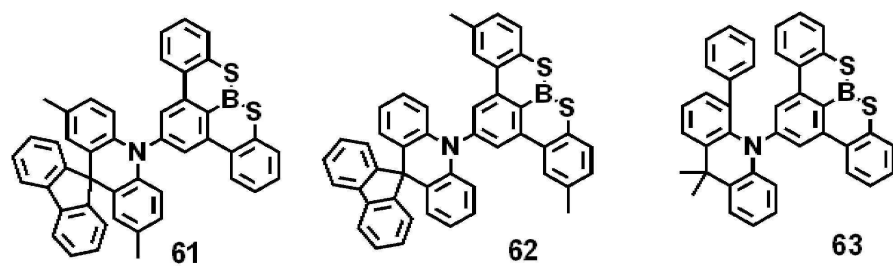
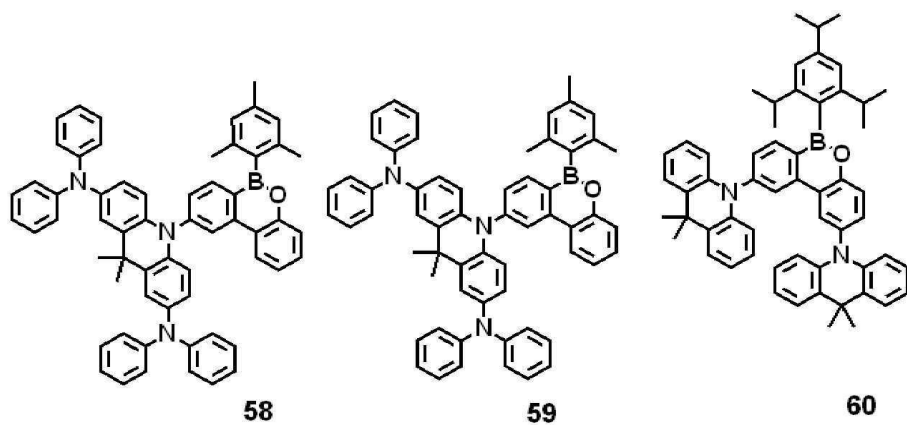
55

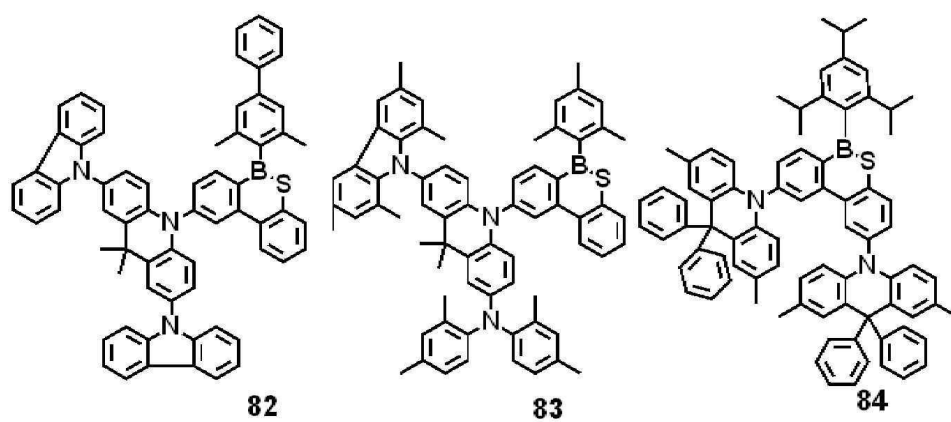
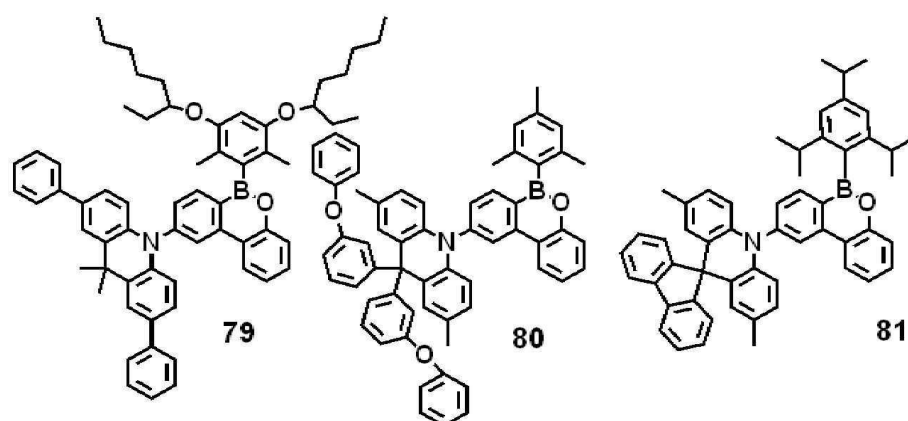
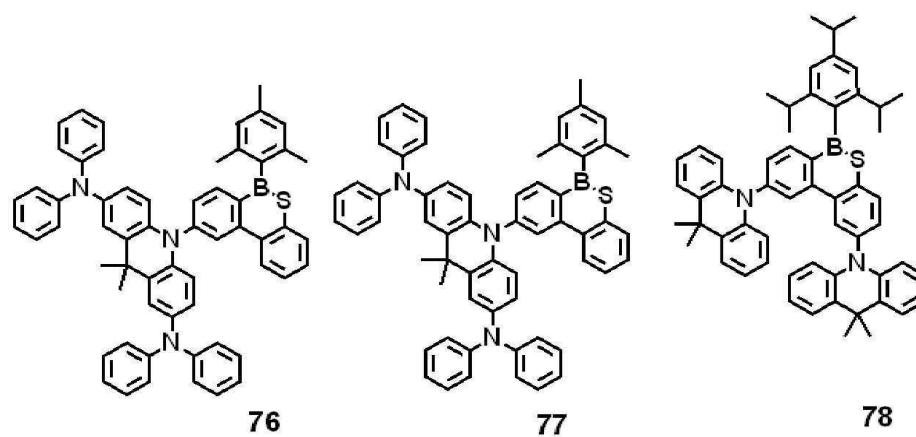
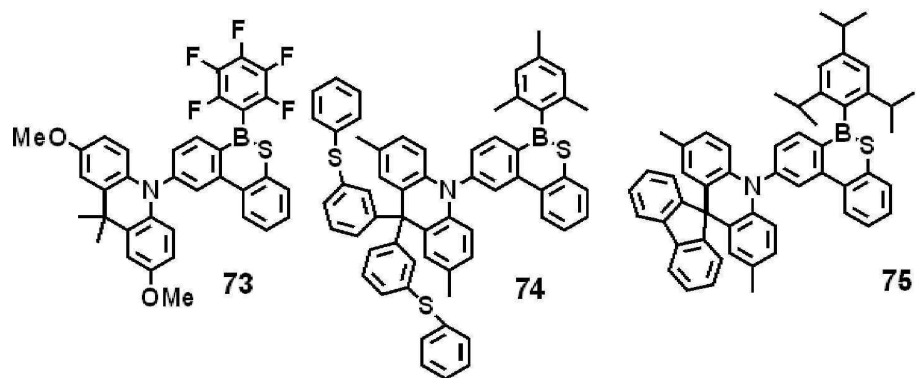


56



57





청구항 13

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 제2 전극; 및

상기 제1 전극 및 상기 제2 전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함하는 복수의 유기층들을 포함하고,

상기 유기층들 중 적어도 하나의 유기층은 하기 화학식 A로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자:

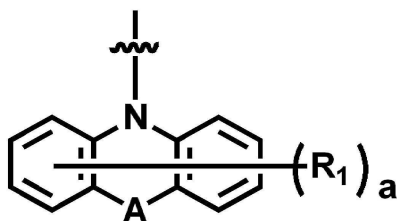
[화학식 A]

DU-AU

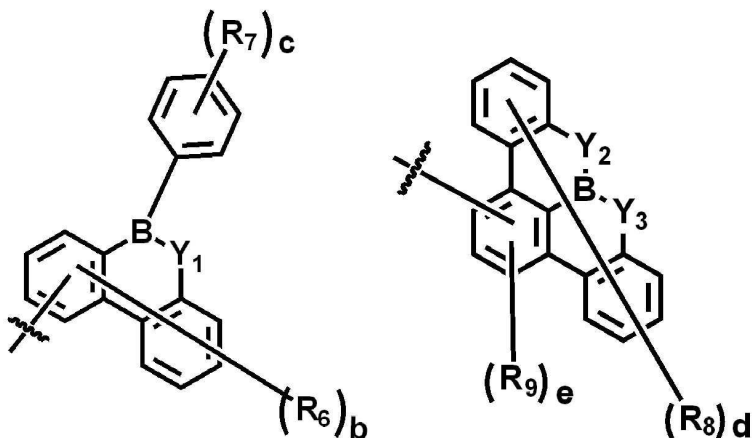
상기 화학식 A에서,

DU는 하기 화학식 1로 표시되고, AU는 하기 화학식 2-1 또는 하기 화학식 2-2로 표시된다:

[화학식 1]



[화학식 2-1] [화학식 2-2]



상기 화학식 1에서,

R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기이고,

a는 0 이상 8 이하의 정수이고,

X는 CR₂R₃ 또는 SiR₄R₅이고,

R₂ 내지 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

상기 화학식 2-1 및 상기 화학식 2-2에서,

Y₁ 내지 Y₃은 각각 독립적으로 0 또는 S이고,

R₆ 내지 R₉는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 설파이드기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기고,

b는 0 이상 7 이하의 정수이고,

c는 0 이상 5 이하의 정수이고,

d는 0 이상 8 이하의 정수이고,

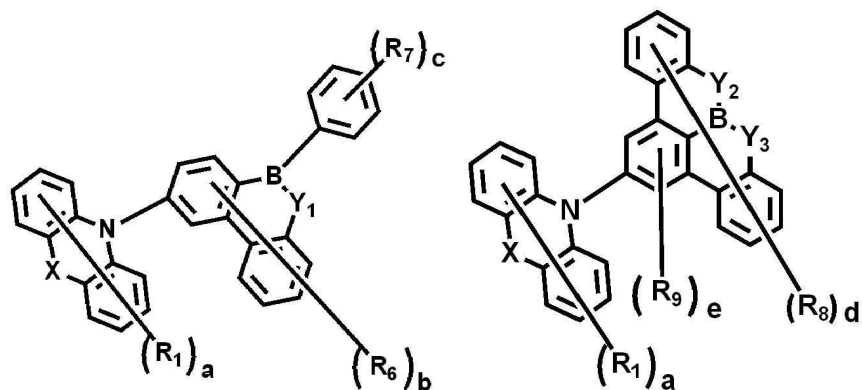
e는 0 이상 2 이하의 정수이다.

청구항 14

제13 항에 있어서,

상기 다환 화합물은 하기 화학식 3-1 또는 하기 화학식 3-2로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 3-1] [화학식 3-2]



상기 화학식 3-1 및 상기 화학식 3-2에서,

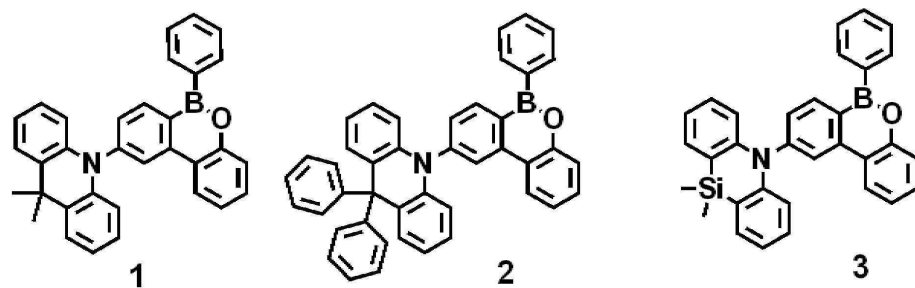
R₁, X, Y₁ 내지 Y₃, R₆ 내지 R₉, 및 a 내지 e는 상기 화학식 1, 상기 화학식 2-1, 및 상기 화학식 2-2에서 정의한 바와 동일하다.

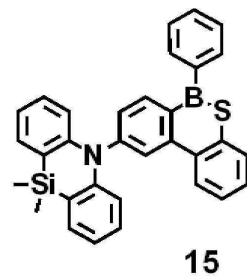
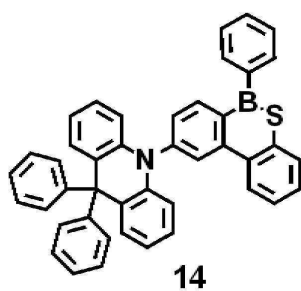
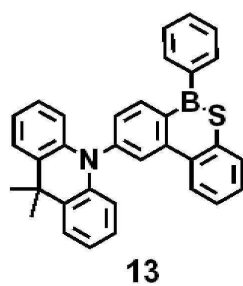
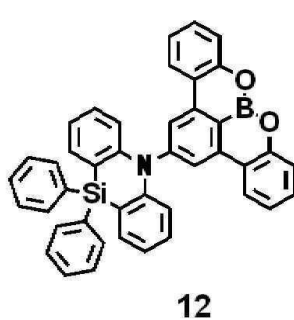
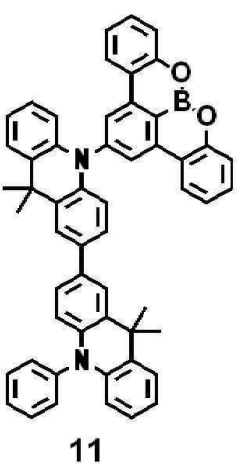
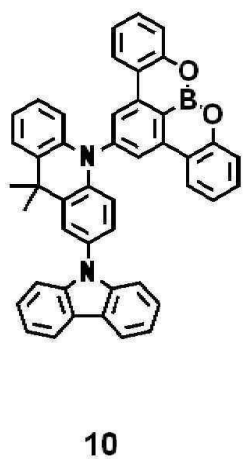
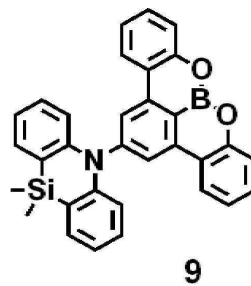
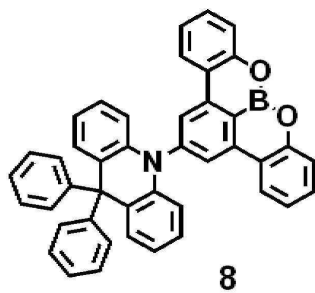
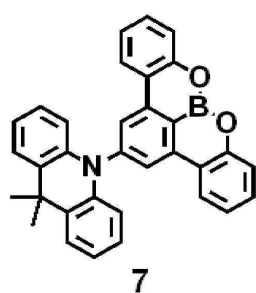
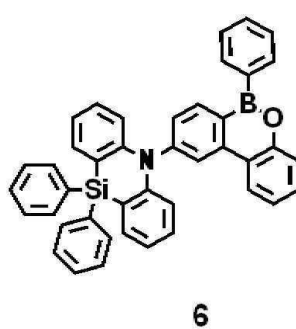
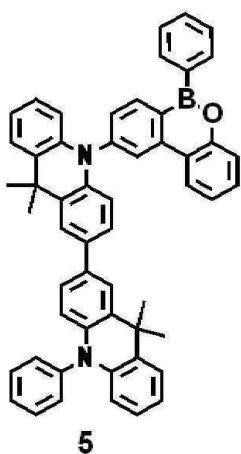
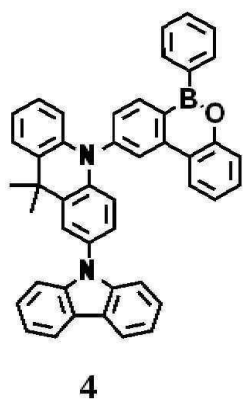
청구항 15

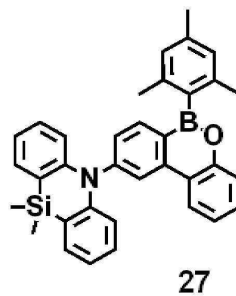
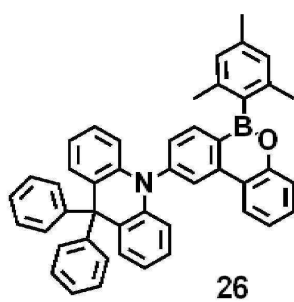
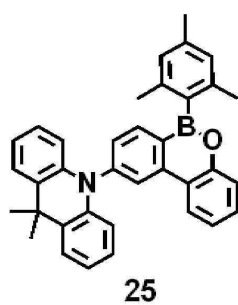
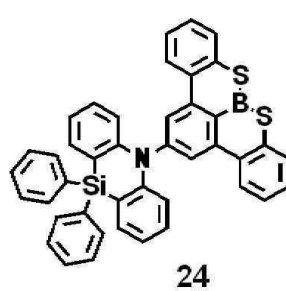
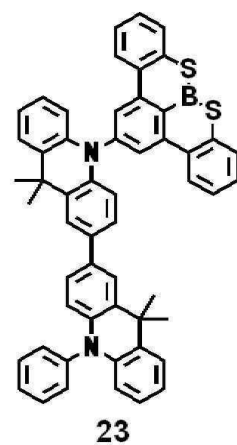
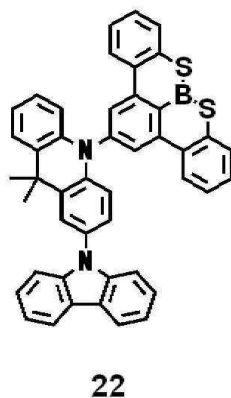
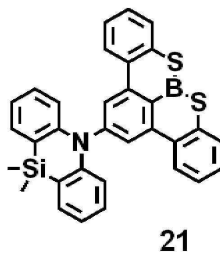
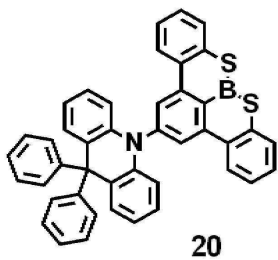
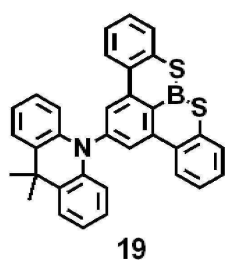
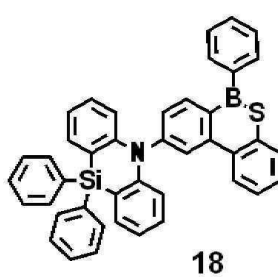
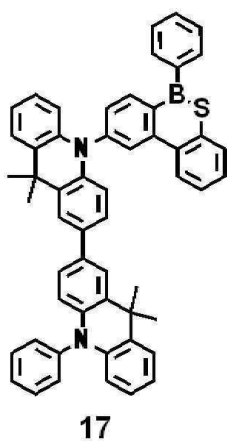
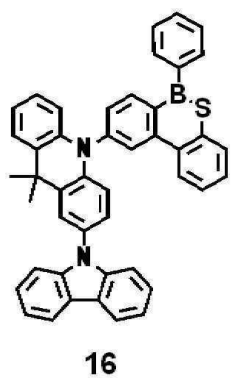
제13 항에 있어서,

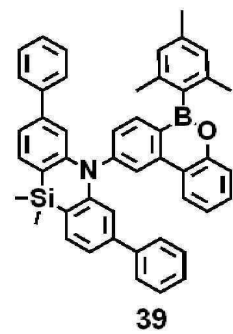
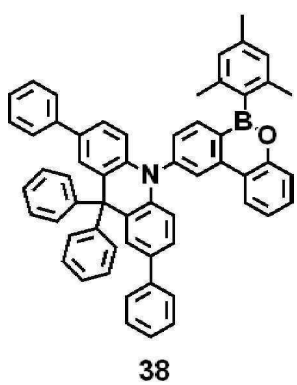
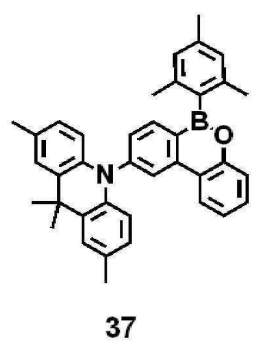
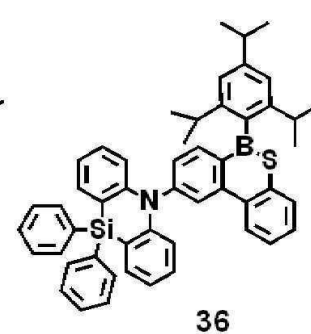
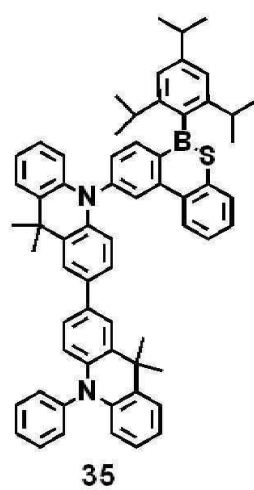
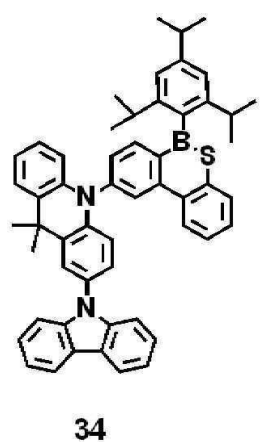
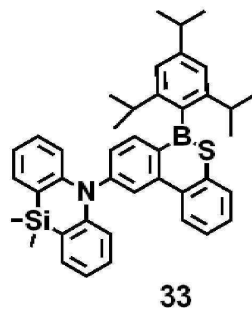
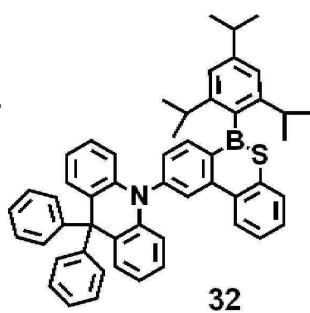
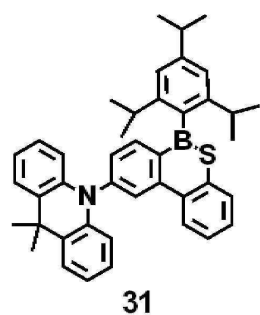
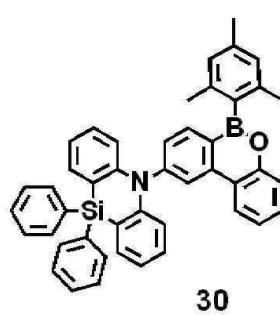
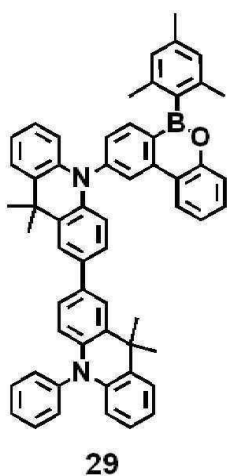
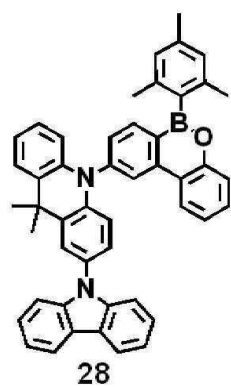
상기 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나를 포함하는 유기 전계 발광 소자:

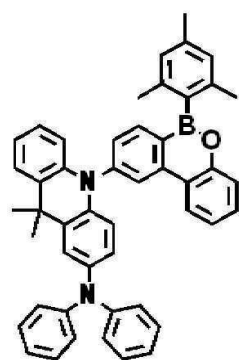
[화합물군 1]



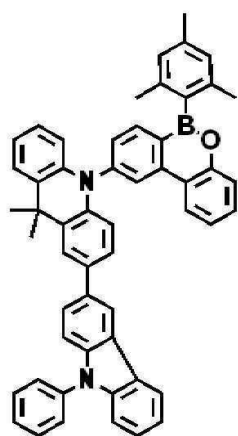




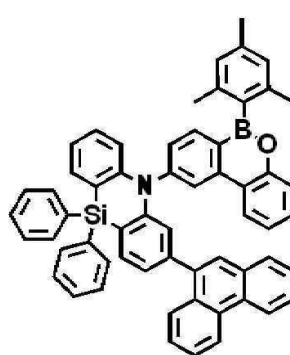




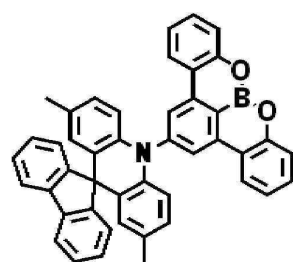
40



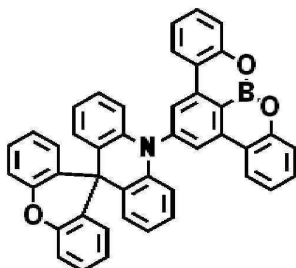
41



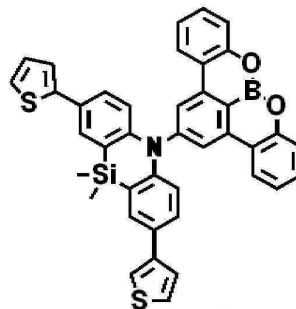
42



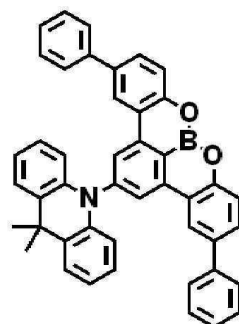
43



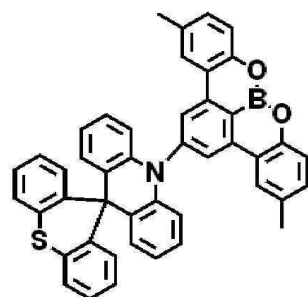
44



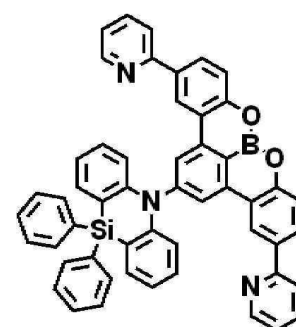
45



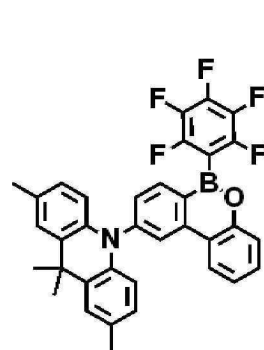
46



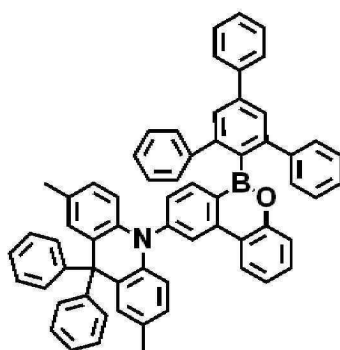
47



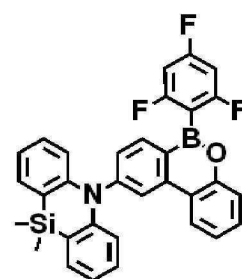
48



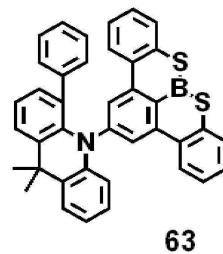
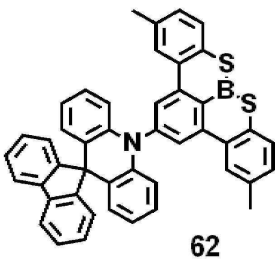
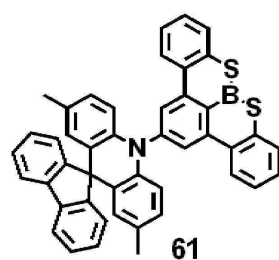
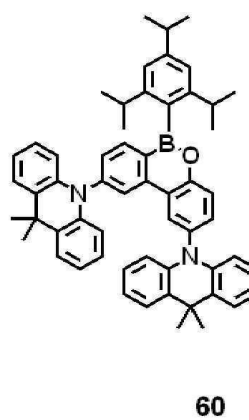
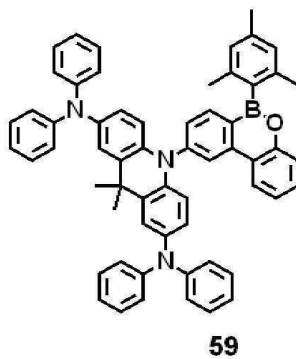
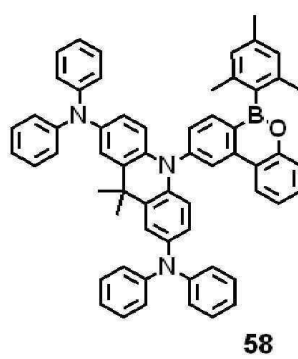
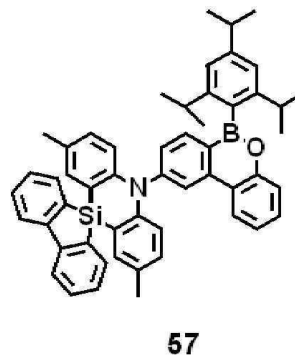
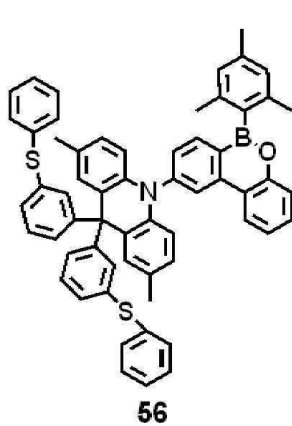
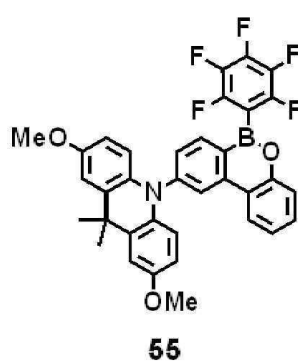
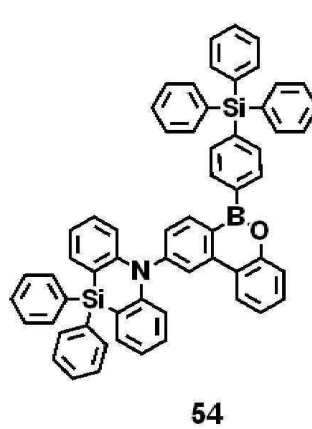
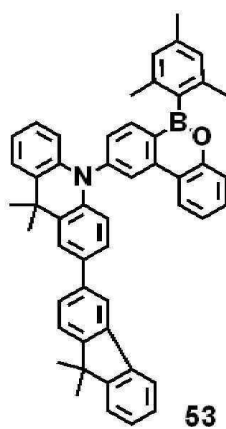
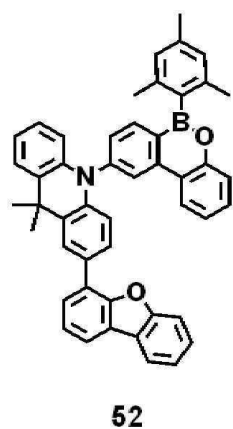
49

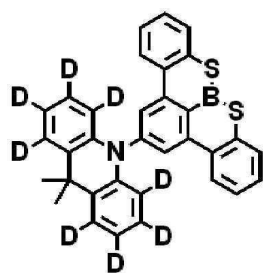


50

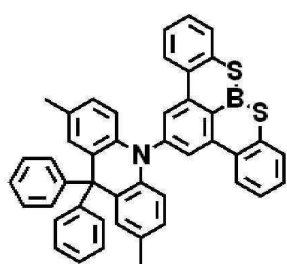


51

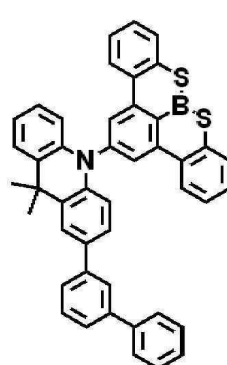




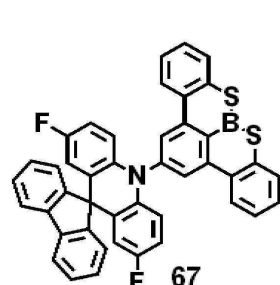
64



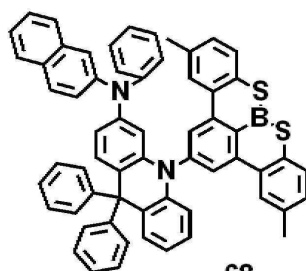
65



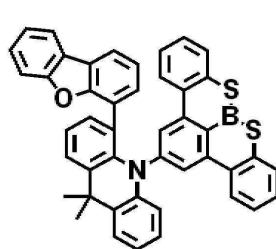
66



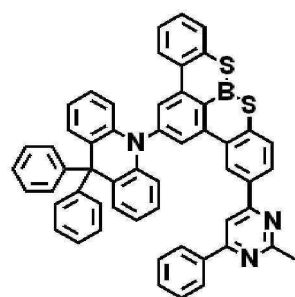
67



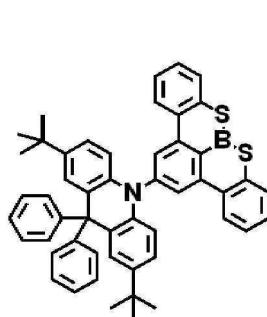
68



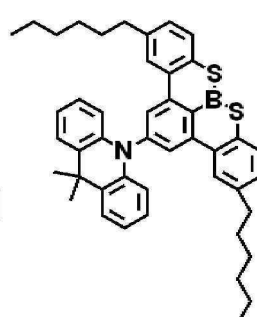
69



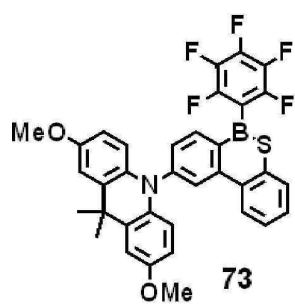
70



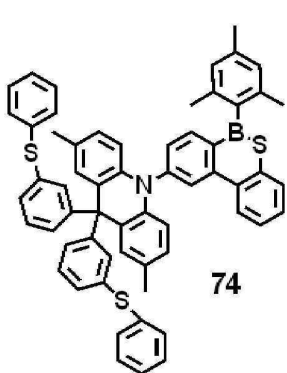
71



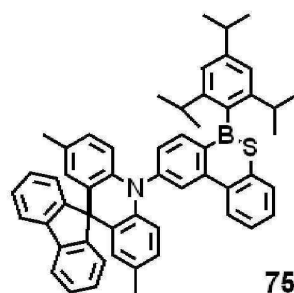
72



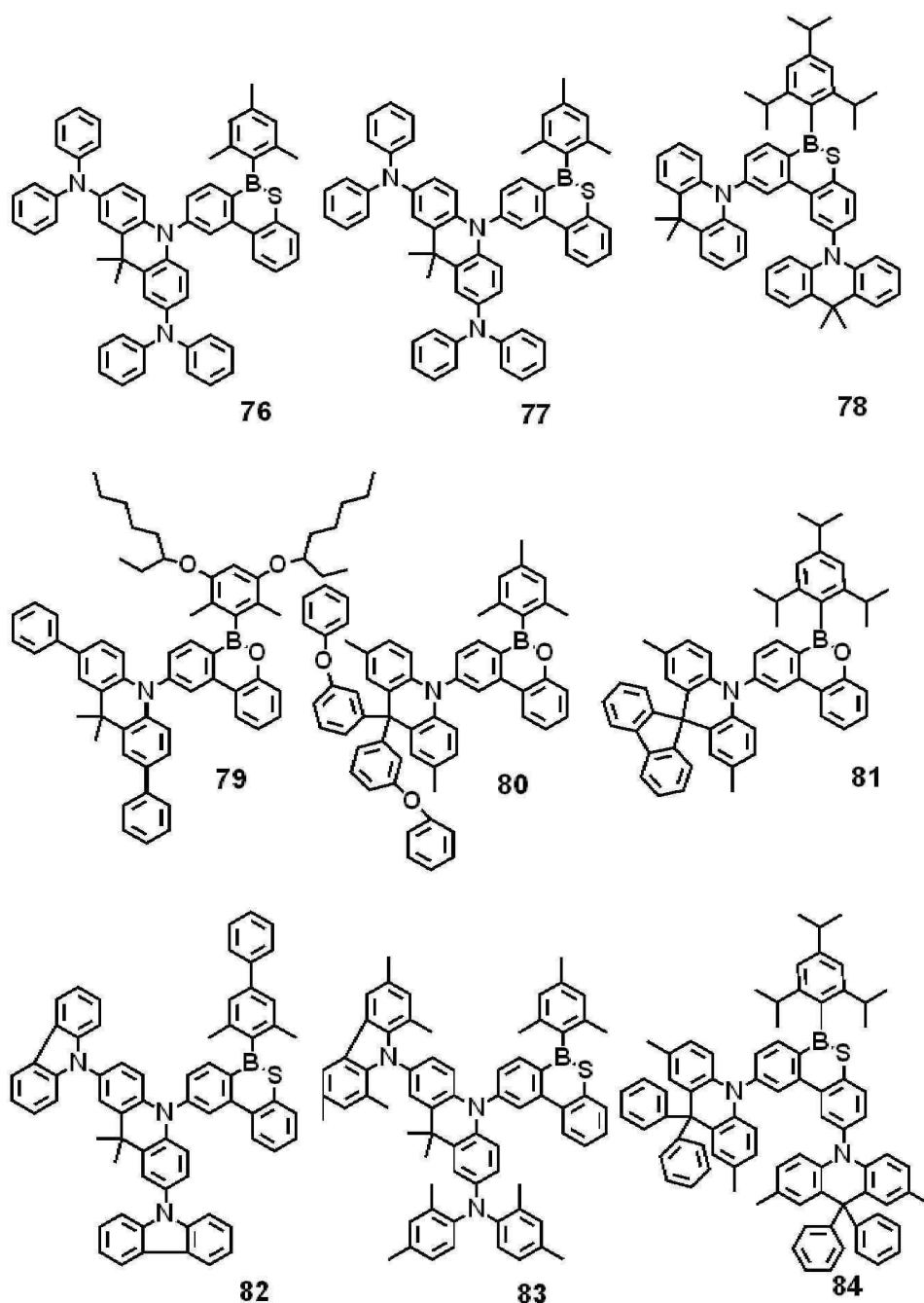
73



74



75



청구항 16

하기 화학식 A로 표시되는 다환 화합물:

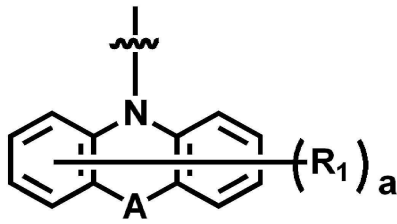
[화학식 A]

DU-AU

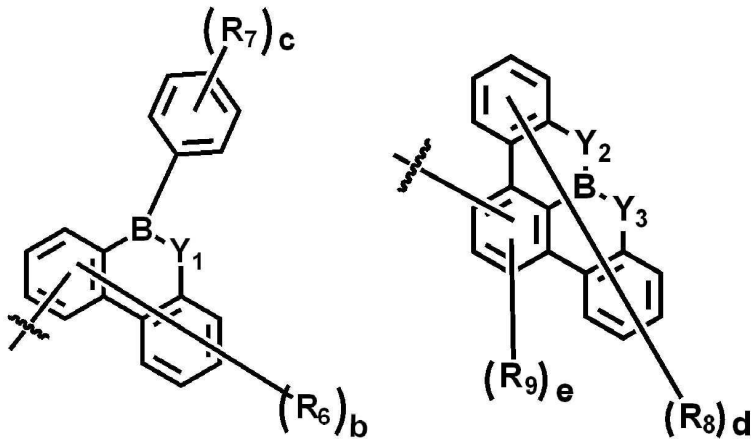
상기 화학식 A에서,

DU는 하기 화학식 1로 표시되고, AU는 하기 화학식 2-1 또는 하기 화학식 2-2로 표시된다:

[화학식 1]



[화학식 2-1] [화학식 2-2]



상기 화학식 1에서,

R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기고,

a 는 0 이상 8 이하의 정수이고,

X 는 CR_2R_3 또는 SiR_4R_5 이고,

R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

상기 화학식 2-1 및 상기 화학식 2-2에서,

Y_1 내지 Y_3 은 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

R_6 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 실라이드기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기고,

b 는 0 이상 7 이하의 정수이고,

c 는 0 이상 5 이하의 정수이고,

d 는 0 이상 8 이하의 정수이고,

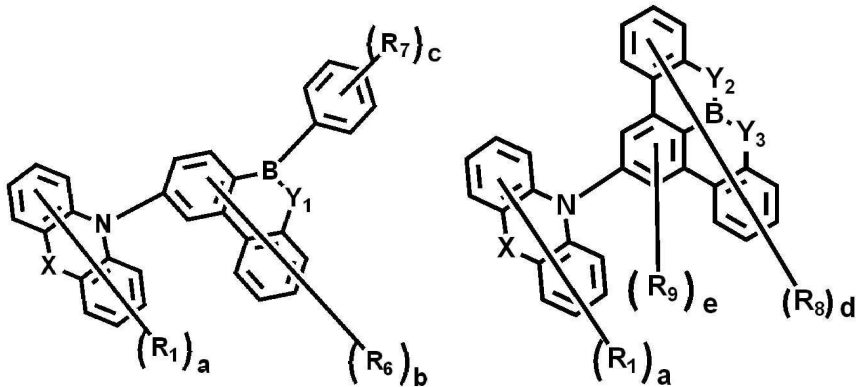
e 는 0 이상 2 이하의 정수이다.

청구항 17

제16 항에 있어서,

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

[화학식 3-1] [화학식 3-2]



상기 화학식 3-1 및 상기 화학식 3-2에서,

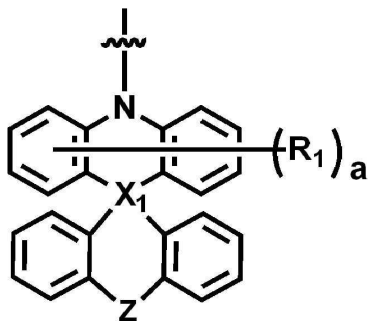
R_1 , X , Y_1 내지 Y_3 , R_6 내지 R_9 , 및 a 내지 e 는 상기 화학식 1, 상기 화학식 2-1, 및 상기 화학식 2-2에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 18

제16 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 4로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

X_1 은 C 또는 Si이고,

Z 는 직접결합, O, 또는 S이고,

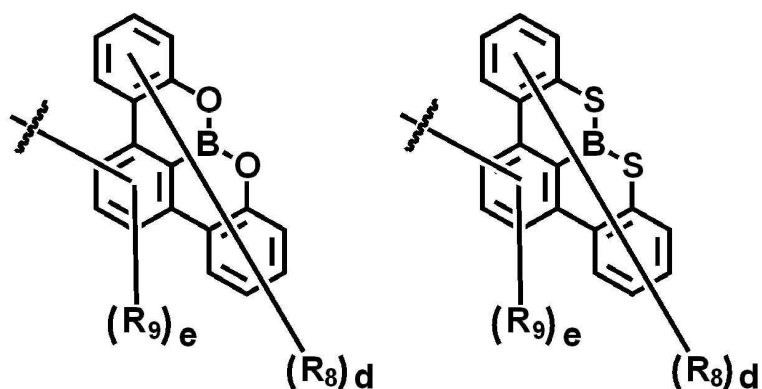
R_1 및 a 는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 19

제16 항에 있어서,

상기 화학식 2-2는 하기 화학식 5-1 및 하기 화학식 5-2로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 5-1] [화학식 5-2]



상기 화학식 5-1 및 상기 화학식 5-2에서,

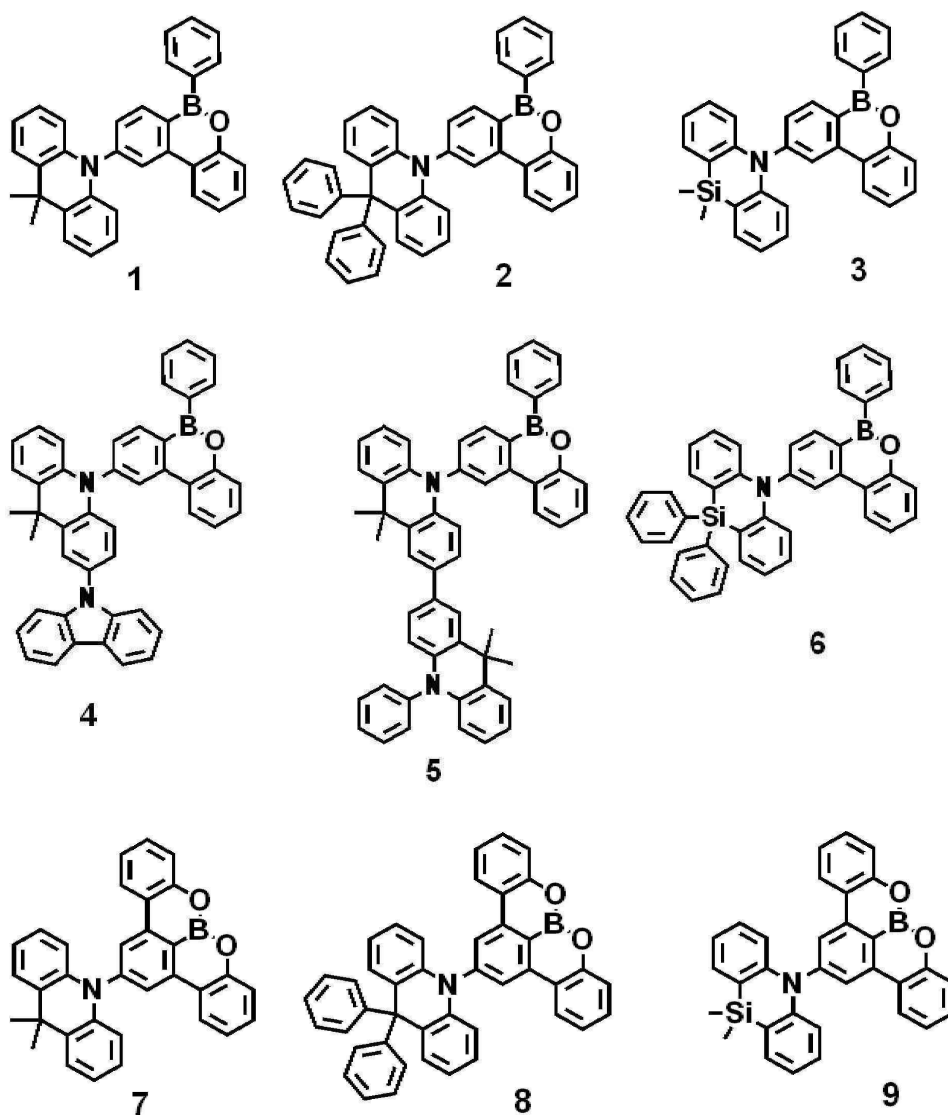
R_8 , R_9 , d , 및 e 는 상기 화학식 2-2에서 정의한 바와 동일하다.

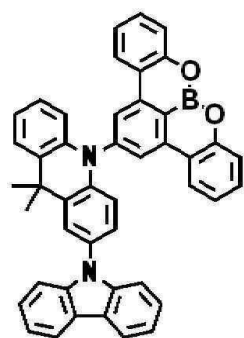
청구항 20

제16 항에 있어서,

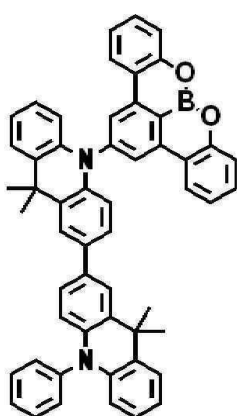
상기 화학식 A는 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 다환 화합물:

[화합물군 1]

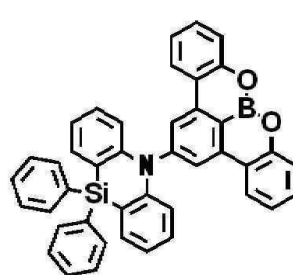




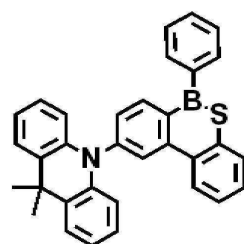
10



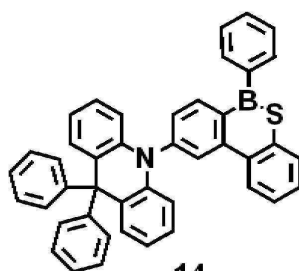
11



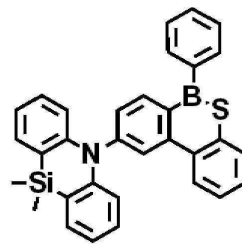
12



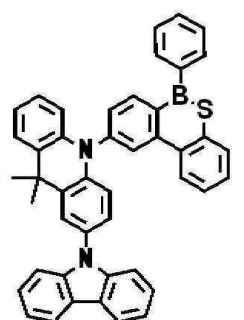
13



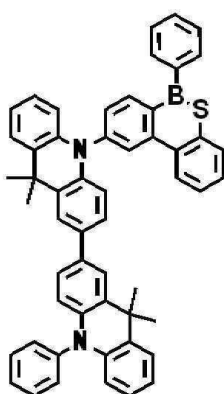
14



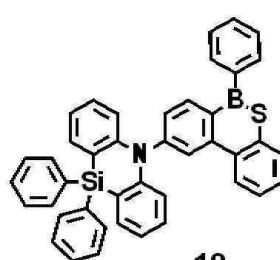
15



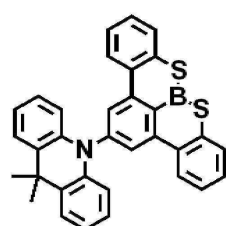
16



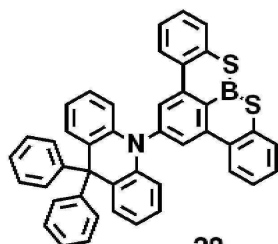
17



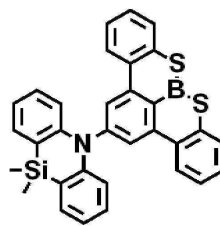
18



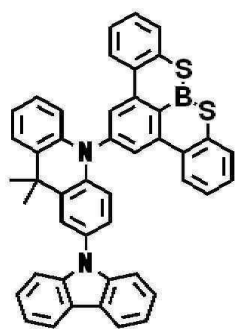
19



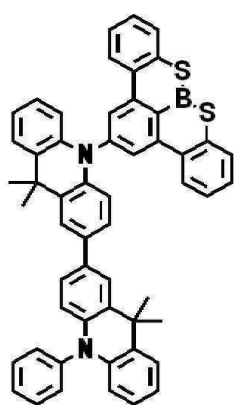
20



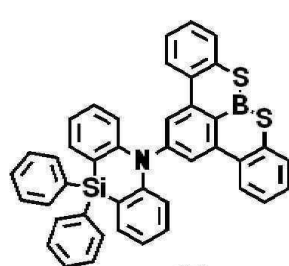
21



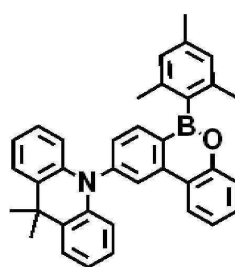
22



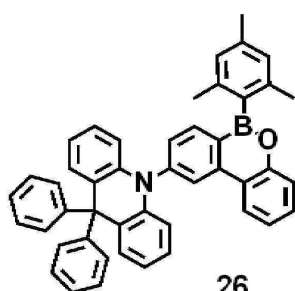
23



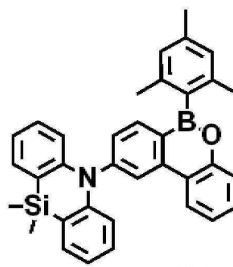
24



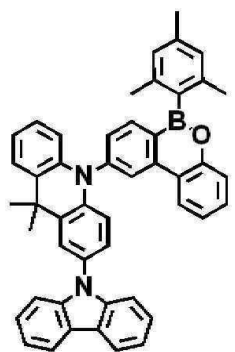
25



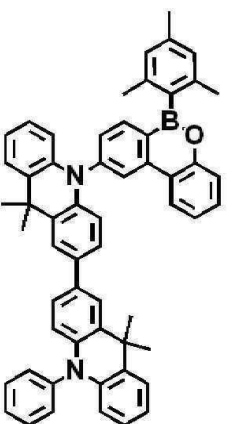
26



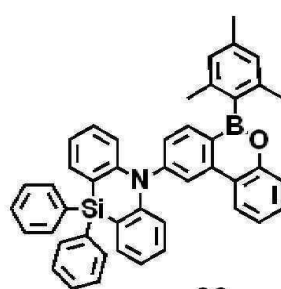
27



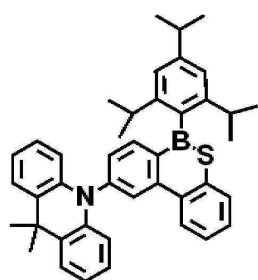
28



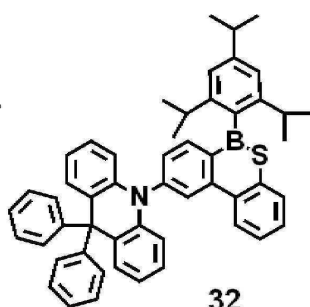
29



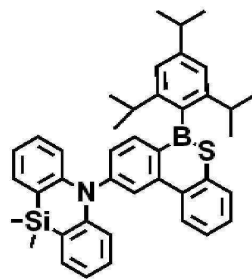
30



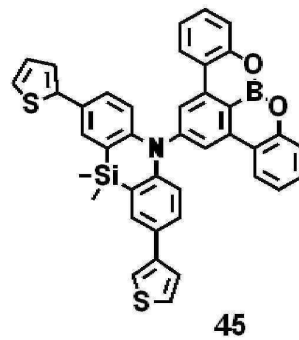
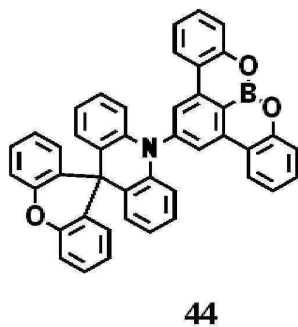
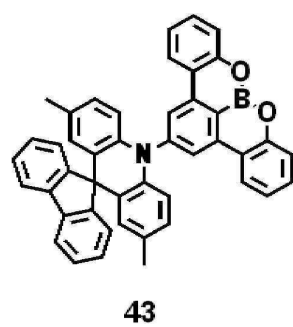
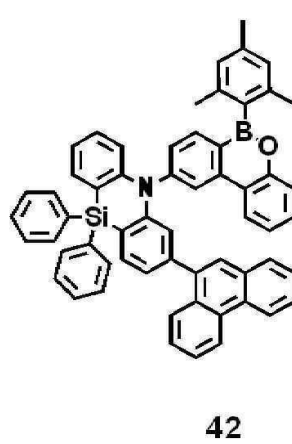
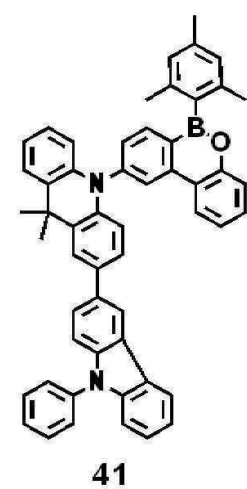
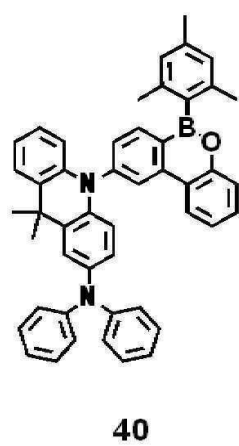
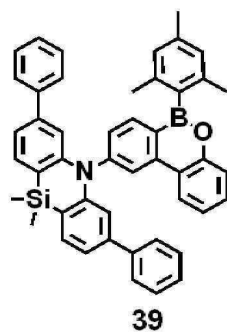
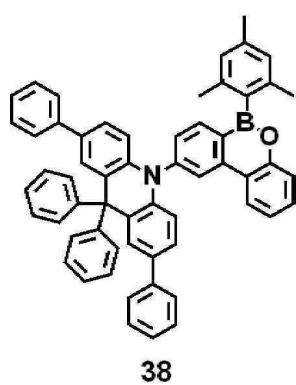
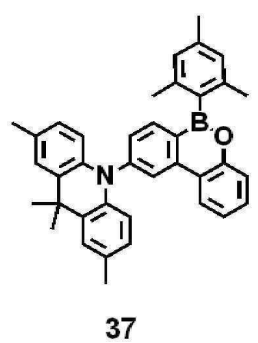
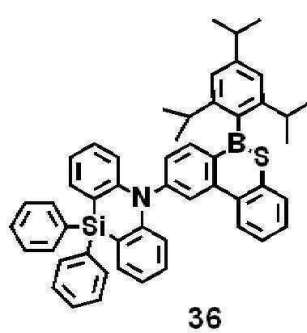
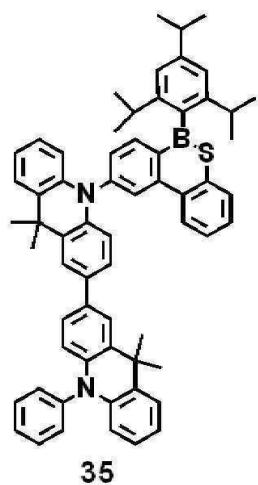
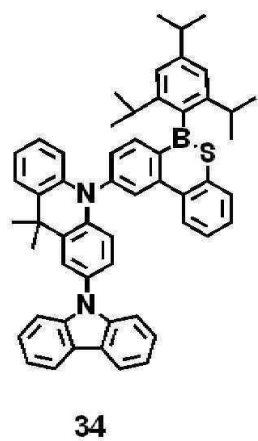
31

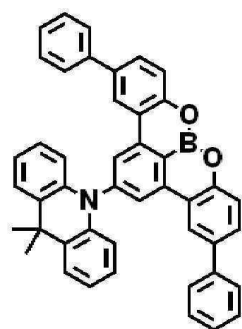


32

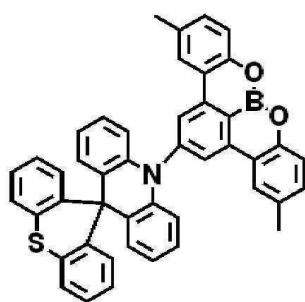


33

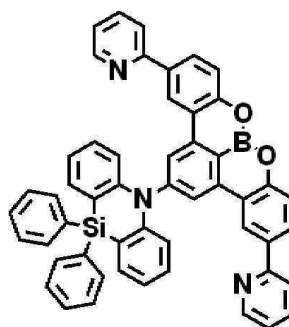




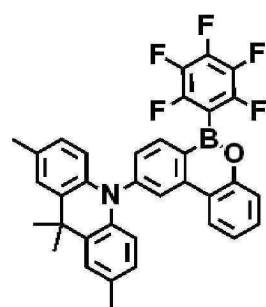
46



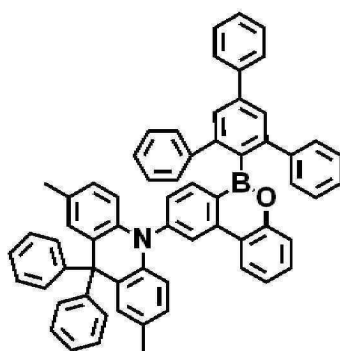
47



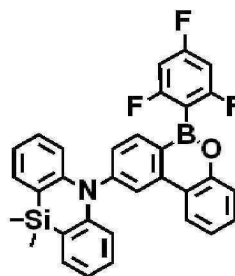
48



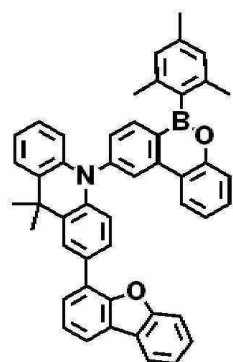
49



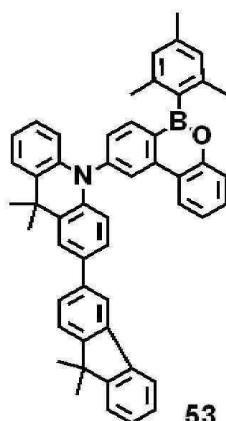
50



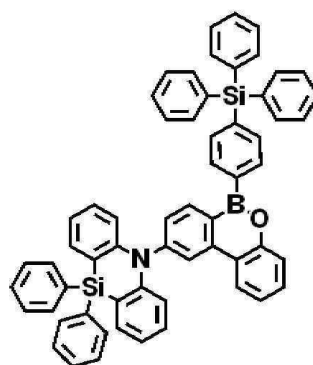
51



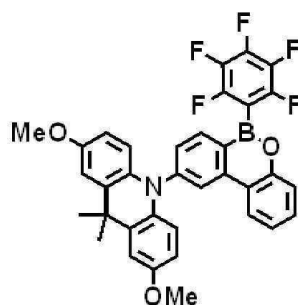
52



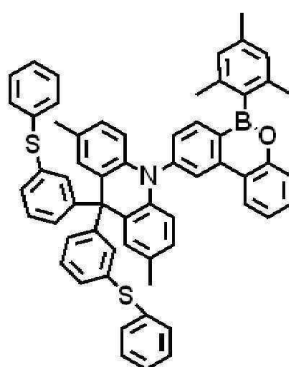
53



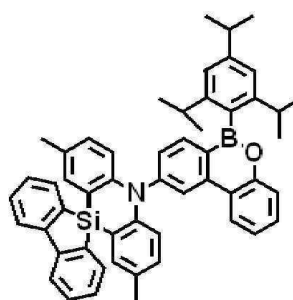
54



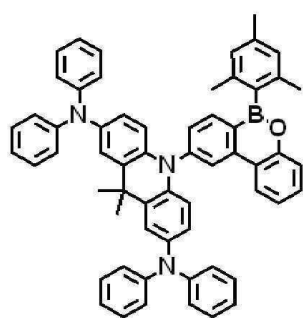
55



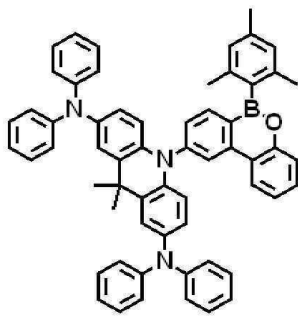
56



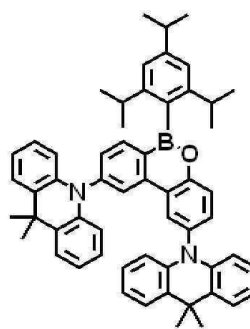
57



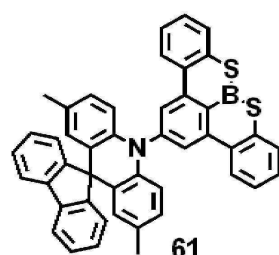
58



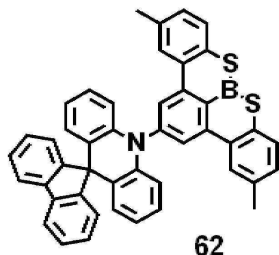
59



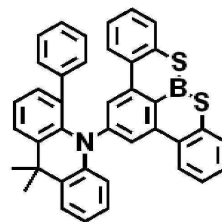
60



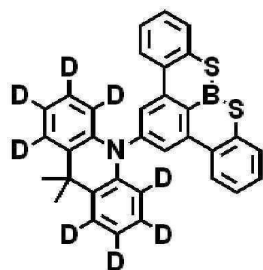
61



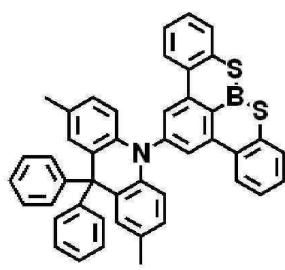
62



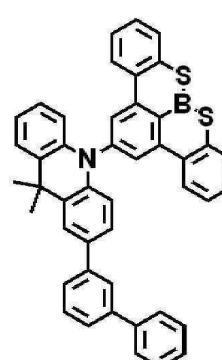
63



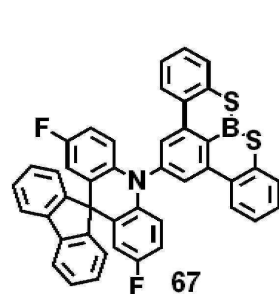
64



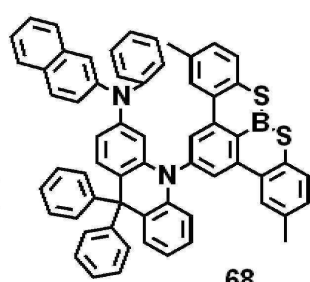
65



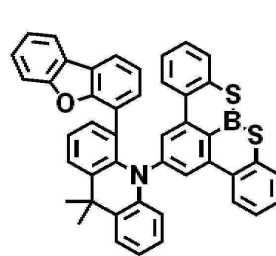
66



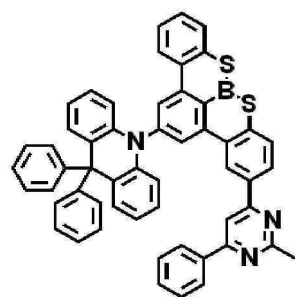
67



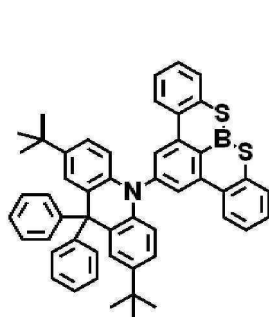
68



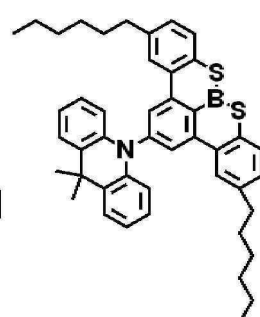
69



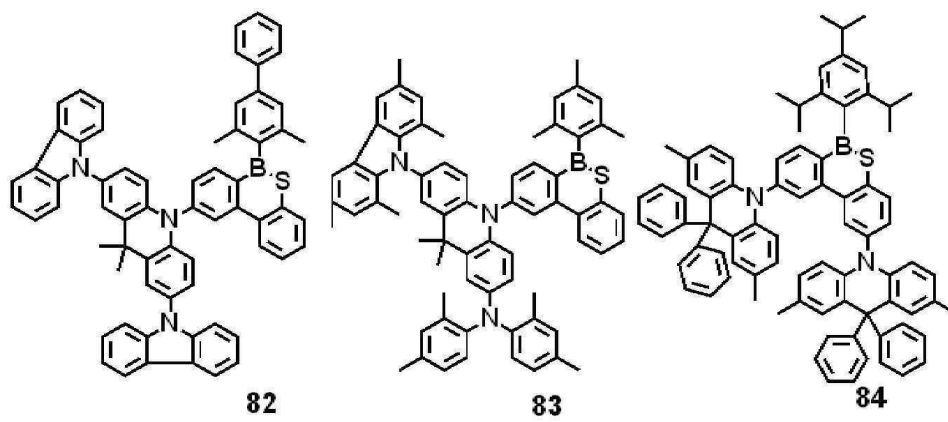
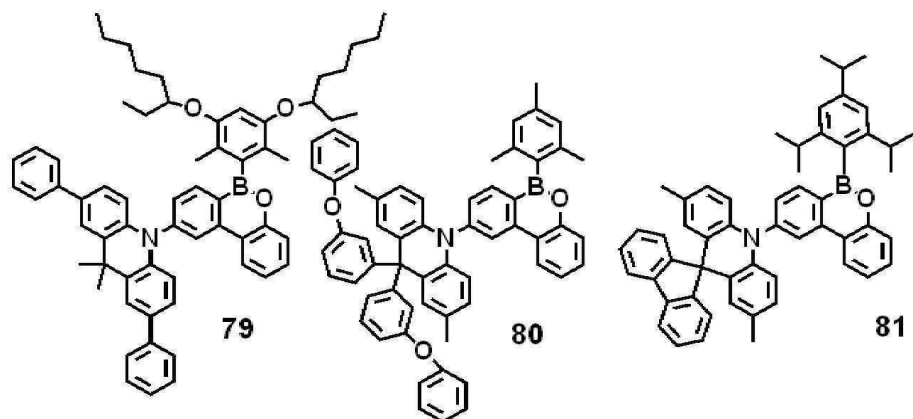
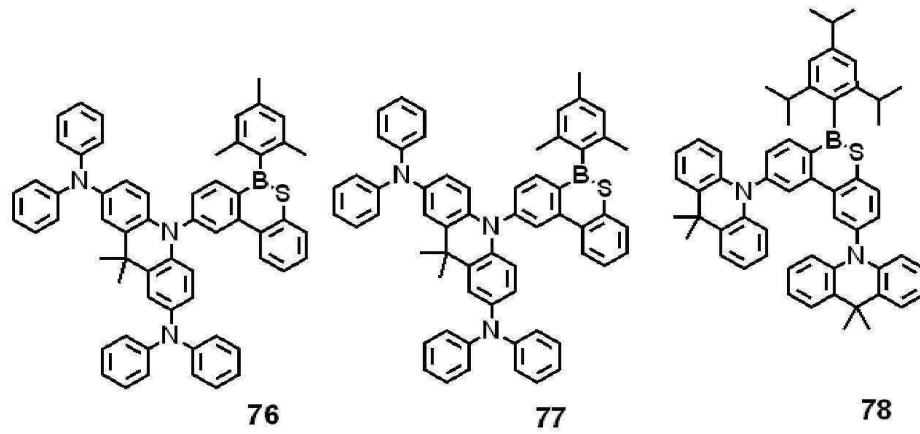
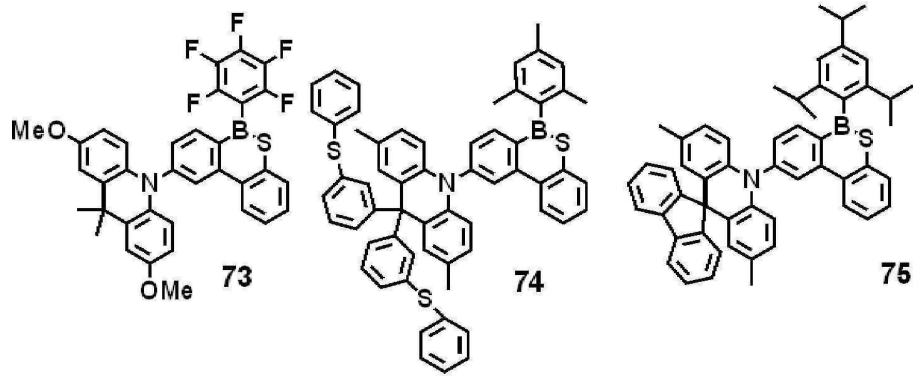
70



71



72



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.

[0004] 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)을 이용한 지연 형광 발광에 대한 기술이 개발되고 있다. 특히, 일중항과 삼중항의 에너지 차이가 작고 HOMO와 LUMO의 중첩이 적어 지연 형광 현상을 발생시킬 수 있는 열 활성화 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 재료에 대한 개발이 활발하게 진행되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

[0006] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 복수의 유기층들을 포함할 수 있다. 제2 전극은 제1 전극 상에 배치될 수 있다. 복수의 유기층들은 제1 전극 및 제2 전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함할 수 있다.

[0007] 발광층은 전자 공여부 및 전자 공여부와 결합된 전자 수용부를 포함하는 다환 화합물을 포함할 수 있다. 전자 공여부는 아크리딘 유도체 또는 디벤조 아자실린 유도체를 포함하고, 전자 수용부는 고리 형성 원자로 B, 및 B와 직접 결합하는 O 또는 S를 포함하며, 세 개 또는 다섯 개의 육각 고리가 축합된 헤테로고리기를 포함할 수 있다.

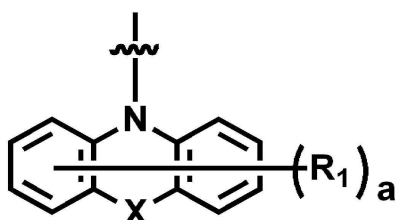
[0008] 전자 수용부는 디벤조 티아보리닌 유도체 또는 디벤조 옥사보리닌 유도체를 포함할 수 있다.

[0009] 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 도펀트가 일 실시예의 다환 화합물을 포함할 수 있다. 일 실시예의 다환 화합물의 일중항 에너지 준위와 삼중항 에너지 준위의 차이(ΔE_{ST})는 0.2eV 이하일 수 있다.

[0010] 일 실시예에서, 발광층은 440nm 이상 500nm 이하의 파장영역의 광을 발광할 수 있다.

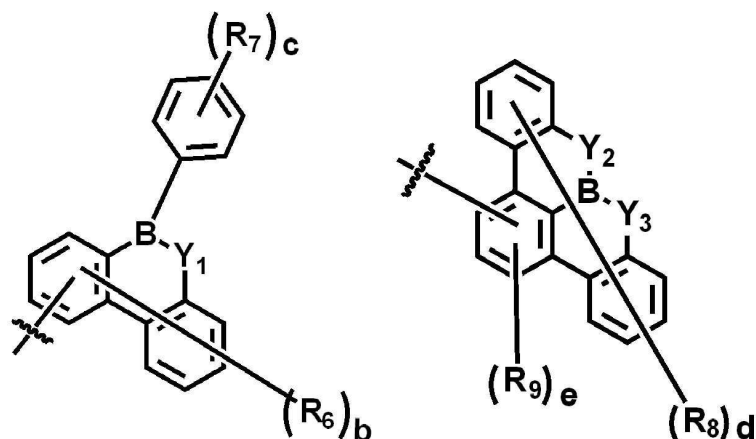
[0011] 전자 공여부는 하기 화학식 1로 표시되고, 전자 수용부는 하기 화학식 2-1 또는 하기 화학식 2-2로 표시될 수 있다.

[0012] [화학식 1]



[0013]

[0014] [화학식 2-1] [화학식 2-2]



[0015]

[0016] 화학식 1에서, R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. a 는 0 이상 8 이하의 정수일 수 있다.

[0017] X 는 CR_2R_3 또는 SiR_4R_5 일 수 있다. R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

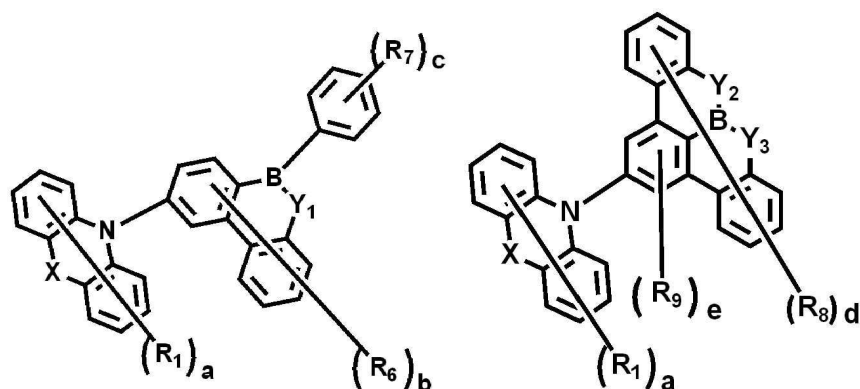
[0018] 보다 구체적으로, R_1 은 수소 원자, 불소 원자, 메틸기, t -부틸기 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 아크리디닐기일 수 있다.

[0019] R_2 내지 R_5 는 메틸기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 디벤조스피로 고리를 형성할 수 있다.

[0020] 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서, Y_1 내지 Y_3 은 각각 독립적으로 0 또는 S일 수 있다. 구체적으로, Y_2 및 Y_3 은 동일한 것일 수 있다. R_6 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 설파이드기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. b 는 0 이상 7 이하의 정수이고, c 는 0 이상 5 이하의 정수이고, d 는 0 이상 8 이하의 정수이고, e 는 0 이상 2 이하의 정수일 수 있다.

[0021] 일 실시예에서, 다환 화합물은 하기 화학식 3-1 또는 하기 화학식 3-2로 표시될 수 있다.

[0022] [화학식 3-1] [화학식 3-2]



[0023]

[0024]

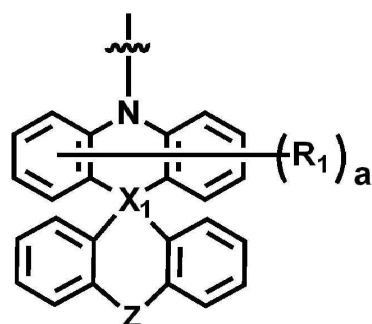
화학식 3-1 및 화학식 3-2에서, R_1 , X , Y_1 내지 Y_3 , R_6 내지 R_9 , 및 a 내지 e 는 화학식 1, 화학식 2-1, 및 화학식 2-2에서 정의한 바와 동일할 수 있다.

[0025]

화학식 1은 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0026]

[화학식 4]



[0027]

[0028]

화학식 4에서, X_1 은 C 또는 Si일 수 있다. Z 는 직접결합, O, 또는 S일 수 있다. R_1 및 a 는 화학식 1에서 정의한 바와 동일할 수 있다.

[0029]

일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 복수의 유기층들을 포함할 수 있다. 제2 전극은 제1 전극 상에 배치될 수 있다. 복수의 유기층들은 제1 전극 및 제2 전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함할 수 있다.

[0030]

유기층들 중 적어도 하나의 유기층은 하기 화학식 A로 표시되는 다환 화합물을 포함할 수 있다.

[0031]

[화학식 A]

DU—AU

[0032]

[0033]

DU는 상술한 화학식 1로 표시될 수 있고, AU는 상술한 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시될 수 있다.

[0034]

본 발명의 일 실시예는 화학식 1로 표시되는 전자 공여부, 및 전자 공여부와 결합되고 전술한 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 전자 수용부를 포함하는 다환 화합물을 제공할 수 있다.

[0035]

본 발명의 일 실시예는 전술한 화학식 A로 표시되는 다환 화합물을 제공할 수 있다.

발명의 효과

[0036]

본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 고효율을 달성할 수 있다.

[0037]

본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자에 적용되어 고효율화에 기여할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0038] 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

- [0039] 본 발명은 다양한 변형을 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.
- [0040] 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.
- [0041] 본 출원에서, "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.
- [0042] 본 출원에서, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 또는 "상부에" 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 "하에" 또는 "하부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 또한, 본 출원에서 "상에" 배치된다고 하는 것은 상부뿐 아니라 하부에 배치되는 경우도 포함하는 것일 수 있다.
- [0043] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 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.
- [0044] 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.
- [0045] 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.
- [0046] 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.
- [0047] 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.

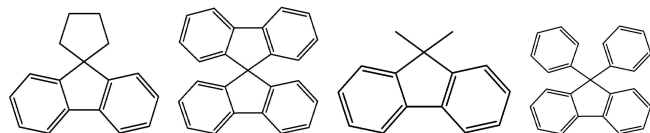
- [0048] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질 및 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층(미도시), 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층(미도시), 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0049] 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.
- [0050] 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 폴리테트라케텐(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.
- [0051] 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]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl), mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene) 등을 더 포함할 수도 있다.
- [0052] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 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 30Å 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.
- [0053] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0054] 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.
- [0055] 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.
- [0056] 발광층은 전자 공여부 및 전자 공여부와 결합된 전자 수용부를 포함하는 다환 화합물을 포함할 수 있다. 전자

공여부는 아크리딘(acridine) 유도체 또는 디벤조 아자실린(dibenzo azasiline) 유도체를 포함할 수 있다. 전자 수용부는 고리 형성 원자로 B, 및 B와 직접 결합하는 O 또는 S를 포함하며, 3개 또는 5개의 6각 고리가 축합된 헤테로고리기를 포함할 수 있다.

- [0057] 아크리딘(acridine) 유도체 또는 디벤조 아자실린(dibenzo azasiline) 유도체의 질소 원자가 전자 수용부와 결합할 수 있다.
- [0058] 전자 수용부가 세 개의 육각 고리가 축합된 헤테로고리기인 경우 전자 수용부는 B, 및 B와 직접 결합하는 O 또는 S를 포함하는 하나의 지방족 헤테로 육각 고리기를 포함하고, 지방족 헤테로 육각 고리기에 축합된 두 개의 치환 또는 비치환된 벤젠 고리기를 포함할 수 있다.
- [0059] 전자 수용부가 다섯 개의 육각 고리가 축합된 헤테로고리기인 경우, 전자 수용부는 B, 및 B와 직접 결합하는 O 또는 S를 두 개 포함하는 나프틸 골격을 갖고, 나프틸 골격에 축합된 세 개의 치환 또는 비치환된 벤젠고리기를 포함할 수 있다.
- [0060] 예를 들어, 전자 수용부는 디벤조 티아보리닌(dibenzo thiaborinine) 유도체, 또는 디벤조 옥사보리닌(dibenzo oxaborinine) 유도체를 포함할 수 있다.
- [0061] 또한, 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 실릴기, 옥시기, 티오기, 알킬기, 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.
- [0062] 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. 탄화수소 고리 및 헤테로 고리는 단환 또는 다환일 수 있다. 또한, 서로 결합하여 형성된 고리는 다른 고리와 연결되어 스피로 구조를 형성하는 것일 수도 있다.
- [0063] 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-디에틸시클로펜테인(1,1-diethylcyclopentene)에서 2개의 에틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있다.
- [0064] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0065] 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-트라이코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0066] 본 명세서에서 메틸기는 Me로 표시될 수 있다. 예를 들어, 본 명세서에서 MeO는 메톡시기(methoxy group)를 의미할 수 있다.
- [0067] 본 명세서에서, 탄화수소 고리기는 지방족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 탄화수소 고리기는 고리 형성 탄소수 5 이상 20 이하의 포화 탄화수소 고리기일 수 있다.
- [0068] 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, 비페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 키크페닐기, 섹시페닐기, 트리페닐에닐기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0069] 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.



[0070]

[0071] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 헤테로 원자로 B, O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 것일 수 있다. 헤테로아릴기가 헤테로 원자를 2개 이상 포함할 경우, 2개 이상의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로고리기 또는 다환식 헤테로고리기일 수 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하, 또는 2 이상 10 이하일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 페녹사진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라지노 피라진기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨란기, 페난트롤린기, 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 페노티아진기, 디벤조실롤기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0072] 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.

[0073] 본 명세서에서, 티오기는 알킬 티오기 및 아릴 티오기를 포함할 수 있다.

[0074] 본 명세서에서, 옥시기는 알콕시기 및 아릴 옥시기를 포함할 수 있다. 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 예를 들어 1 이상 20 이하 또는 1 이상 10 이하인 것일 수 있다. 옥시기의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, 부톡시, 펜틸옥시, 헥실옥시, 옥틸옥시, 노닐옥시, 데실옥시, 벤질옥시 등이 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0075] 본 명세서에서, 아민기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아민기는 알킬 아민기 및 아릴 아민기를 포함할 수 있다. 아민기의 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 페닐아민기, 디페닐아민기, 나프틸아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0076] 본 명세서에서 알킬아릴기, 알킬헤테로아릴기, 실릴기, 알킬 아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다.

[0077] 본 명세서에서, 아릴옥시기, 아릴 실릴기, 아릴 아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다

[0078] 본 명세서에서, 직접 결합(direct linkage)은 단일 결합을 의미하는 것일 수 있다.

[0079] 한편, 본 명세서에서 "  " 는 연결되는 위치를 의미한다.

[0080] 일 실시예의 다환 화합물은 화학식 A로 표시될 수 있다.

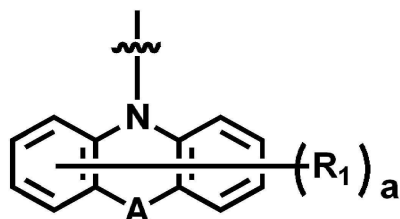
[0081] [화학식 A]

DU—AU

[0082]

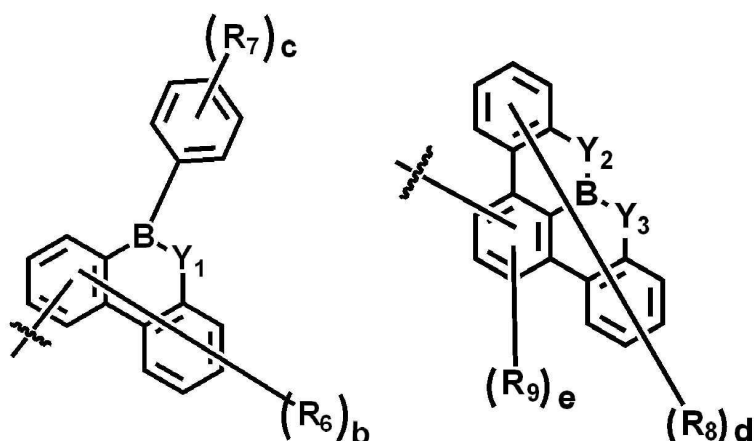
[0083] 화학식 A에서, DU는 화학식 1로 표시되는 전자 공여부이고, AU는 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 전자 수용부일 수 있다.

[0084] [화학식 1]



[0085]

[0086] [화학식 2-1] [화학식 2-2]



[0087]

[0088] 화학식 1에서 R_1 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 실릴기, 아민기, 알콕시기, 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있고, 아민기는 치환 또는 비치환된 아민기일 수 있고, 알콕시기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기일 수 있고, 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있고, 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0089] 구체적으로 R_1 은 수소 원자, 불소 원자, 메틸기, t-부틸기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 아크리디닐기일 수 있다.

[0090] a 는 0 이상 8 이하의 정수일 수 있다. 예를 들어 a 는 1 또는 2일 수 있다. a 가 1인 경우 R_1 은 수소 원자가 아닐 수 있다. 예를 들어, a 가 1인 경우 R_1 은 헤테로아릴기일 수 있다. a 가 2 이상인 경우 복수 개의 R_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0091] X 는 CR_2R_3 또는 SiR_4R_5 일 수 있다.

[0092] R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기이거나 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기이고, 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기이고, 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 예를 들어, R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 메틸기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기이거나, 또는 서로 연결되어 디벤조스피로 고리를 형성하는 것일 수 있다. R_2 내지 R_5 가 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하는 경우 디벤조스피로 고리를 형성할 수 있다. 디벤조스피로 고리는 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기일 수 있다.

[0093] R_2 내지 R_5 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 예를 들어 R_2 내지 R_5 는 서로 동일할 수 있다. 또는 R_2 내지 R_5 는 인접하는 기와 서로 결합하여 대칭적인 구조를 갖는 스피로고리를 형성할 수 있다.

[0094] 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서, Y_1 내지 Y_3 은 각각 독립적으로 O 또는 S일 수 있다. Y_2 및 Y_3 은 서로 동일하거나

상이할 수 있다. 예를 들어 Y_2 및 Y_3 은 동일한 원자일 수 있다.

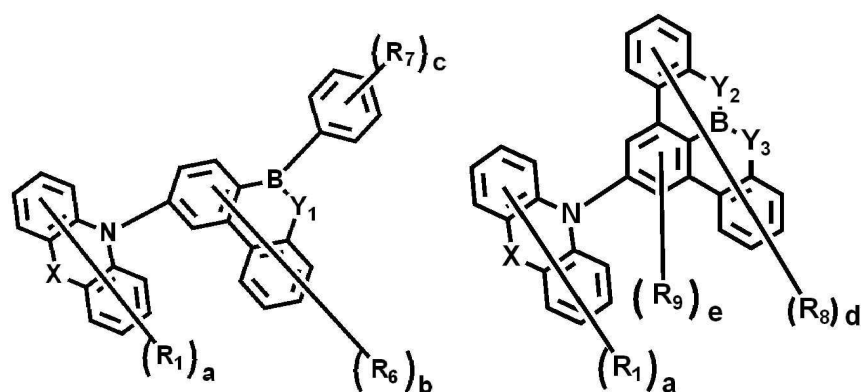
[0095] R_6 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 알콕시기, 설파이드기, 아민기, 실릴기, 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 알콕시기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기일 수 있고, 설파이드기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 설파이드기일 수 있고, 아민기는 치환 또는 비치환된 아민기일 수 있고, 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있고, 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있고, 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 치환된 아릴기는 탄소수 1 이상 20 이하의 아릴 옥시기 또는 탄소수 1 이상 20 이하의 아릴 설파이드기로 치환된 아릴기일 수 있다.

[0096] 예를 들어, R_6 내지 R_9 는 메틸기, 이소프로필기, n-헥실기, 불소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리딘기, 치환 또는 비치환된 피리미딘기, 또는 치환 또는 비치환된 아크리디닐기일 수 있다.

[0097] b 는 0 이상 7 이하의 정수일 수 있고, c 는 0 이상 5 이하의 정수일 수 있고, d 는 0 이상 8 이하의 정수일 수 있고, e 는 0 이상 2 이하의 정수일 수 있다. 예를 들어, b 는 0, 또는 1일 수 있다. d 는 0, 1, 또는 2일 수 있다. b 내지 e 가 1인 경우 R_6 내지 R_9 는 수소 원자가 아닐 수 있다.

[0098] 일 실시예의 다환 화합물은 화학식 3-1 또는 화학식 3-2로 표시될 수 있다.

[0099] [화학식 3-1] [화학식 3-2]

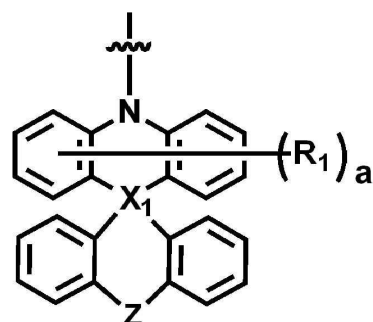


[0100]

[0101] 화학식 3-1 및 화학식 3-2는 일 실시예의 다환 화합물의 전자 공여부 및 전자 수용부의 치환 위치를 구체화한 화학식이다. 화학식 3-1 및 화학식 3-2에서, R_1 , X , Y_1 내지 Y_3 , R_6 내지 R_9 , 및 a 내지 e 는 화학식 1, 화학식 2-1, 및 화학식 2-2에서 정의한 바와 동일할 수 있다.

[0102] 화학식 1은 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0103] [화학식 4]



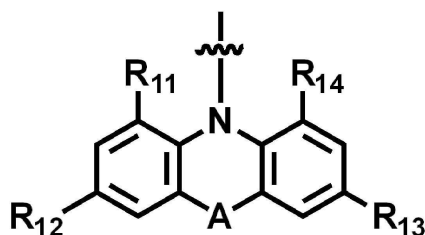
[0104]

[0105] 화학식 4는 화학식 1에서 R_2 내지 R_5 가 인접하는 기와 서로 결합하여 스피로 고리를 형성한 구조를 구체화한 화학식이다.

[0106] 화학식 4에서 X_1 은 C 또는 Si일 수 있고, Z는 직접결합, O, 또는 S일 수 있다. R_1 및 a는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일할 수 있다.

[0107] 화학식 1은 하기 화학식 5로 표시될 수 있다.

[0108] [화학식 5]



[0109]

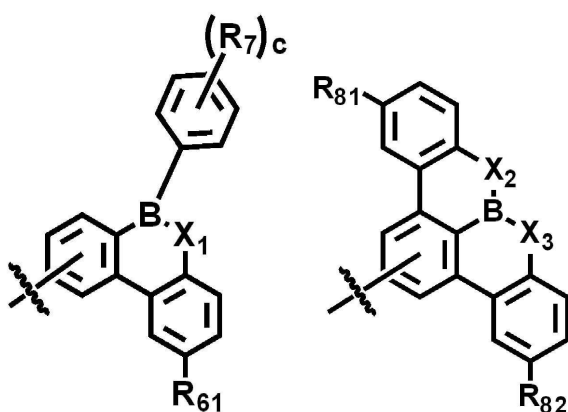
[0110] 화학식 5는 화학식 1에서 R_1 의 치환 위치를 구체화한 화학식이다. 즉 R_1 은 N을 기준으로 오르쏘(ortho) 위치 및 파라(para) 위치 중 적어도 하나의 위치에 치환될 수 있다.

[0111] R_{11} 내지 R_{14} 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 실릴기, 아민기, 알콕시기, 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기일 수 있다. 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있고, 아민기는 치환 또는 비치환된 아민기일 수 있고, 알콕시기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기일 수 있고, 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있고, 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0112] 구체적으로 R_{11} 내지 R_{14} 는 수소 원자, 불소 원자, 메틸기, t-부틸기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 아크리디닐기일 수 있다. R_{11} 내지 R_{14} 중 적어도 하나는 수소가 아닐 수 있다. A는 화학식 1에서 정의한 바와 동일할 수 있다.

[0113] 화학식 2-1은 화학식 6-1로 표시되고, 화학식 2-2는 화학식 6-2로 표시될 수 있다.

[0114] [화학식 6-1] [화학식 6-2]



[0115]

[0116] 화학식 6-1은 화학식 2-1에서 R_6 의 개수 및 치환 위치를 구체화한 화학식이고, 화학식 6-2는 화학식 2-2에서 R_8 의 개수 및 치환 위치를 구체화한 화학식이다.

[0117] 보다 구체적으로 화학식 6-1은 화학식 2-1에서 R_6 이 X_1 을 기준으로 파라 위치에 치환된 것을 구체화한 화학식이며, 화학식 6-2는 화학식 2-2에서, R_9 는 모두 수소 원자이고 R_8 은 X_2 또는 X_3 을 기준으로 파라 위치에 치환된 것을 구체화한 화학식이다.

[0118] R_{61} , R_{81} , 및 R_{82} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 알콕시기, 실라이드기, 아민기, 실릴기, 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 알콕시기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의

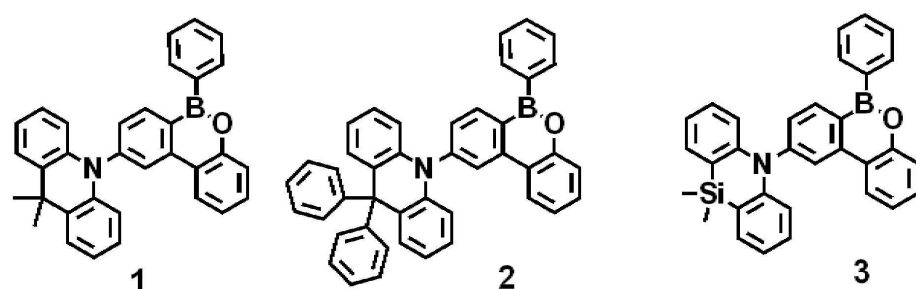
알콕시기일 수 있고, 설펜이드기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 설펜이드기일 수 있고, 아민기는 치환 또는 비치환된 아민기일 수 있고, 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있고, 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있고, 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 치환된 아릴기는 탄소수 1 이상 20 이하의 아릴 옥시기 또는 탄소수 1 이상 20 이하의 아릴 설펜이드기로 치환된 아릴기일 수 있다.

[0119] 예를 들어, R_{61} , R_{81} , 및 R_{82} 는 메틸기, 이소프로필기, n-헥실기, 불소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리딘기, 치환 또는 비치환된 피리미딘기, 또는 치환 또는 비치환된 아크리디닐기일 수 있다.

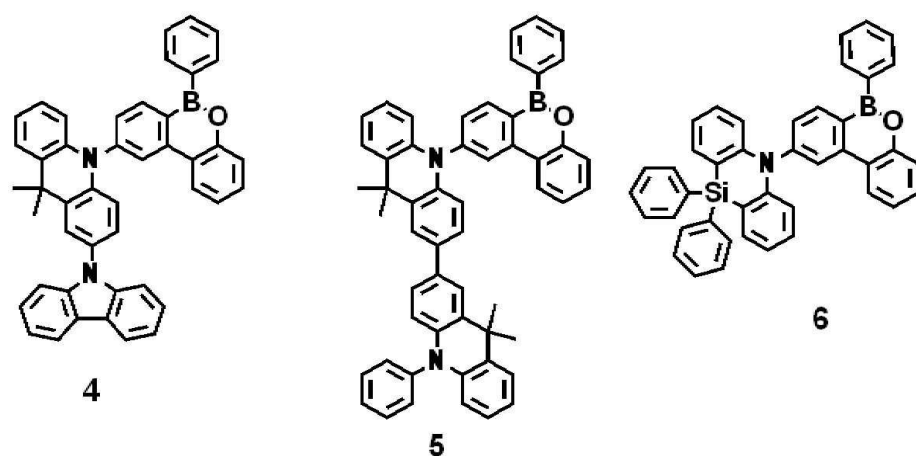
[0120] X_1 내지 X_3 , R_7 , 및 c 는 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서 정의한 바와 동일할 수 있다.

[0121] 일 실시예의 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

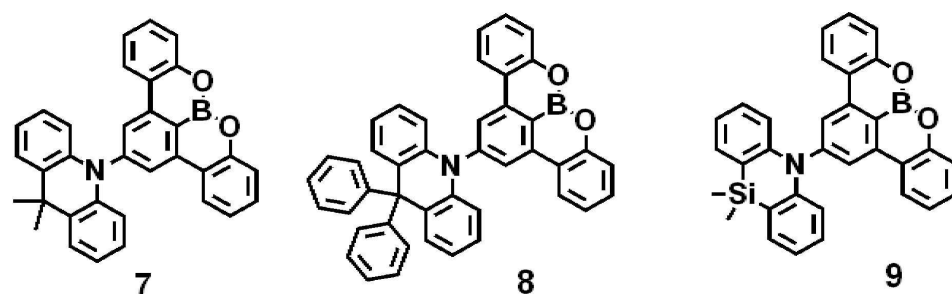
[0122] [화합물군 1]



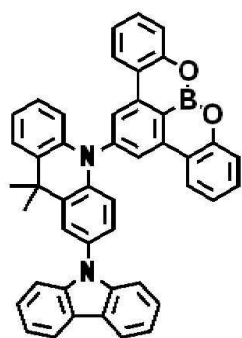
[0123]



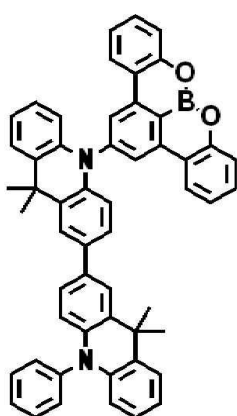
[0124]



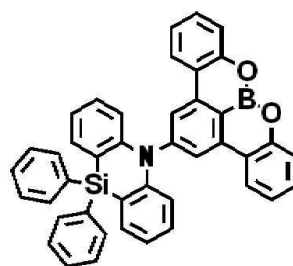
[0125]



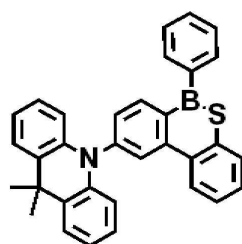
10



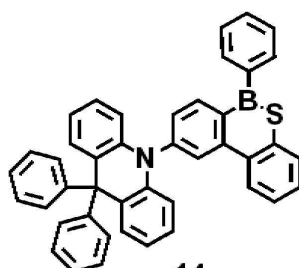
11



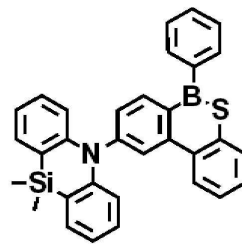
12



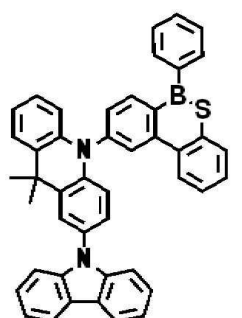
13



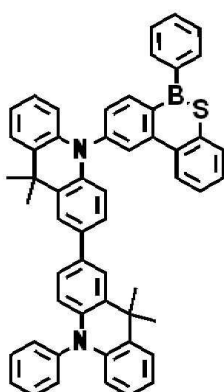
14



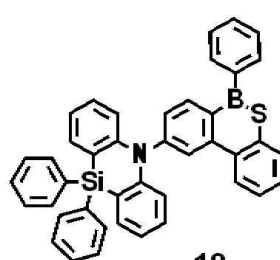
15



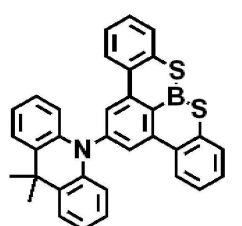
16



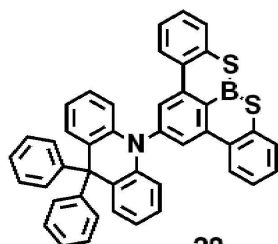
17



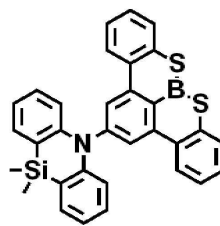
18



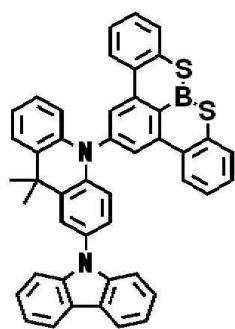
19



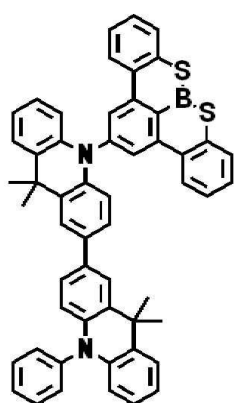
20



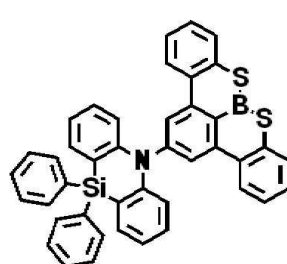
21



22

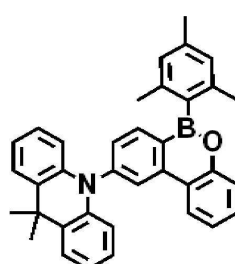


23

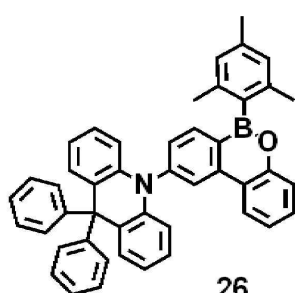


24

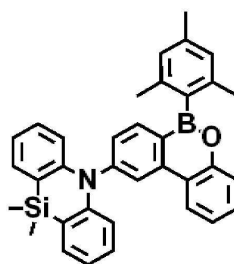
[0130]



25

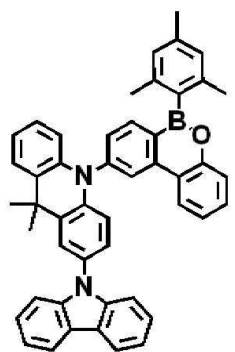


26

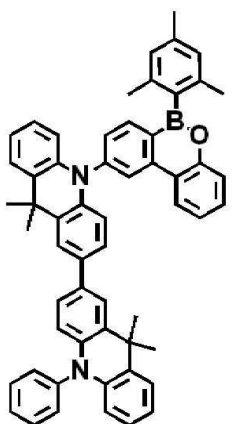


27

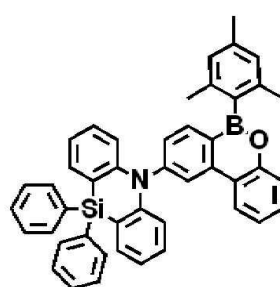
[0131]



28

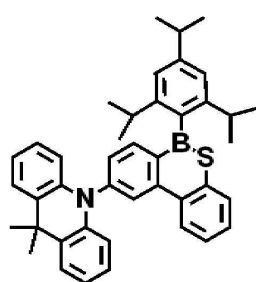


29

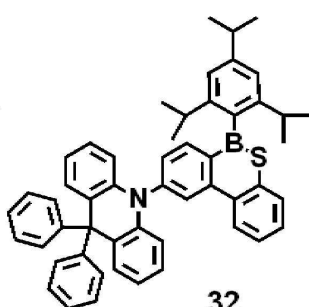


30

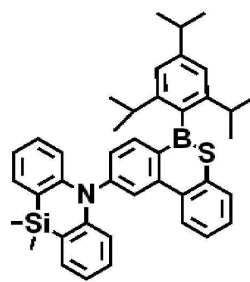
[0132]



31

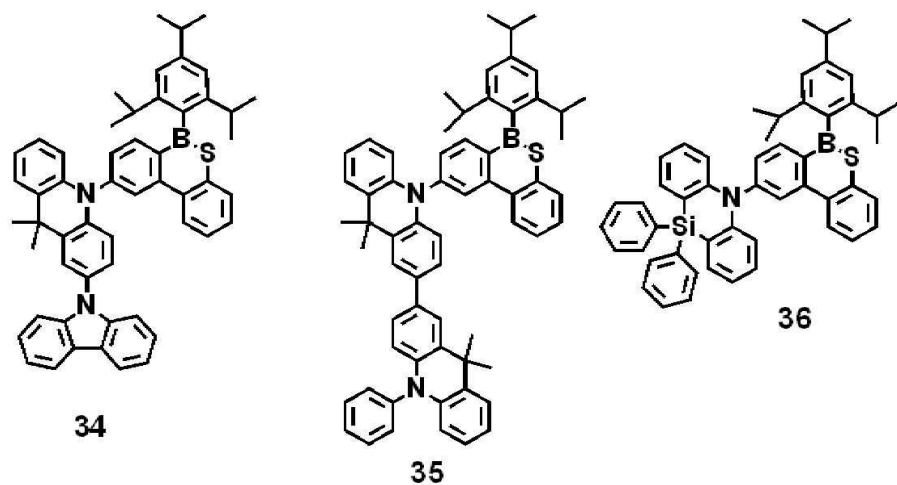


32

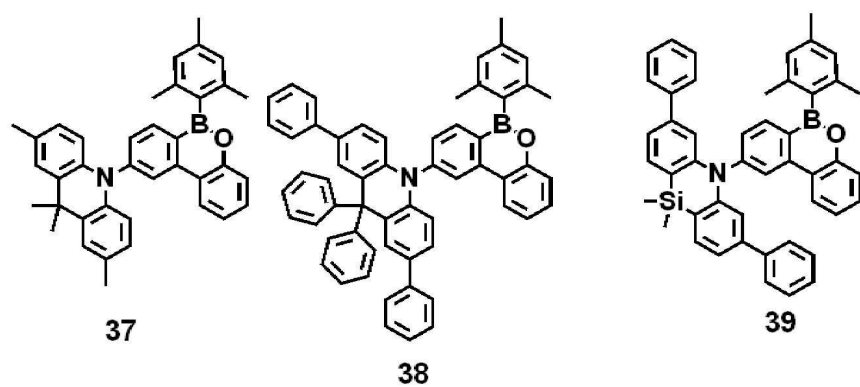


33

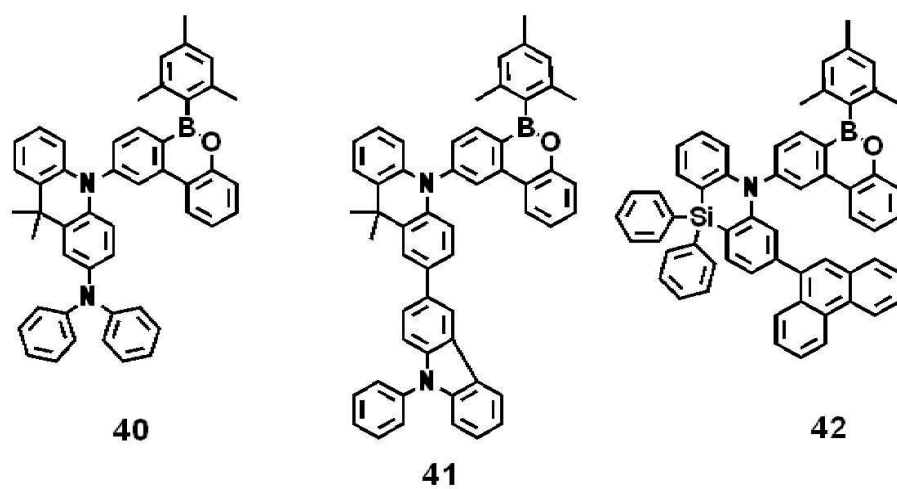
[0133]



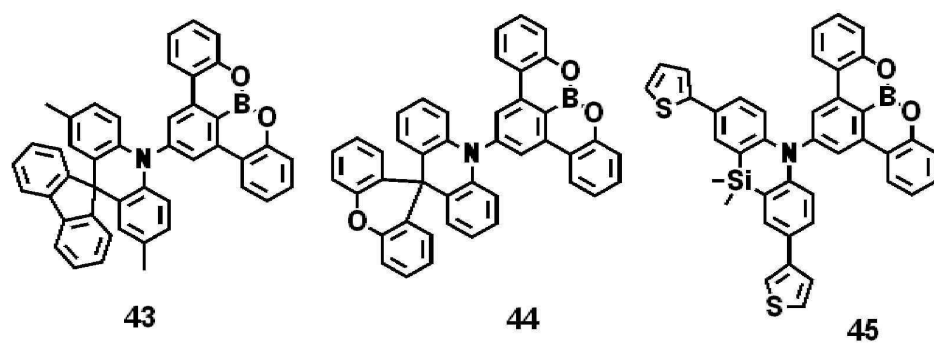
[0134]



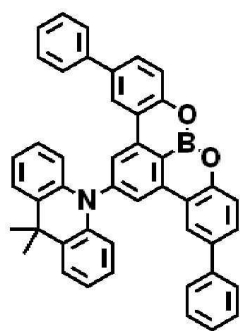
[0135]



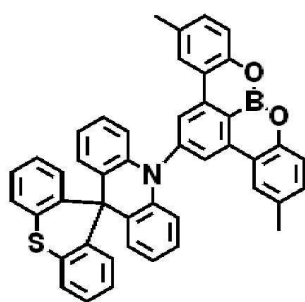
[0136]



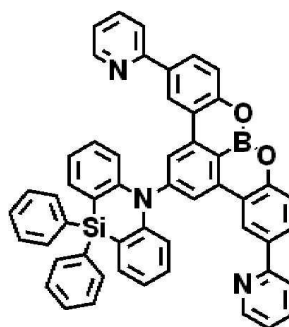
[0137]



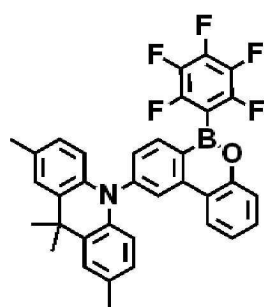
46



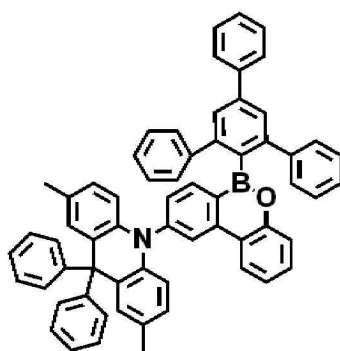
47



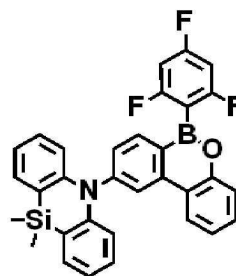
48



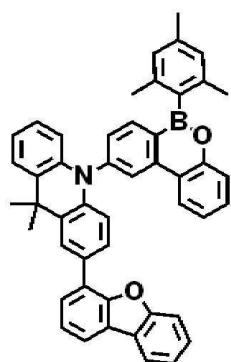
49



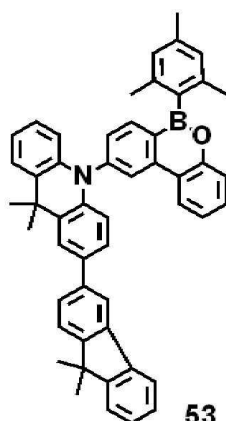
50



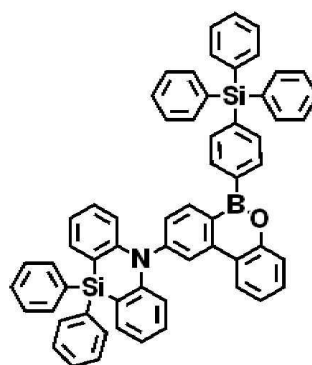
51



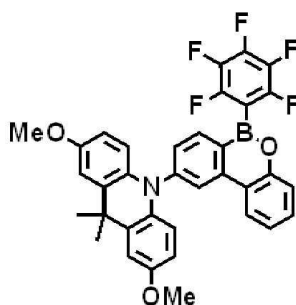
52



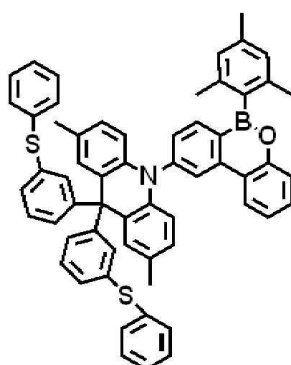
53



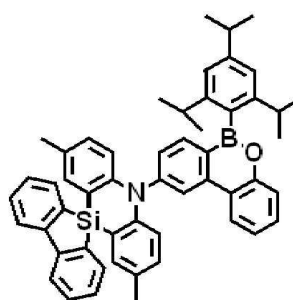
54



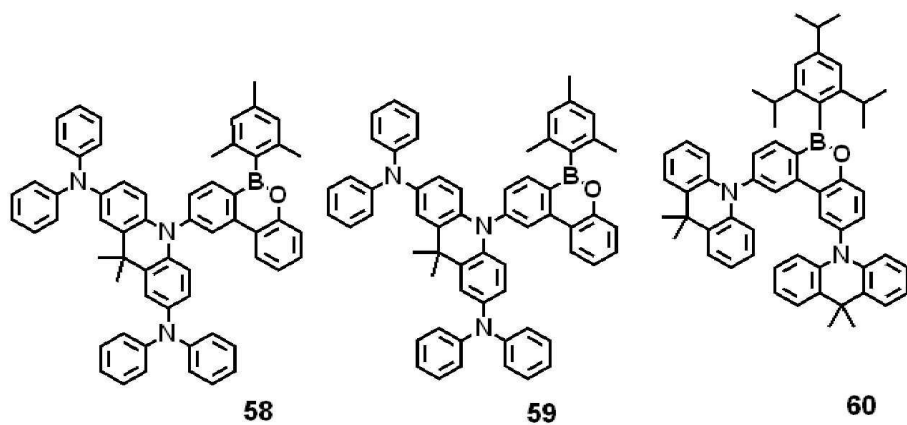
55



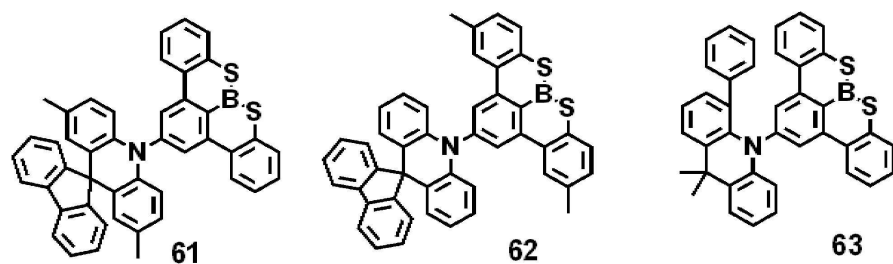
56



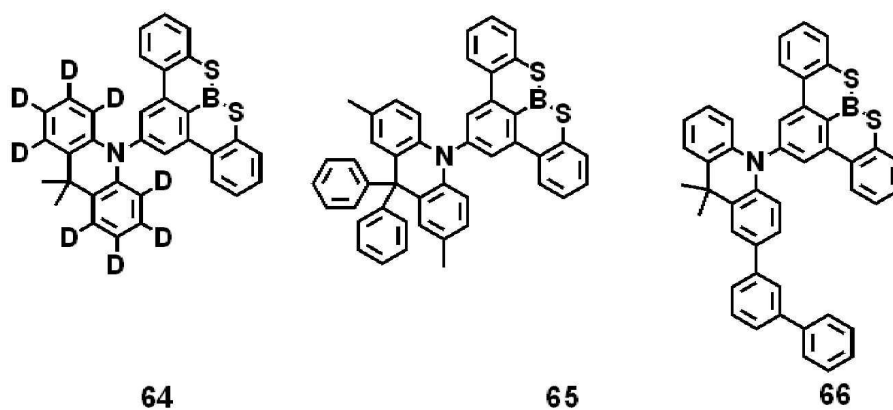
57



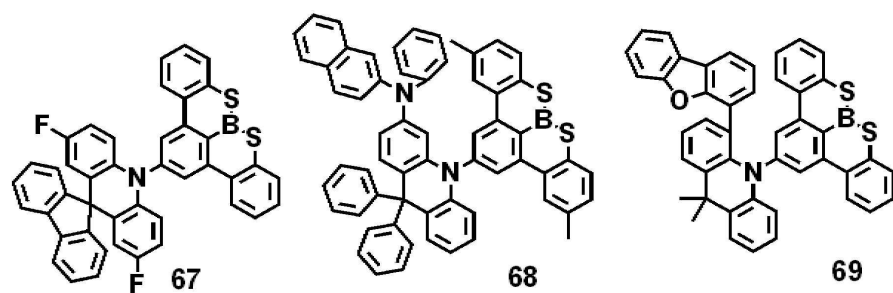
[0142]



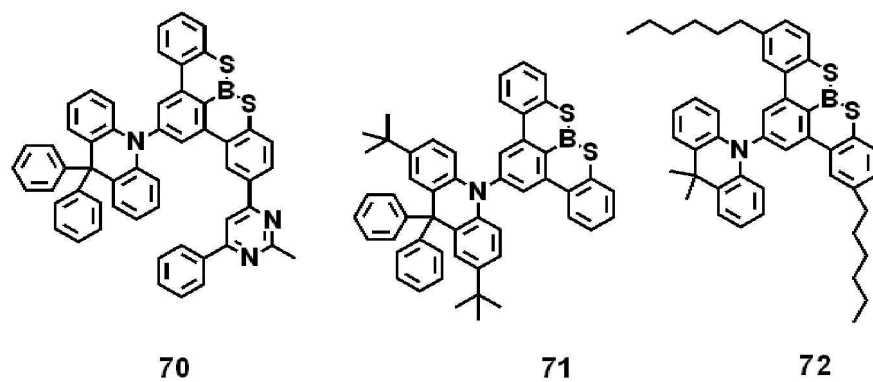
[0143]



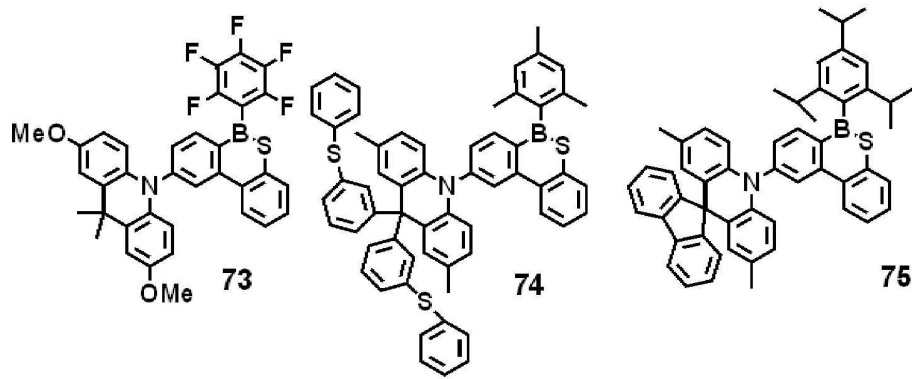
[0144]



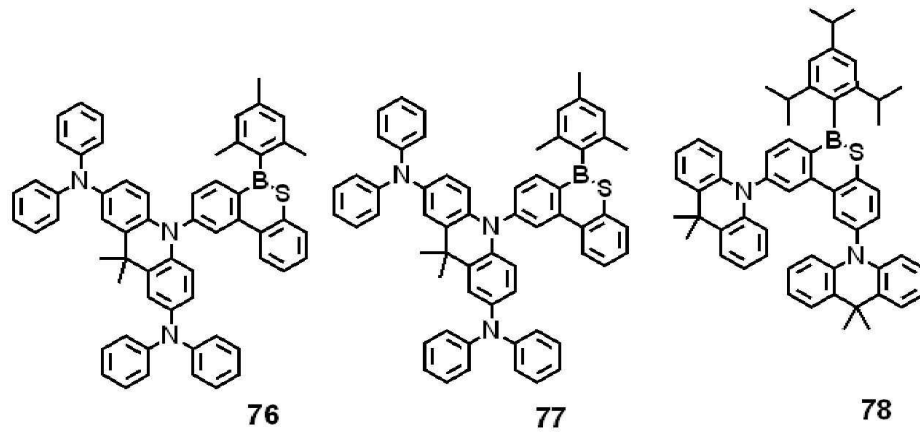
[0145]



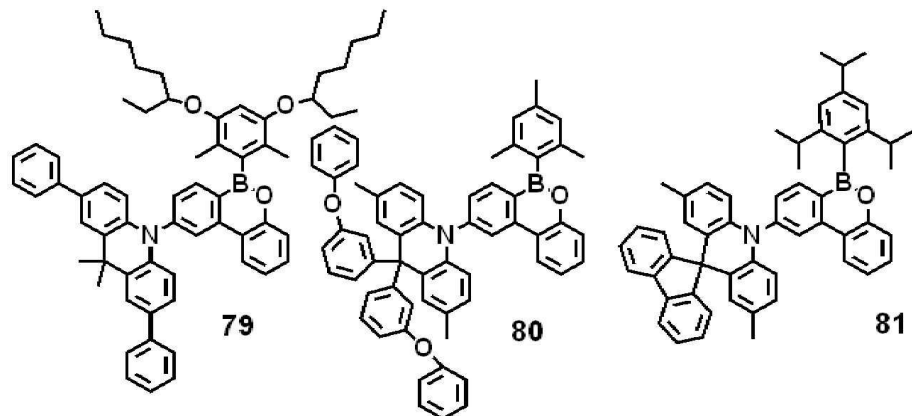
[0146]



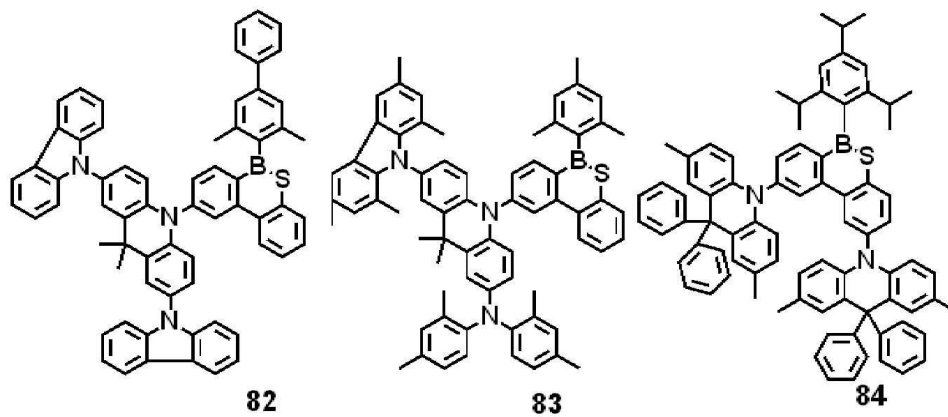
[0147]



[0148]



[0149]



[0150]

[0151]

발광층(EML)은 일 실시예의 다환 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함할 수 있다.

[0152]

발광층(EML)은 일 실시예의 다환 화합물 외에 공지의 물질을 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 플루오란텐 유도체, 크리센 유도체, 디

하이드로벤즈안트라센 유도체, 또는 트리페닐렌 유도체를 포함하는 것일 수 있다. 구체적으로, 발광층(EML)은 안트라센 유도체 또는 피렌 유도체를 포함하는 것일 수 있다.

- [0153] 도 1 내지 도 3에 도시된 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 발광층(EML)은 상술한 다환 화합물을 도펀트 재료로 포함할 수 있다. 그러나 실시예가 이에 한정되지 않으며 일 실시예의 다환 화합물은 발광층(EML)의 호스트 재료로 포함될 수 있다.
- [0154] 일 실시예의 다환 화합물은 열 활성 지연 형광용 도펀트로써 발광층(EML)에 포함될 수 있다.
- [0155] 발광층(EML)은 일 실시예의 다환 화합물을 포함함으로써 가시광선 영역의 광을 발광할 수 있다. 예를 들어 발광층(EML)은 녹색광, 또는 청색광 중 어느 하나를 발광할 수 있다. 보다 구체적으로, 발광층(EML)은 약 440nm 내지 약 540nm 이하 또는 약 440nm 이상 500nm 이하의 파장 영역을 갖는 가시광선을 발광할 수 있다.
- [0156] 발광층(EML)은 호스트 물질로 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)은 호스트 물질로 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'-dimethylbiphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), CP1(Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO₃ (Hexaphenylcyclotrisiloxane), DPSiO₄ (Octaphenylcyclotetra siloxane), PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 호스트 재료로 사용할 수 있다.
- [0157] 일 실시예에서 발광층(EML)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 포함할 수 있다.
- [0158] 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.
- [0159] 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.
- [0160] 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.
- [0161] 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.
- [0162] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 안트라센계 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니며, 전자 수송 영역은 예를 들어, Alq₃(Tris(8-hydroxyquinolino)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), BALq(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), BeBq₂(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함하는 것일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 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.

[0163] 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.

[0164] 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. 정공 저지층(HBL)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 정공 저지층(HBL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0165] 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.

[0166] 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.

[0167] 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.

[0168] 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.

[0169] 상술한 일 실시예의 다환 화합물은 발광층(EML) 이외의 유기층에서 유기 전계 발광 소자(10)용 재료로 포함될 수 있다. 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.

[0170] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.

[0171] 이하에서는, 실시예 및 비교예를 참조하면서, 본 발명의 일 실시 형태에 따른 다환 화합물 및 일 실시예의 다환

화합물을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에 대해서 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 나타내는 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 일 예시이며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0172] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(10)는 고효율을 달성할 수 있다.

[0173] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자(10)에 적용되어 고효율화에 기여할 수 있다.

[0174] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 일중항 에너지 준위 및 삼중항 에너지 준위 차이가 0.2eV 이하, 0.15eV 이하, 또는 0.1eV 이하인 것일 수 있으며, 결과적으로 열 활성화 지연 형광용 재료로 활용 가능하다. 따라서, 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자(10)용 재료로 적용되어 효율 향상에 기여할 수 있다.

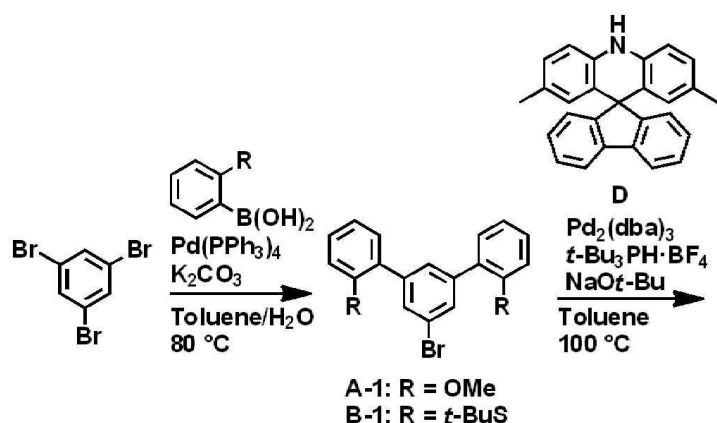
[0175] 이하에서는, 실시예 및 비교예를 참조하면서, 본 발명의 일 실시 형태에 따른 다환 화합물 및 일 실시예의 다환 화합물을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에 대해서 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 나타내는 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 일 예시이며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0176] (합성예)

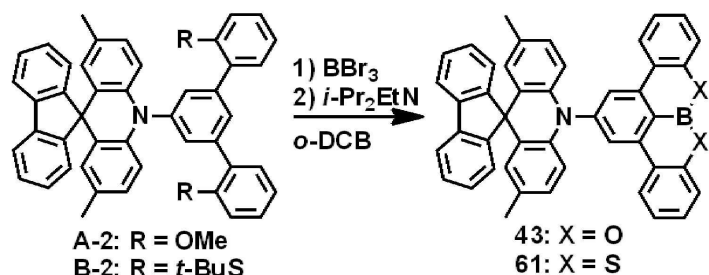
[0177] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0178] 1-1. 화합물 43 및 61의 합성

[0179] [반응식]



[0180]



[0181]

[0182] (중간체 A-1의 합성)

[0183] 질소 분위기 하에서, 톨루엔(60 ml) 및 물(20 ml)에 2-methoxyphenylboronic acid(1.83 g, 12.0 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (1.89 g, 6.00 mmol), Pd(PPh₃)₄ (136 mg, 0.118 mmol), 및 K₂CO₃ (3.32 g, 24.0 mmol)의 혼합물을 넣어 80°C에서 24시간 동안 교반하였다. 물을 첨가 한 후, 생성물을 톨루엔으로 추출 하였다. 추출된 유기층을 염수(brine)로 세척하고, 무수 Na₂SO₄로 건조시키고, 감압 하에 농축시켰다. 생성된 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피 (용리액으로 부피비 5:1의 헥산 및 톨루엔 사용)로 정제하여 무색의 점착 오일로서 중간체 A-1을 수득 하였다(수득물 = 1.19 g, 3.22 mmol, 54%). 중간체 A-1에 대한 ¹H NMR(400 MHz, CDCl₃) 측정 결과는 하기와 같았다.

[0184] δ 7.64 (d, J = 1.6 Hz, 2H), δ 7.60 (t, J = 1.6 Hz, 1H), δ 7.36-7.31 (m, 4H), δ 7.03 (ddd, J = 7.2,

7.2, 1.2 Hz, 2H), δ 6.90 (dd, J = 8.0, 1.2 Hz, 2H), δ 3.83 (s, 6H).

[0185] (중간체 A-2의 합성)

[0186] 질소 분위기 하에서, 톨루엔(7.5ml)에 중간체 A-1(554 mg, 1.50 mmol), D (542 mg, 1.50 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (29 mg, 0.032 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{H} \cdot \text{BF}_4$ (36 mg, 0.12 mmol), 및 sodium tert-butoxide (289 mg, 3.01 mmol)의 혼합물을 넣어 100℃에서 20시간 동안 교반하였다. NH_4Cl 수용액을 첨가 한 후, 생성물을 톨루엔으로 추출 하였다. 추출된 유기층을 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 로 건조시키고, 감압 하에 농축시켰다. 생성된 조생성물을 실리카 겔 컬럼크로마토그래피(용리액으로 부피비 1:1의 헥산 및 톨루엔 사용)로 정제하여 백색 고체의 중간체 A-2를 수득 하였다(수득률 = 809 mg, 1.25 mmol, 83 %). 중간체 A-2에 대한 ^1H NMR(400 MHz, CDCl_3) 측정 결과는 하기와 같았다.

[0187] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 7.87 (t, J = 1.6 Hz, 1H), δ 7.80 (d, J = 7.6 Hz, 2H), δ 7.64 (d, J = 1.6 Hz, 2H), δ 7.49 (dd, J = 7.6, 1.6 Hz, 2H), δ 7.46 (d, J = 7.6 Hz, 2H), δ 7.39-7.33 (m, 4H), δ 7.24 (ddd, J = 7.6, 7.6, 1.6 Hz, 2H), δ 7.07 (ddd, J = 7.6, 7.6, 1.2 Hz, 2H), δ 7.02 (d, J = 8.0 Hz, 2H), δ 6.77 (ddd, J = 8.0, 1.6 Hz, 2H), δ 6.60 (d, J = 8.0 Hz, 2H), δ 6.18 (d, J = 2.0 Hz, 2H), δ 3.86 (s, 6H), δ 1.96 (s, 6H).

[0188] (화합물 43의 합성)

[0189] o-dichlorobenzene (5 mL)에 중간체 A-2(648 mg 1.00 mmol)를 넣어 교반하고, 0℃의 질소 분위기 하에서 BBr_3 (1.0 M, 1.0 mL, 1.0 mmol, in heptane)를 추가하였다. 반응액을 상온에서 15시간 동안 교반한 후, N,N-diisopropylethylamine(0.34 mL, 2.0 mmol) 추가하였다. 용매를 진공 하에 제거한 후, 생성된 조생성물을 헥산 및 acetonitrile로 세척하여 백색 고체의 화합물 43을 수득 하였다(수득률 = 360 mg, 0.574 mmol, 57 %). 화합물 43에 대한 ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) 측정 결과는 하기와 같았다.

[0190] δ 8.19 (s, 2H), δ 8.16 (d, J = 7.6 Hz, 2H), δ 7.85 (d, J = 7.2 Hz, 2H), δ 7.54-7.49 (m, 6H), δ 7.43 (ddd, J = 7.6, 7.6, 1.2 Hz, 2H), δ 7.35-7.29 (m, 4H), δ 6.70 (dd, J = 8.0, 2.0 Hz, 2H), δ 6.31 (d, J = 8.8 Hz, 2H), δ 6.23 (d, J = 2.4 Hz, 2H), δ 1.96 (s, 6H).

[0191] MALDI-TOF MS(Matrix assisted laser desorption/ionization-time of flight mass spectrometry) 측정으로 측정된 화합물 43의 $[\text{M}^+]$ 값은 627.45(m/z)였다.

[0192] (중간체 B-1의 합성)

[0193] 질소 분위기하에서, 톨루엔 (45 ml) 및 물 (15 ml)에 (2-(tert-butylthio)phenyl)boronic acid (2.56 g, 12.2 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (1.91 g, 6.07 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (209 mg, 0.181 mmol), 및 K_2CO_3 (3.36 g, 24.3 mmol)의 혼합물을 넣어 80 °C에서 24시간 동안 교반하였다. 물을 첨가 한 후, 생성물을 ethyl acetate로 추출 하였다. 추출된 유기층을 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 로 건조시키고, 감압 하에 농축시켰다. 생성된 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피 (용리액으로 부피비 10:1의 헥산 및 톨루엔 사용)로 정제하여 무색의 점착성 오일 형태의 중간체 B-1을 수득 하였다(수득률 = 2.26 g, 4.65 mmol, 77 %). 중간체 B-1에 대한 ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) 측정 결과는 하기와 같았다.

[0194] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 7.70 (d, J = 8.0 Hz, 2H), δ 7.55 (d, J = 1.6 Hz, 2H), δ 7.41-7.38 (m, 5H), δ 7.35-7.30 (m, 2H), δ 6.90 (dd, J = 8.0, 1.2 Hz, 2H), δ 1.10 (s, 18H).

[0195] (중간체 B-2의 합성)

[0196] 질소 분위기하에서, 톨루엔(15 ml)에 중간체 B-1 (1.43 g, 2.95 mmol), D (1.12 g, 3.10 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (55 mg, 0.060 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{H} \cdot \text{BF}_4$ (69 mg, 0.24 mmol), 및 sodium tert-butoxide (575 mg, 5.98 mmol)의 혼합물을 넣어 100 ° C 에서 20 시간 동안 교반하였다. NH_4Cl 수용액을 첨가 한 후, 생성물을 톨루엔으로 추출 하였다. 추출된 유기층을 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 로 건조시키고, 감압 하에 농축시켰다. 생성된 조생성물을 실

리카겔 컬럼크로마토그래피(용리액으로 부피비 2:1의 헥산 및 톨루엔 사용)로 정제하여 백색 고체의 중간체 B-2를 수득 하였다. 중간체 B-2에 대한 ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3)의 측정 결과는 하기와 같았다.

[0197] δ 7.80 (d, J = 7.6 Hz, 2H), δ 7.74 (dd, J = 7.6, 1.2 Hz, 2H), δ 7.65 (t, J = 1.6 Hz, 1H), δ 7.57 (dd, J = 7.6, 1.6 Hz, 2H), δ 7.54 (d, J = 1.6 Hz, 2H), δ 7.48-7.43 (m, 4H), δ 7.38 (dd, J = 7.6, 1.2 Hz, 2H), δ 7.34 (dd, J = 7.6, 1.2 Hz, 2H), δ 7.25 (ddd, J = 7.6, 7.6, 1.2 Hz, 2H), δ 6.73 (dd, J = 8.4, 1.6 Hz, 2H), δ 6.60 (d, J = 8.4 Hz, 2H), δ 6.16 (d, J = 2.0 Hz, 2H), δ 1.95 (s, 6H), δ 1.17 (s, 18H).

[0198] (화합물 61의 합성)

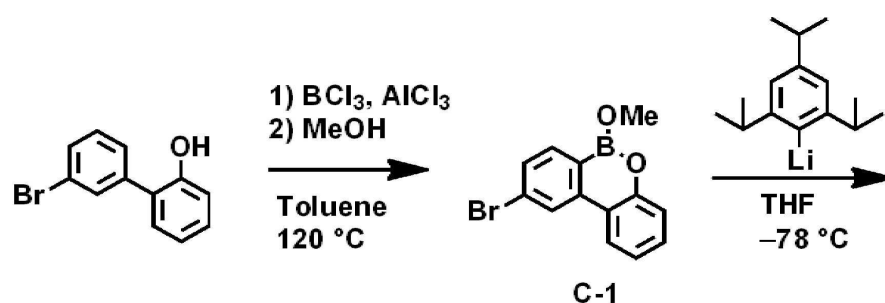
[0199] o-dichlorobenzene (9 ml)에 중간체 B-2(1.15 g, 1.50 mmol)를 넣어 교반하고, 0℃의 질소 분위기 하에서 BBr_3 (1.0 M, 1.5 ml, 1.5 mmol, in heptane)를 추가하였다. 40 ℃에서 24 시간 동안 교반 한 후, N,N-diisopropylethylamine (0.50 ml, 2.9 mmol)을 반응 혼합물에 첨가하였다. 용매를 진공에서 제거한 후, 생성된 조생성물을 헥산 및 acetonitrile로 세척하여 황색 고체의 화합물 61을 수득 하였다(수득률 = 948 mg, 1.44 mmol, 96%). 화합물 61에 대한 ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3)의 측정 결과는 하기와 같았다.

[0200] δ 8.54 (s, 2H), δ 8.35-7.32 (m, 2H), δ 7.85 (d, J = 7.2 Hz, 2H), δ 7.73-7.70 (m, 2H), δ 7.52 (d, J = 7.6 Hz, 2H), δ 7.45-7.40 (m, 6H), δ 7.33 (ddd, J = 7.6, 7.6, 1.2 Hz, 2H), δ 6.71 (dd, J = 8.4, 1.6 Hz, 2H), δ 6.34 (d, J = 8.4 Hz, 2H), δ 6.23 (d, J = 2.0 Hz, 2H), δ 1.96 (s, 6H).

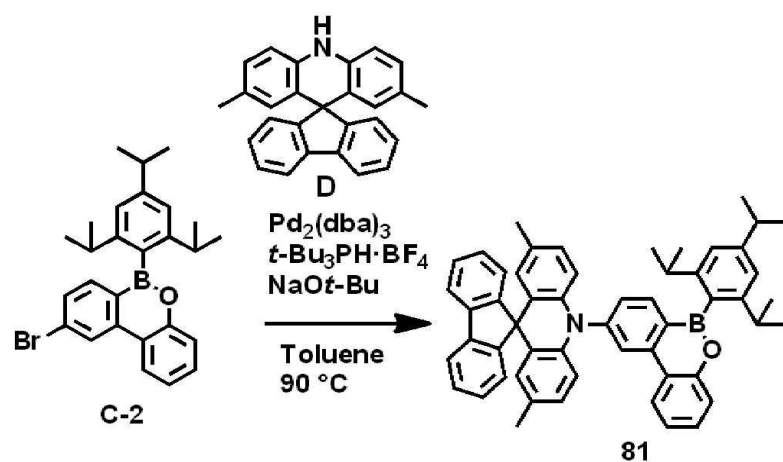
[0201] MALDI-TOF MS(Matrix assisted laser desorption/ionization-time of flight mass spectrometry) 측정으로 측정된 화합물 61의 $[\text{M}^+]$ 값은 659.13(m/z)이었다.

[0202] 1-2. 화합물 81의 합성

[0203] [반응식]



[0204]



[0205]

[0206] (중간체 C-1의 합성)

[0207] 질소 분위기 하에서 무수 톨루엔(30 ml)에 BCl_3 (1.0 M, 6.0 ml, 6.0 mmol, in heptane)을 추가하였다. 0 ℃에서 무수 톨루엔(8 ml)과 혼합된 3'-bromo-biphenyl-2-ol (996 mg, 4.00 mmol)을 적하 하였다. 반응 혼합물을 상온

으로 가온 한 후, AlCl_3 (60 mg, 0.45 mmol)를 첨가 하였다. 120 °C에서 15 시간 동안 교반 한 후, 0 °C에서 메탄올 (4 ml)을 반응 혼합물에 첨가 하였다. 용매를 진공에서 제거한 후, 생성된 조생성물을 무수 CH_2Cl_2 에 넣고 여과시켰다. 여과액을 감압하에 농축시킨 후, 생성된 조생성물을 메탄올로 세척하여 갈색 고체의 중간체 C-1을 수득 하였다 (수득률 = 934 mg, 3.23 mmol, 81 %). 생성된 조생성물을 추가로 정제하지 않고, 바로 다음 반응에 사용 하였다.

[0208] (중간체 C-2의 합성)

[0209] 무수 THF(tetrahydrofuran)(20 ml)에 1-bromo-2,4,6-triisopropylbenzene을 넣어 교반하고, -78 °C에서 n-BuLi(1.57 M, 2.57 ml, 4.03 mmol, in hexane)을 추가하였다. 반응 혼합물을 동일한 온도에서 1시간동안 교반 하고, 중간체 C-1(934 mg, 3.23 mmol, in anhydrous THF)을 추가하였다. 반응 혼합물을 0 °C까지 가온한 후, 실온으로 서서히 가온 하였다. 물을 추가한 후에 ethyl acetate로 생성물을 추출하였다. 추출된 유기층을 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 로 건조시키고, 감압하에 농축시켰다. 생성된 생성된 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마 토그래피(용리액으로 부피비 4:1의 헥산 및 톨루엔을 사용)로 정제 한 후, 헥산 및 에탄올로부터 재침전시켜 백색 고체의 중간체 C-2를 얻었다 (수득률 = 528 mg, 1.14 mmol, 29 %). 중간체 C-2에 대한 ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) 측정 결과는 하기와 같았다.

[0210] δ 8.46 (s, 1H), δ 8.24 (d, J = 7.6 Hz, 1H), δ 7.69 (d, J = 8.4 Hz, 1H), δ 7.56-7.51 (m, 3H), δ 7.07 (s, 2H), δ 2.96 (sept, J = 6.4 Hz, 1H), δ 2.54 (sept, J = 6.4 Hz, 2H), δ 1.32 (d, J = 7.2 Hz, 6H), δ 1.19 (d, J = 6.8 Hz, 6H), δ 1.08 (d, J = 6.8 Hz, 6H).

[0211] (화합물 81의 합성)

[0212] 질소 분위기 하에서, 톨루엔(3.5 mL)에 중간체 C-2 (162 mg, 0.351 mmol), D (127 mg, 0.351 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (6.8 mg, 0.0076 mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3\text{H} \cdot \text{BF}_4$ (8.9 mg, 0.031 mmol), 및 sodium tert-butoxide (51 mg, 0.531 mmol)의 혼합물을 90 °C에서 16시간 동안 교반하였다. 물을 첨가 한 후, 생성물을 톨루엔으로 추출하였다. 추출된 유기층을 염수로 세척하고, 무수 Na_2SO_4 로 건조시키고, 감압 하에 농축시켰다. 생성된 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(용리액으로 부피비 3:1의 헥산 및 톨루엔 사용)에 의해 정제 한 후, CH_2Cl_2 및 메탄올로부터 재 침전시켜 백색 고체의 화합물 81을 수득 하였다 (수율 = 169 mg, 0.228 mmol, 65 %). 화합물 81의 ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) 측정 결과는 하기와 같았다.

[0213] δ 8.43 (s, 1H), δ 8.29 (d, J = 8.0 Hz, 1H), δ 8.15 (d, J = 8.4 Hz, 1H), δ 7.83 (d, J = 7.6Hz, 2H), δ 7.60-7.36 (m, 8H), δ 7.29 (d, J = 7.6Hz, 2H), δ 7.13 (s, 2H), δ 6.72 (d, J = 8.4Hz, 2H), δ 6.30 (d, J = 8.4 Hz, 2H), δ 6.21 (s, 2H), δ 2.99 (sept, J = 6.4 Hz, 1H), δ 2.71 (sept, J = 6.4 Hz, 2H), δ 1.95 (s, 6H), δ 1.35 (d, J = 6.8 Hz, 6H), δ 1.28 (d, J = 6.4Hz, 6H), δ 1.19 (d, J = 6.4Hz, 6H).

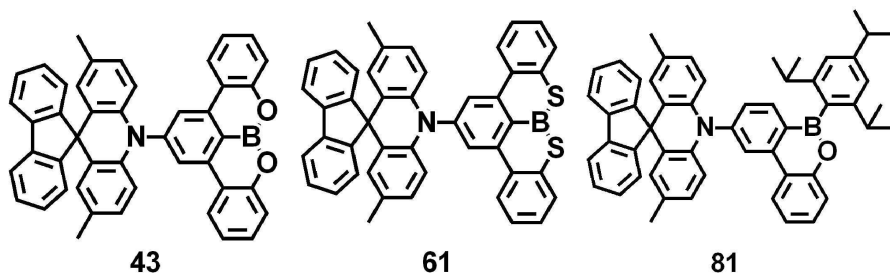
[0214] MALDI-TOF MS(Matrix assisted laser desorption/ionization-time of flight mass spectrometry) 측정으로 측정된 화합물 81의 $[\text{M}^+]$ 값은 739.45(m/z)였다.

[0215] 2. 다환 화합물 및 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 제작 및 평가

[0216] 2-1. 다환 화합물의 에너지 준위

[0217] 실시예 화합물 43, 61, 81 및 비교예 화합물 X-1, X-2, X-3의 일중항 에너지 준위(S1 energy level)와 삼중항 에너지 준위(T1 energy level)를 비경험적 분자 궤도법(nonempirical molecular orbital method)으로 측정하였다. 구체적으로는 Gaussian사 제품 Gaussian09를 이용하여, 범함수에 B3LYP, 기저함수에 6-31G(d)를 이용하여 계산을 시행했다.

[0218] (실시예 화합물)



(비교예 화합물)

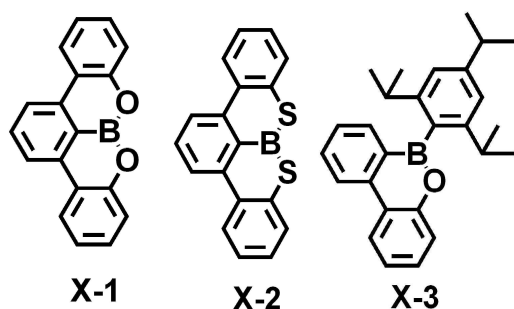


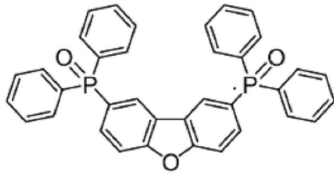
표 1

화합물	일중항 에너지 준위	삼중항 에너지 준위	ΔE_{ST}
실시에 화합물 43	2.79	2.75	0.04
실시에 화합물 61	2.55	2.55	0.00
실시에 화합물 81	2.77	2.76	0.01
비교예 화합물 X-1	3.78	2.83	0.95
비교예 화합물 X-2	3.53	2.82	0.71
비교예 화합물 X-3	3.84	3.10	0.74

표 1에서 ΔE_{ST} 는 일중항 에너지 준위 및 삼중항 에너지 준위 차이 값이다. S1 및 T1 에너지 준위 단위는 eV이다. 실시에 화합물들의 ΔE_{ST} 값은 약 0.00eV 내지 0.04eV이며, 비교예 화합물들의 ΔE_{ST} 값은 약 0.71eV 및 0.95eV 이므로, 실시에 화합물들은 비교예 화합물들에 비하여 낮은 ΔE_{ST} 값을 갖는다. 따라서, 모든 실시에 화합물들은 비교예 화합물들에 비하여 열 활성화 지연 형광 재료로 더 적합할 것으로 판단되며, 고효율의 열 활성화 지연 형광 발광을 할 것으로 판단된다.

(형광 발광 특성 평가)

형광 발광 특성의 평가에는 JASCO V-670 spectrometer를 이용하였다. 실시에 화합물들에 대해서는 PPF가 20wt% 도핑된 필름을 증착에 의해 quartz glass 상에 작성하여, 형광 발광 spectrum을 측정하였다. 비교예 화합물에 대해서는 선행 문헌 중의 측정 결과를 기재하였다. 형광 양자 수율은 JASCO ILF-835 integrating sphere system을 이용하여 측정하였다. 각 최대 발광 파장에서의 CIE 등식 함수(Color matching functions)의 삼색 자극 값 중 Z 자극 값(the CIE tristimulus value Z)은 CIE 1931 color space에 근거한 값을 이용하였고, 파장이 360 nm 이하인 경우에는 360 nm의 Z 자극 값으로 하였다. 형광 양자 수율과 각 최대 발광 파장에서의 Z 자극 값의 곱을 청색 형광 효율 지수로 정의하여, 각 재료의 상대비시감도(luminous efficiency function)를 비교하였다.



PPF

표 2

화합물	$\lambda_{\max}$ (nm)	형광 양자 수율 (%)	Z 자극 값 (in $\lambda_{\max}$)	청색 형광 효율 지수 (in $\lambda_{\max}$)
실시에 화합물 43	461	28	1.65	4.61×10
실시에 화합물 61	491	81	4.40×10^{-1}	3.56×10
실시에 화합물 81	458	53	1.71	9.04×10
비교예 화합물 X-1	335	60	6.06×10^{-4}	3.64×10^{-2}
비교예 화합물 X-3	341	35	6.06×10^{-4}	2.12×10^{-2}

표 2에서 실시에 화합물들의 청색 형광 효율 지수는 약 3.56×10 내지 9.04×10 이며, 비교예 화합물 X-1 및 X-3의 청색 형광 효율 지수는 각각 3.64×10^{-2} 및 2.12×10^{-2} 이었다. 이와 같이, 실시에 화합물들은 비교예 화합물들에 비하여 높은 청색 상대비시감도를 나타내므로 표시 장치 등의 용도에 있어서 고효율의 청색 발광 성분으로 사용될 수 있다고 판단된다.

(유기 전계 발광 소자의 제작)

실시에 화합물 43, 61 및 81을 발광층 도펀트 재료로 이용하여 실시에 1 내지 실시에 3의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

실시에 1 내지 3의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 약 1500Å 두께의 제1 전극(EL1)을 형성하고 초순수로 세정하여, 10분간 UV 오존 처리를 실시하였다. NPB로 약 400Å 두께의 정공 주입층(HIL)을 형성하고, PPF에 실시에 화합물들을 20% 비율로 도핑한 200Å 두께의 발광층(EML)을 형성하였다. PPF를 이용하여 100Å 두께의 정공 저지층(HBL)을 형성하고, TPBi로 300Å 두께의 전자 수송층(ETL)을 형성 하고, Liq로 두께 10Å의 전자 주입층(EIL)을 형성하였다. Al로 1000Å 두께의 제2 전극(EL2)을 형성하였다. 각 층은 모두 진공 증착 장치를 이용하여 진공 증착법으로 형성하였다.

(유기 전계 발광 소자의 특성 평가)

실시에 및 비교예에 의한 유기 전계 발광 소자의 특성을 평가하기 위해 외부 양자 효율의 최댓값을 평가하였다. 유기 전계 발광 소자의 전압 및 전류 밀도는 소스미터(Keithley Instrument사, 2400 series)를 이용하여 측정하고, 휘도 및 외부 양자 효율은 하마마쓰 Photonics사의 외부 양자 효율 측정 장치 C9920-12를 이용하여 측정하였다.

표 3

소자작성예	발광층 도펀트	$\lambda_{\max}$ (nm)	EQEmax (%)	최대 전류 효율 (cd/A)
실시에 1	화합물 43	471	5.2	9.1
실시에 2	화합물 61	489	20.9	46.7
실시에 3	화합물 81	459	13.3	16.1

표 3의 결과를 참조하면, 실시에 1 내지 3은 약 459 nm 내지 약 489 nm의 파장 영역의 심청색 또는 청록색 광을 발광하므로, 자외선 또는 보라색 파장 영역의 광을 발광하는 비교예들(표 2 참조)에 비하여 청색 발광 소자의 재료로 사용 되기 적합하다. 또한 실시에 1 내지 3은 약 5.2% 이상 20.9% 이하의 외부 양자 효율 및 약 9.1 cd/A

이상 약 46.7 cd/A 이하의 최대 전류 효율 값을 가지며 일반적으로 5% 이하의 외부 양자 효율을 갖는 기타 형광 발광 재료와 비교할 때, 고효율 특성을 갖는 것으로 확인된다. 특히 실시예 2 및 실시예 3의 경우 약 13.3% 및 20.9%의 외부 양자 효율을 갖는 바 우수한 발광 효율을 보이는 것이 확인된다.

[0236] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 화학식 1로 표시되는 전자 공여부 및 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 전자 수용부를 포함한다. 화학식 2-1로 표시되는 전자 공여부와 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 전자 수용부의 입체적 특성으로 인하여 분자 구조 중에 뒤틀림이 발생하고, HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital, 최고 점유 분자 궤도함수)와 LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital, 최저 점유 분자 궤도함수)가 분리된다. HOMO와 LUMO의 분리에 의해, ΔE_{ST} 가 작아지고, 그 결과 역항간 교차(reverse intersystem crossing)가 발생하기 쉬워지므로, 일 실시예의 다환 화합물은 열 활성화 지연 형광 재료로 기능하는 것으로 판단된다.

[0237] 또한, 화학식 2-1 및 화학식 2-2 각각은 전자 수용성(또는 전자 결핍성) 원자인 B가 전자 공여성 원자인 O 또는 S와 직접 결합된 borinate ester(화학식 2-1) 또는 boronate ester(화학식 2-2) 구조를 포함하므로, O 또는 S에 의해 B의 전자 결핍성이 완화되어, 청색 파장영역의 광을 발광하는 열 활성화 지연 형광 재료로서 기능하는 것으로 판단된다.

[0238] 일 실시예의 다환 화합물은 전자 공여부 및 전자 공여부와 결합된 전자 수용부를 포함하는 다환 화합물을 포함한다. 전자 공여부는 아크리딘(acridine) 유도체 또는 디벤조 아자실린(dibenzo azasiline) 유도체를 포함할 수 있다. 전자 수용부는 고리 형성 원자로 B, 및 B와 직접 결합하는 O 또는 S를 포함하고, 3개 또는 5개의 6각 고리가 축합된 헤테로고리기를 포함할 수 있다.

[0239] 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 고효율을 달성할 수 있다.

[0240] 일 실시예에 따른 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자에 적용되어 고효율화에 기여할 수 있다.

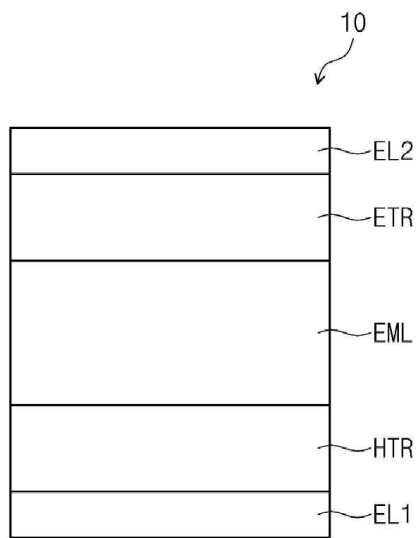
[0241] 이상, 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

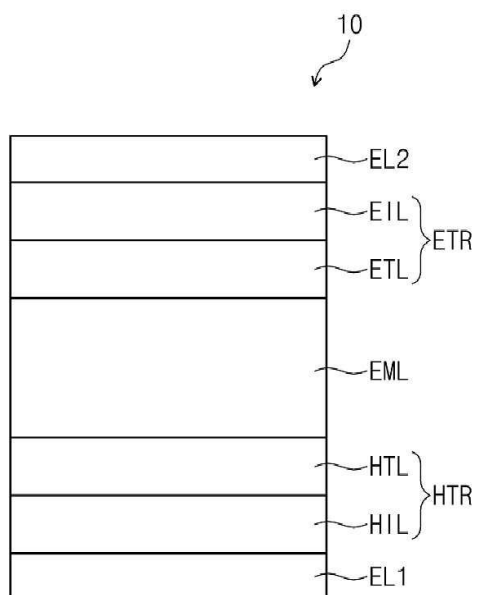
[0242]	10 : 유기 전계 발광 소자	EL1 : 제1 전극
	EL2 : 제2 전극	HTR : 정공 수송 영역
	EML : 발광층	ETR : 전자 수송 영역

도면

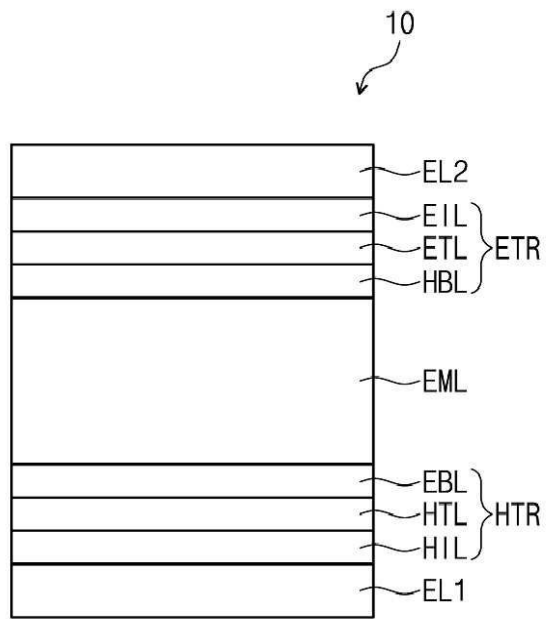
도면1



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	KR1020200078755A	公开(公告)日	2020-07-02
申请号	KR1020180167210	申请日	2018-12-21
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司 让我们用这个库的库号九州钻石恋		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 고쿠리쓰다이가쿠호진규슈다이가쿠		
发明人	미야자키, 유키 후지타, 요시마사 야스다, 다쿠마 마쓰오, 교헤이		
IPC分类号	H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/008 H01L51/0071 H01L51/0094 H01L51/5012 H01L51/5024 H01L51/5048		

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,该有机电致发光器件在发光层中包括含有电子给体和电子受体的多环化合物,该电子给体包括a啞衍生物或二苯并氮杂阿扎西林衍生物,并且该电子接受部分是成环反应器B。 ,并且O或S直接结合到B上,并且通过包括其中耦合三个或五个六角环的杂环基团来实现装置的高效率。

