



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0057886
(43) 공개일자 2020년05월27일

- | | |
|--|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
C07D 403/14 (2006.01) C07D 405/14 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
H01L 51/0072 (2013.01)
C07D 209/82 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2018-0141922
(22) 출원일자 2018년11월16일
심사청구일자 없음</p> | <p>(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)</p> <p>(72) 발명자
후지타, 요시마사
일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초 2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내
호시, 게이코
일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초 2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내
미야자키, 유키
일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초 2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내</p> <p>(74) 대리인
특허법인 고려</p> |
|--|---|

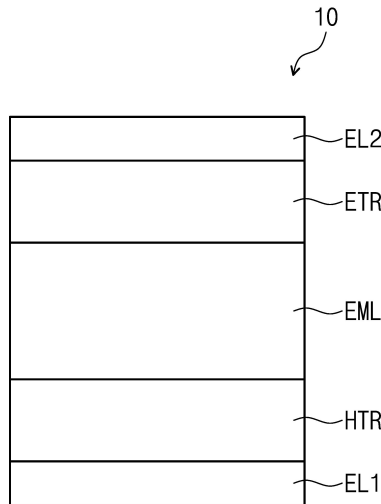
전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 발광층을 포함하고, 발광층은 적어도 하나의 시아노기로 치환된 제1 페닐기, 및 제1 페닐기와 직접 결합하며 5개의 치환 또는 비치환된 카바졸기들로 치환된 제2 페닐기를 포함하는 화합물을 포함하여 심청색의 파장 영역에서 양호한 수명 특성을 나타낼 수 있다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 403/14 (2013.01)

C07D 405/14 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 제2 전극; 및

상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 배치된 발광층; 을 포함하고,

상기 발광층은 적어도 하나의 시아노기로 치환된 제1 페닐기, 및 상기 제1 페닐기와 직접 결합하며 5개의 치환 또는 비치환된 카바졸기들로 치환된 제2 페닐기를 포함하는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 2

제 1항에 있어서,

상기 적어도 하나의 시아노기는 상기 제2 페닐기에 대하여 파라(para) 위치 또는 메타(meta) 위치에 치환된 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 3

제 1항에 있어서,

상기 카바졸기는 비치환된 카바졸기, 고리 형성 탄소수 6 이상 18 이하의 아릴기로 치환된 카바졸기, 또는 고리 형성 탄소수 5 이상 18 이하의 헤테로아릴기로 치환된 카바졸기인 유기 전계 발광 소자.

청구항 4

제 1항에 있어서,

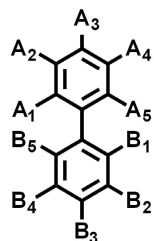
상기 제2 페닐기는 페닐기로 치환된 카바졸기 또는 피리딘기로 치환된 카바졸기를 적어도 하나 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 5

제 1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]

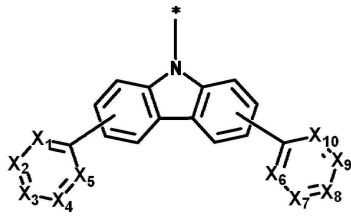


상기 화학식 1에서,

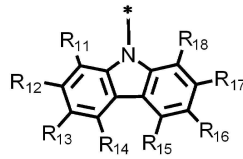
A₁ 내지 A₅ 중 적어도 하나는 시아노기이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

B₁ 내지 B₅ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2-1로 표시되고 나머지는 하기 화학식 2-2로 표시된다:

[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1에서, X₁ 내지 X₁₀은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고,

R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

상기 화학식 2-2에서,

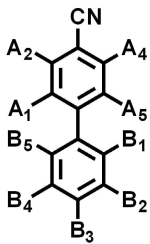
R₁₁ 내지 R₁₈은 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 6

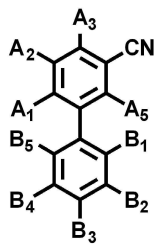
제 5항에 있어서,

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

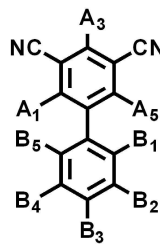
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



[화학식 1-3]



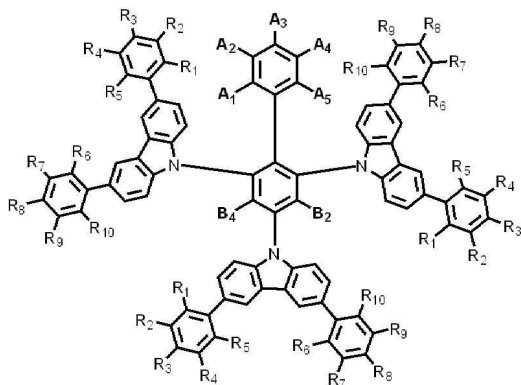
상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-3에서, A₁ 내지 A₅, 및 B₁ 내지 B₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 7

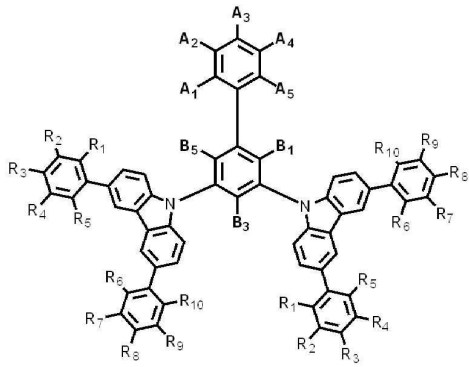
제 5항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-4 또는 화학식 1-5로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-4]



[화학식 1-5]



상기 화학식 1-4에서 B₂ 및 B₄는 상기 화학식 2-2로 표시되고, 상기 화학식 1-5에서 B₁, B₃, 및 B₅는 상기 화학식 2-2로 표시되며,

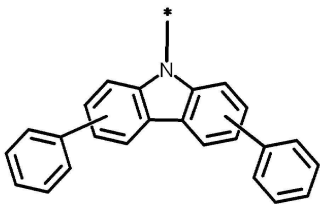
상기 화학식 1-4 및 화학식 1-5에서, A₁ 내지 A₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 8

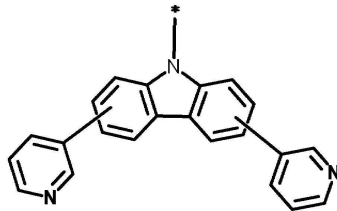
제 5항에 있어서,

상기 화학식 2-1은 하기 하기 화학식 2-1A 또는 화학식 2-1B 표시되고, 상기 화학식 2-2는 하기 화학식 2-2A로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

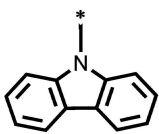
[화학식 2-1A]



[화학식 2-1B]



[화학식 2-2A]



청구항 9

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 지연 형광을 방출하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하는 지연 형광 발광층이고,

상기 도펀트는 상기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 11

제 1항에 있어서,

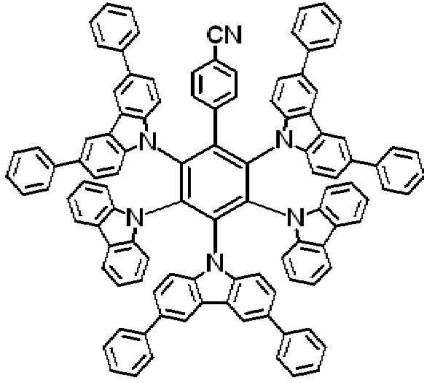
상기 발광층은 중심 파장이 430nm 이상 490nm 이하인 청색광을 방출하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 12

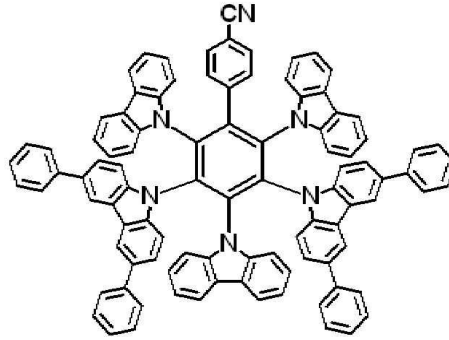
제 1항에 있어서,

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

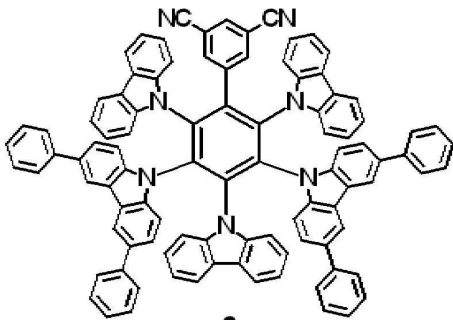
[화합물군 1]



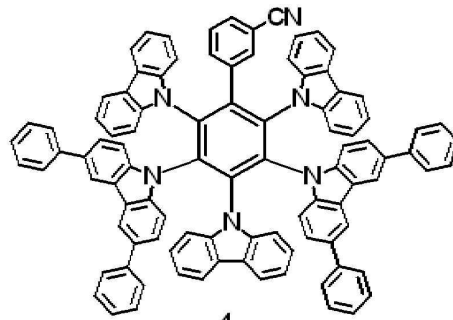
1



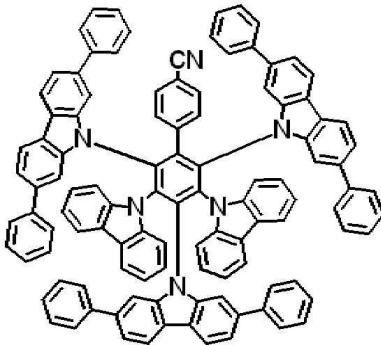
2



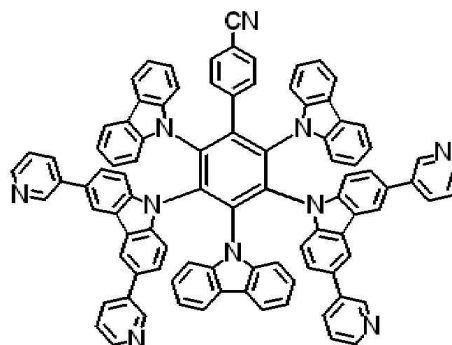
3



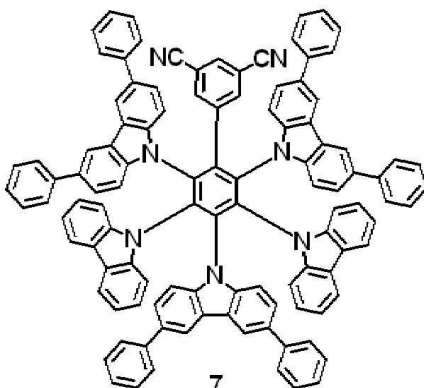
4



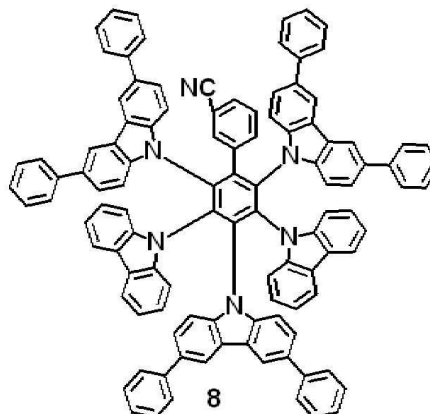
5



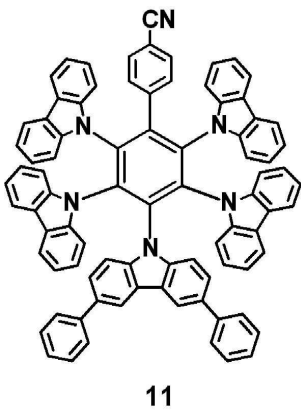
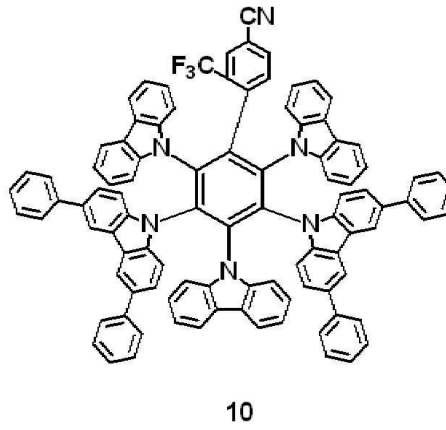
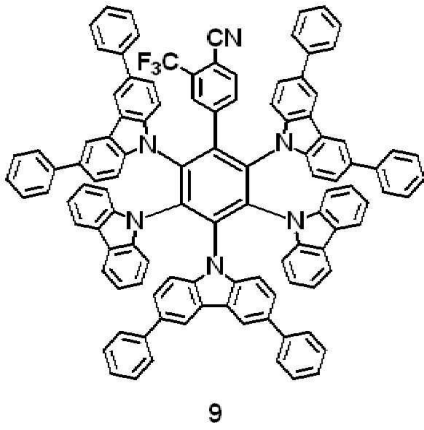
6



7



8



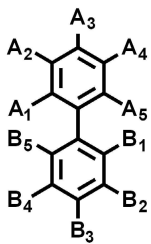
청구항 13

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 제2 전극; 및

상기 제1 전극 및 상기 제2 전극 사이에 배치되고 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 발광층; 을 포함하는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



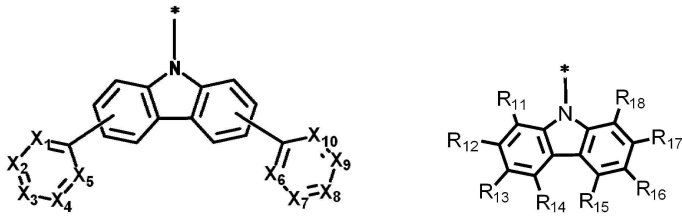
상기 화학식 1에서,

A₁ 내지 A₅ 중 적어도 하나는 시아노기이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

B₁ 내지 B₅ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2-1로 표시되고 나머지는 하기 화학식 2-2로 표시된다:

[화학식 2-1]

[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1에서, X₁ 내지 X₁₀은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고,

R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

상기 화학식 2-2에서,

R₁₁ 내지 R₁₈은 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 14

제 13항에 있어서,

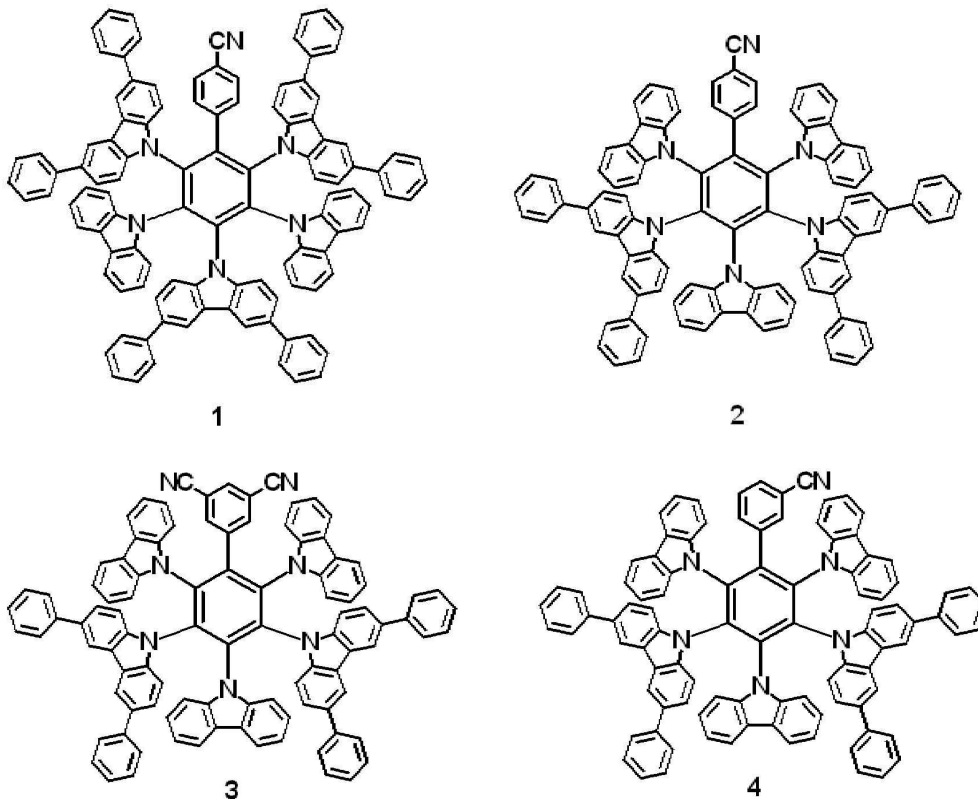
상기 발광층은 중심 파장이 430nm 이상 490nm 이하인 청색광을 방출하는 유기 전계 발광 소자.

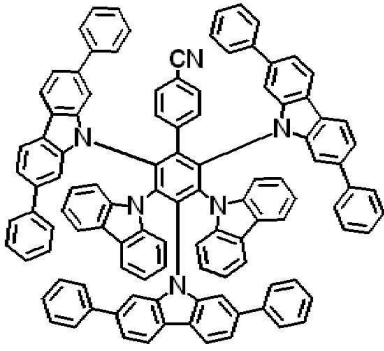
청구항 15

제 13항에 있어서,

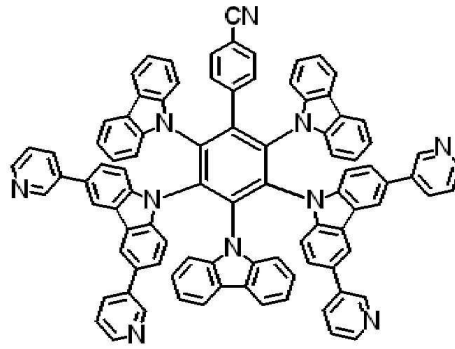
상기 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나인 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]

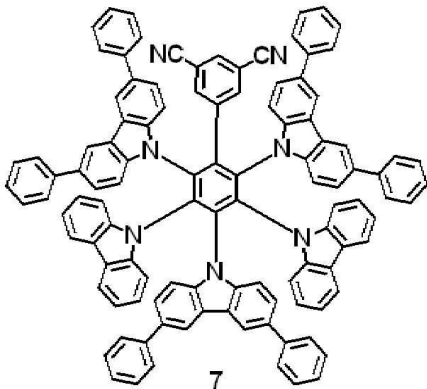




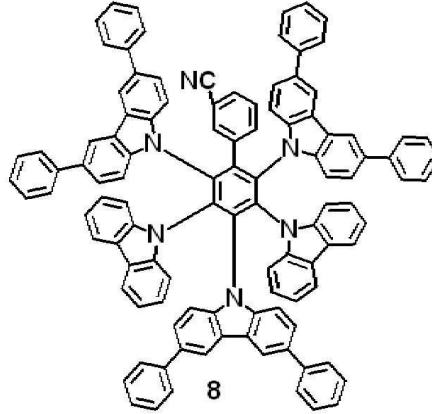
5



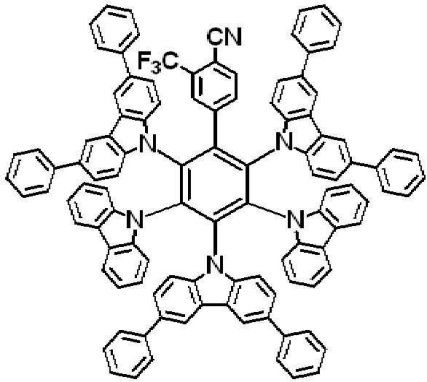
6



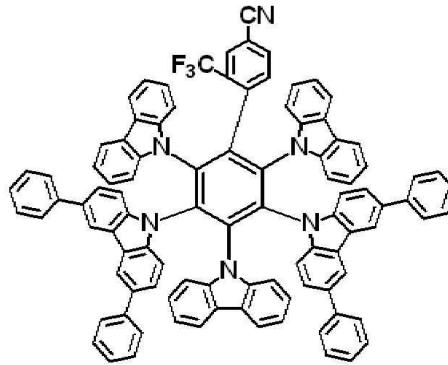
7



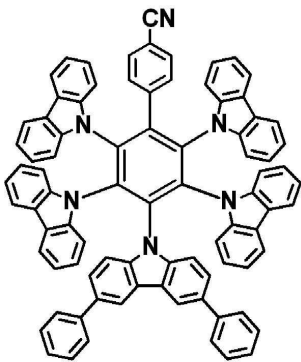
8



9



10

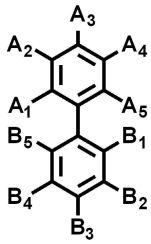


11

청구항 16

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



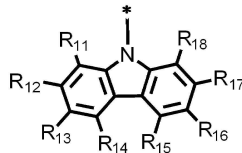
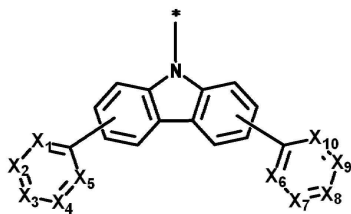
상기 화학식 1에서,

A₁ 내지 A₅ 중 적어도 하나는 시아노기이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

B₁ 내지 B₅ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2-1로 표시되고 나머지는 하기 화학식 2-2로 표시된다:

[화학식 2-1]

[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1에서, X₁ 내지 X₁₀은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고,

R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

상기 화학식 2-2에서,

R₁₁ 내지 R₁₈은 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 17

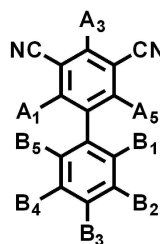
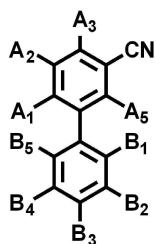
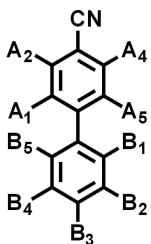
제 16항에 있어서,

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

[화학식 1-1]

[화학식 1-2]

[화학식 1-3]



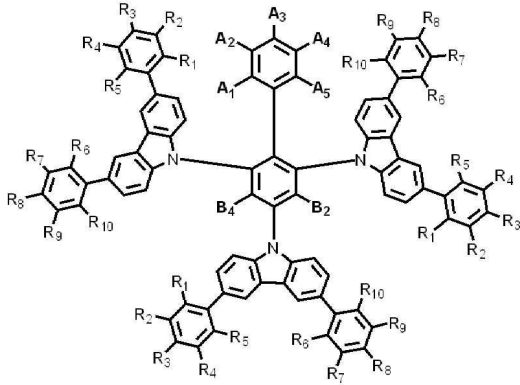
상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-3에서, A₁ 내지 A₅, 및 B₁ 내지 B₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 18

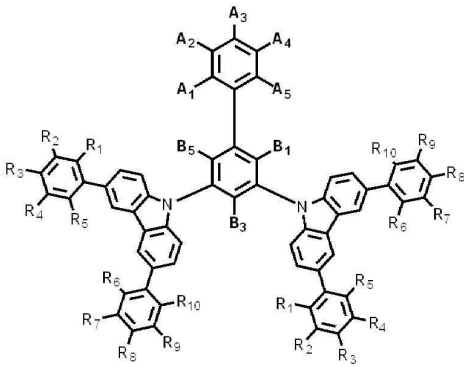
제 16항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-4 또는 화학식 1-5로 표시되는 화합물:

[화학식 1-4]



[화학식 1-5]



상기 화학식 1-4에서 B₂ 및 B₄는 상기 화학식 2-2로 표시되고, 상기 화학식 1-5에서 B₁, B₃, 및 B₅는 상기 화학식 2-2로 표시되며,

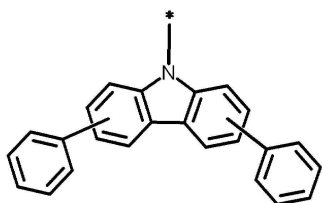
상기 화학식 1-4 및 화학식 1-5에서, A₁ 내지 A₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 19

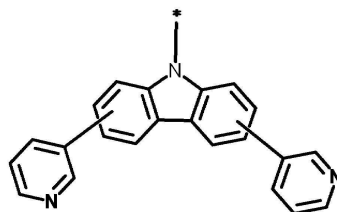
제 16항에 있어서,

상기 화학식 2-1은 하기 화학식 2-1A 또는 화학식 2-1B로 표시되고, 상기 화학식 2-2는 하기 화학식 2-2A로 표시되는 화합물:

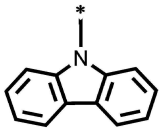
[화학식 2-1A]



[화학식 2-1B]



[화학식 2-2A]

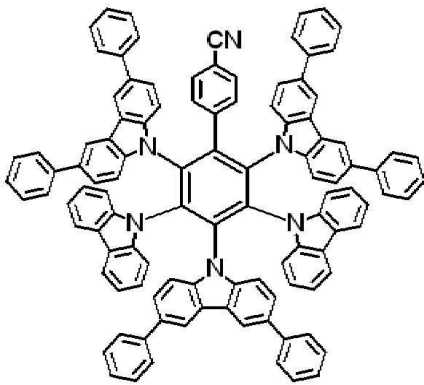


청구항 20

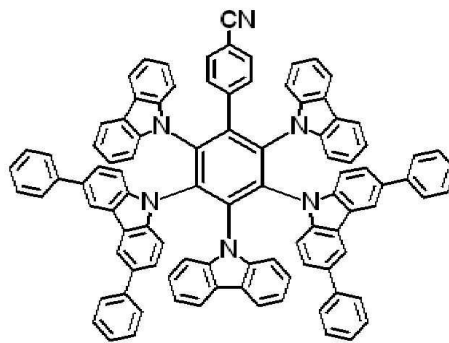
제 16항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나인 화합물:

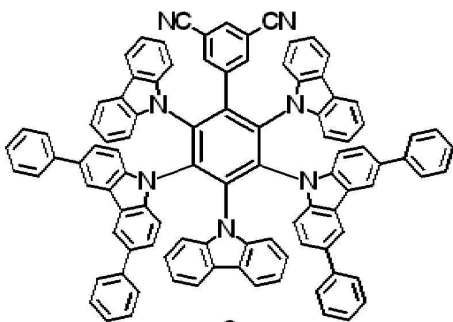
[화합물군 1]



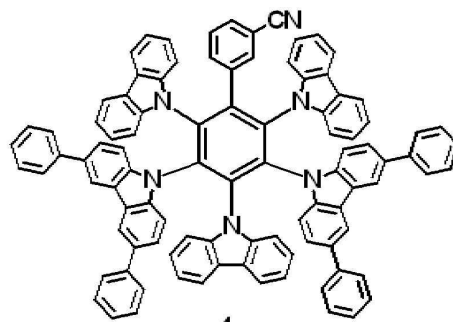
1



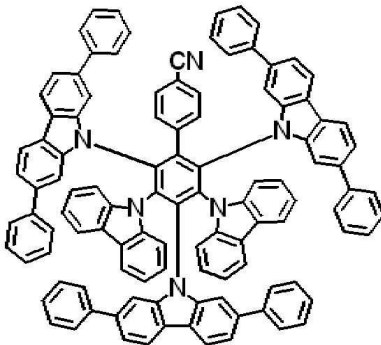
2



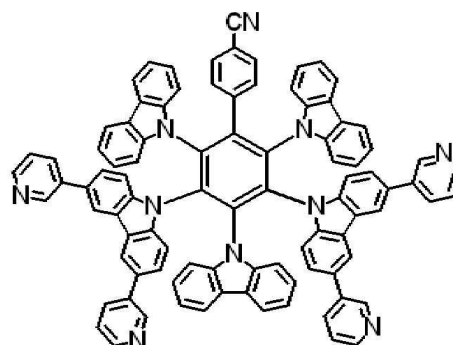
3



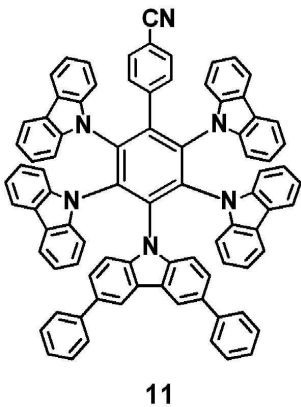
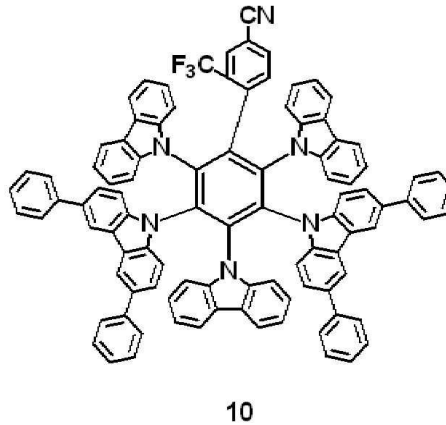
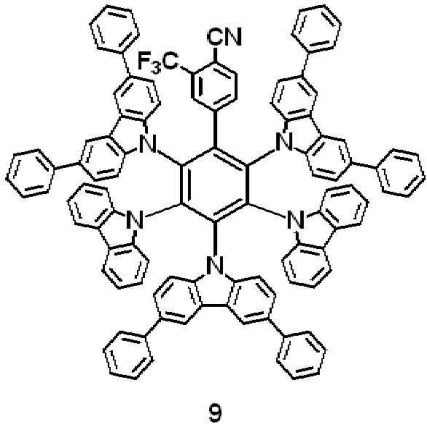
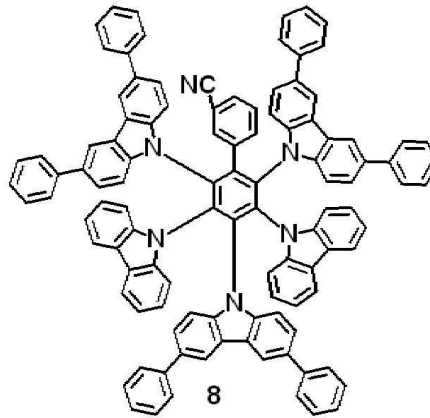
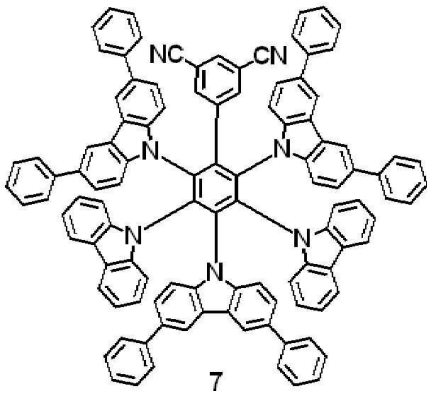
4



5



6



발명의 설명

기술분야

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

배경기술

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

[0003] 유기 전계 발광 소자를 표시 장치에 응용함에 있어서는, 유기 전계 발광 소자의 저 구동 전압화, 고 발광 효율

화 및 장수명화가 요구되고 있으며, 이를 안정적으로 구현할 수 있는 유기 전계 발광 소자용 재료 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

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

발명의 내용

해결하려는 과제

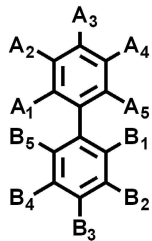
[0005] 본 발명의 목적은 양호한 수명 특성을 가지면서 심청색(Deep Blue)광을 발광하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

[0006] 본 발명의 다른 목적은 심청색 광을 방출하는 유기 전계 발광 소자용 재료인 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

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

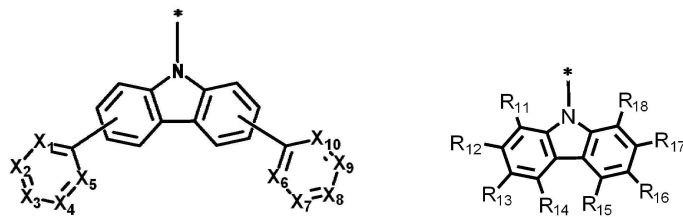
[0008] [화학식 1]



[0009] 상기 화학식 1에서, A₁ 내지 A₅ 중 적어도 하나는 시아노기이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, B₁ 내지 B₅ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2-1로 표시되고 나머지는 하기 화학식 2-2로 표시된다.

[0011] [화학식 2-1]

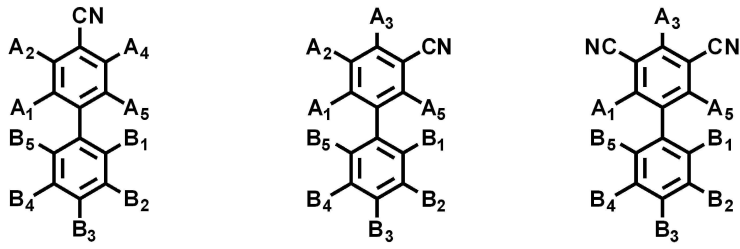
[화학식 2-2]



[0012] 상기 화학식 2-1에서, X₁ 내지 X₁₀은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고, R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, 상기 화학식 2-2에서, R₁₁ 내지 R₁₈은 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0014] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0015] [화학식 1-1] [화학식 1-2] [화학식 1-3]

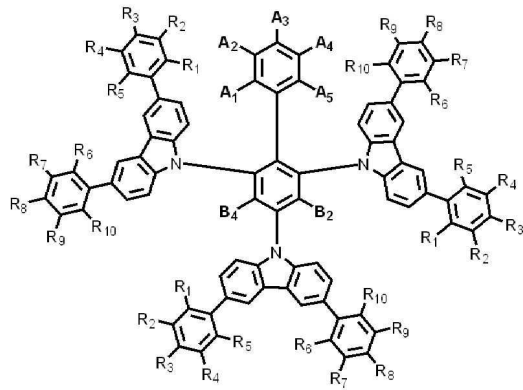


[0016]

[0017] 상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-3에서, A₁ 내지 A₅, 및 B₁ 내지 B₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

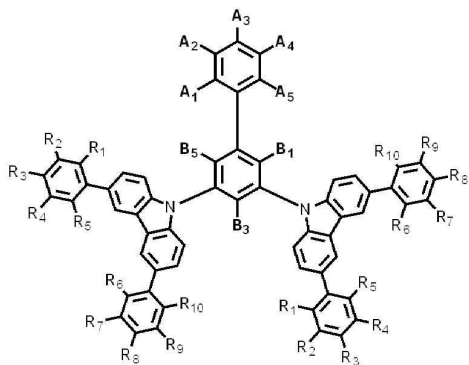
[0018] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-4 또는 화학식 1-5로 표시될 수 있다.

[0019] [화학식 1-4]



[0020]

[0021] [화학식 1-5]



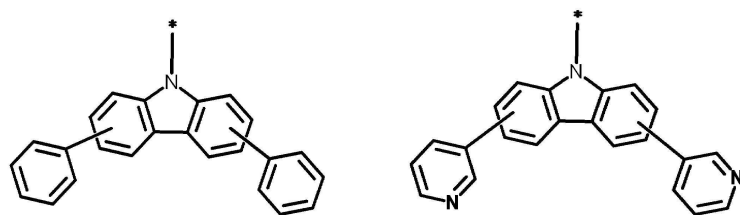
[0022]

[0023] 상기 화학식 1-4에서 B₂ 및 B₄는 상기 화학식 2-2로 표시되고, 상기 화학식 1-5에서 B₁, B₃, 및 B₅는 상기 화학식 2-2로 표시되며, 상기 화학식 1-4 및 화학식 1-5에서, A₁ 내지 A₅는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0024] 상기 화학식 2-1은 하기 화학식 2-1A 또는 화학식 2-1B로 표시되고, 상기 화학식 2-2는 하기 화학식 2-2A로 표시될 수 있다.

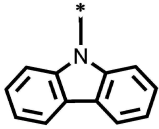
[0025] [화학식 2-1A]

[화학식 2-1B]



[0026]

[0027] [화학식 2-2A]



[0028]

[0029] 다른 실시예는 제1 전극; 상기 제1 전극 상에 배치된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 배치된 발광층; 을 포함하고, 상기 발광층은 적어도 하나의 시아노기로 치환된 제1 페닐기, 및 상기 제1 페닐기와 직접 결합하며 5개의 치환 또는 비치환된 카바졸기들로 치환된 제2 페닐기를 포함하는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0030] 상기 적어도 하나의 시아노기는 상기 제2 페닐기에 대하여 파라(para) 위치 또는 메타(meta) 위치에 치환된 것일 수 있다.

[0031] 상기 카바졸기는 비치환된 카바졸기, 고리 형성 탄소수 6 이상 18 이하의 아릴기로 치환된 카바졸기, 또는 고리 형성 탄소수 5 이상 18 이하의 헤테로아릴기로 치환된 카바졸기일 수 있다.

[0032] 상기 제2 페닐기는 페닐기로 치환된 카바졸기 또는 피리딘기로 치환된 카바졸기를 적어도 하나 포함할 수 있다.

[0033] 유기 전계 발광 소자에서 상기 화합물은 상기 설명한 화학식 1로 표시될 수 있다.

[0034] 상기 발광층은 지연 형광을 방출할 수 있다.

[0035] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하는 지연 형광 발광층이고, 상기 도펀트는 상기 화합물을 포함할 수 있다.

[0036] 상기 발광층은 중심 파장이 430nm 이상 490nm 이하인 청색광을 방출할 수 있다.

발명의 효과

[0037] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 심청색 광을 방출하며 양호한 수명 특성을 나타낼 수 있다.

[0038] 일 실시예의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광층에 포함되어 심청색 광을 방출하게 할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0039] 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

[0040] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

[0041] 본 명세서에서, 어떤 구성요소(또는 영역, 층, 부분 등)가 다른 구성요소 "상에 있다", "연결 된다", 또는 "결합된다"고 언급되는 경우에 그것은 다른 구성요소 상에 직접 배치/연결/결합될 수 있거나 또는 그들 사이에 제3의 구성요소가 배치될 수도 있다는 것을 의미한다.

[0042] 동일한 도면부호는 동일한 구성요소를 지칭한다. 또한, 도면들에 있어서, 구성요소들의 두께, 비율, 및 치수는 기술적 내용의 효과적인 설명을 위해 과장된 것이다.

[0043] "및/또는"은 연관된 구성들이 정의할 수 있는 하나 이상의 조합을 모두 포함한다.

[0044] 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.

- [0045] 또한, "아래에", "하측에", "위에", "상측에" 등의 용어는 도면에 도시된 구성들의 연관관계를 설명하기 위해 사용된다. 상기 용어들은 상대적인 개념으로, 도면에 표시된 방향을 기준으로 설명된다.
- [0046] 다르게 정의되지 않는 한, 본 명세서에서 사용된 모든 용어 (기술 용어 및 과학 용어 포함)는 본 발명이 속하는 기술 분야의 당업자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 갖는다. 또한, 일반적으로 사용되는 사전에서 정의된 용어와 같은 용어는 관련 기술의 맥락에서 의미와 일치하는 의미를 갖는 것으로 해석되어야 하고, 이상적인 또는 지나치게 형식적인 의미로 해석되지 않는 한, 명시적으로 여기에서 정의된다.
- [0047] "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.
- [0048] 이하, 도면들을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자 및 이에 포함된 일 실시예의 화합물에 대하여 설명한다.
- [0049] 도 1 내지 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 1 내지 도 3을 참조하면, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)은 서로 마주하고 배치되며, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에는 발광층(EML)이 배치될 수 있다.
- [0050] 또한, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 발광층(EML) 이외에 복수의 유기층들을 더 포함한다. 복수의 유기층들은 정공 수송 영역(HTR) 및 전자 수송 영역(ETR)을 포함할 수 있다. 즉, 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 순차적으로 적층된 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR), 및 제2 전극(EL2)을 포함할 수 있다.
- [0051] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 발광층(EML)에 후술하는 일 실시예의 화합물을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 발광층(EML) 이외에 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 복수의 유기층들 중 적어도 하나의 유기층에 후술하는 일 실시예의 화합물을 더 포함할 수 있다.
- [0052] 한편, 도 2는 도 1과 비교하여, 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL) 및 전자 수송층(ETL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 또한, 도 3은 도 1과 비교하여 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 및 전자 저지층(EBL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL), 전자 수송층(ETL), 및 정공 저지층(HBL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다.
- [0053] 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.
- [0054] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 버퍼층(미도시), 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 예를 들어, 약 50Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.
- [0055] 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0056] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 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.

[0057] 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0058] 정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine) 화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4"-[tris(3-methylphenyl)phenylamino] triphenylamine), TDATA(4,4'4"-Tris(N,N'-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4"-tris(N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino)-triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS(Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate)), NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium [Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.

[0059] 정공 수송층(HTL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl), mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene) 등을 더 포함할 수도 있다.

[0060] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 50Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0061] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-7,7',8,8'-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0062] 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.

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

[0064] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 일 실시예의 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 적어도 하나의 시아노기로 치환된 제1 페닐기, 및 제1 페닐기와 직접 결합하며 5개의 치환 또는 비치환된 카바졸기들로 치환된 제2 페닐기를 포함하는 일 실시예의 화합물을

포함할 수 있다.

- [0065] 일 실시예의 화합물에서 제1 페닐기는 하나 또는 두 개의 시아노기를 치환기로 포함하는 것일 수 있다. 제1 페닐기에서 시아노기가 치환되지 않은 나머지 부분은 비치환된 것이거나, 또는 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기로 치환된 것일 수 있다.
- [0066] 제1 페닐기에서 치환된 적어도 하나의 시아노기는 제2 페닐기에 대하여 파라(para) 위치, 또는 메타(meta) 위치에 치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 제1 페닐기가 하나의 시아노기로 치환된 경우 시아노기는 제2 페닐기에 대하여 파라 위치 또는 메타 위치에 치환된 것일 수 있다. 또한, 예를 들어 제1 페닐기가 두 개의 시아노기로 치환된 경우 두 개의 시아노기들은 모두 제2 페닐기에 대하여 메타 위치에 치환된 것일 수 있다.
- [0067] 일 실시예의 화합물에서 제2 페닐기에 치환된 카바졸기는 비치환된 카바졸기, 고리 형성 탄소수 6 이상 18 이하의 아릴기로 치환된 카바졸기, 또는 고리 형성 탄소수 5 이상 18 이하의 헤테로아릴기로 치환된 카바졸기일 수 있다. 예를 들어, 제2 페닐기에 치환된 카바졸기는 비치환된 카바졸기이거나, 페닐기로 치환된 카바졸기, 또는 피리딘기로 치환된 카바졸기일 수 있다.
- [0068] 일 실시예의 화합물에서 제2 페닐기는 아릴기로 치환된 카바졸기 또는 헤테로아릴기로 치환된 페닐기를 적어도 하나 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 제2 페닐기는 페닐기로 치환된 카바졸기를 적어도 하나 치환기로 포함하거나, 피리딘기로 치환된 카바졸기를 적어도 하나 치환기로 포함하는 것일 수 있다. 일 실시예에서, 제2 페닐기는 페닐기로 치환된 카바졸기들 복수 개를 치환기들로 포함하거나, 피리딘기로 치환된 카바졸기들 복수 개를 치환기들로 포함할 수 있다. 제2 페닐기는 페닐기로 치환된 카바졸기들을 치환기로 두 개 또는 세 개 포함할 수 있다. 또는 제2 페닐기는 피리딘기로 치환된 카바졸기들을 치환기로 두 개 또는 세 개 포함할 수 있다.
- [0069] 또한, 아릴기로 치환된 카바졸기 또는 헤테로아릴기로 치환된 카바졸기로 치환되지 않은 제2 페닐기의 나머지 부분들은 비치환된 카바졸기들로 치환된 것일 수 있다. 즉, 제2 페닐기에서 제1 페닐기와 결합되는 부분을 제외한 나머지 부분들은 모두 치환 또는 비치환된 카바졸기로 치환된 것일 수 있다.
- [0070] 한편, 제2 페닐기에 치환된, 페닐기로 치환된 카바졸기에서 카바졸기에 치환된 치환기인 페닐기는 카바졸의 벤젠고리에 각각 치환된 것일 수 있다. 벤젠고리에 각각 치환된 페닐기들은 서로 대칭되는 위치에 치환된 것일 수 있다. 또한, 제2 페닐기에 치환된 피리딘기로 치환된 카바졸기에서 카바졸기에 치환된 치환기인 피리딘기는 카바졸의 벤젠고리에 각각 치환된 것일 수 있다. 벤젠고리에 각각 치환된 피리딘기들은 서로 대칭되는 위치에 치환된 것일 수 있다.
- [0071] 일 실시예의 화합물에서 제1 페닐기에 치환된 적어도 하나의 시아노기는 전자 수용부(Electron Acceptor)이고, 치환 또는 비치환된 카바졸기로 치환된 제2 페닐기는 전자 공여부(Electron Donor)일 수 있다.
- [0072] 한편, 제1 페닐기는 치환기인 시아노기와 제2 페닐기를 연결하는 링커일 수 있다. 일 실시예의 화합물은 전자 수용성을 갖는 시아노기와 전자 공여성을 갖는 제2 페닐기 사이에 링커로 제1 페닐기를 더 포함함으로써 단파장 영역의 청색광을 방출하는 발광 재료로 사용될 수 있다. 즉, 일 실시예의 화합물은 심청색의 광을 방출하는 발광 재료로 사용될 수 있다.
- [0073] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 옥시기, 티오기, 설퍼닐기, 설폰닐기, 카보닐기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 탄화수소 고리기, 아릴기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 비페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.
- [0074] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0075] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 50 이하, 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 6 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2-에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기,

2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

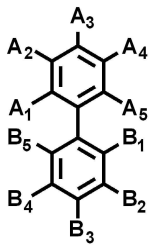
[0076] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 또는 6 이상 15 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀸크페닐기, 섹시페닐기, 트리페닐에닐기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0077] 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, 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-헤테로아릴 카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨란기, 페난트롤린기, 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 페노티아진기, 디벤조실롤기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0078] 한편, 본 명세서에서 "—*" 는 연결되는 위치를 의미한다.

[0079] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0080] [화학식 1]



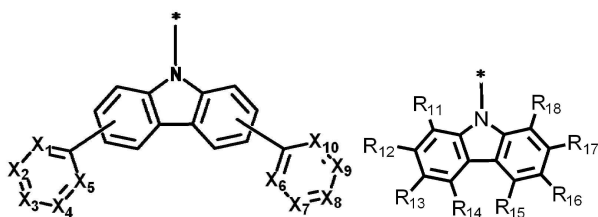
[0081]

[0082] 상기 화학식 1에서, A₁ 내지 A₅ 중 적어도 하나는 시아노기이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

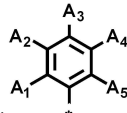
[0083] 또한, 화학식 1에서 B₁ 내지 B₅ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2-1로 표시되고 나머지는 하기 화학식 2-2로 표시될 수 있다.

[0084] [화학식 2-1]

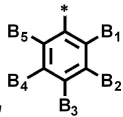
[화학식 2-2]



[0085]



[0086] 화학식 1에서 A₁ 내지 A₅가 치환된 페닐기인 " "는 상술한 제1 페닐기이고, B₁ 내지 B₅가 치환된 페닐



기인 " "는 상술한 제2 페닐기에 해당한다.

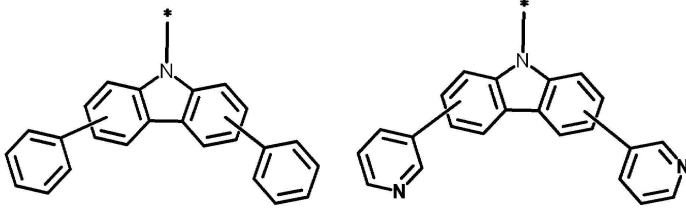
[0087] 화학식 2-1에서, X₁ 내지 X₁₀은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고, R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 예를 들어, 화학식 2-1에서 X₁ 내지 X₁₀은 모두 CR₁일 수 있다. 한편, 이 때 R₁은 모두 수소 원자일 수 있다.

[0088] 또한, 화학식 2-1에서 X₁ 내지 X₅ 중 어느 하나 및 X₆ 내지 X₁₀ 중 어느 하나는 N일 수 있다. X₁ 내지 X₅ 중 선택된 어느 하나 및 X₆ 내지 X₁₀ 중 선택된 어느 하나는 N이고 나머지는 CR₁이며 이 때 R₁은 모두 수소 원자일 수 있다.

[0089] 화학식 2-2에서 R₁₁ 내지 R₁₈은 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 예를 들어, 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 카바졸기에서 R₁ 및 R₁₁ 내지 R₁₈은 모두 수소 원자일 수 있다. 즉, 화학식 2-1은 하기 화학식 2-1A 또는 화학식 2-1B로 표시되고, 화학식 2-2는 화학식 2-2A로 표시될 수 있다.

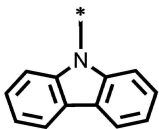
[0090] [화학식 2-1A]

[화학식 2-1B]



[0091]

[0092] [화학식 2-2A]



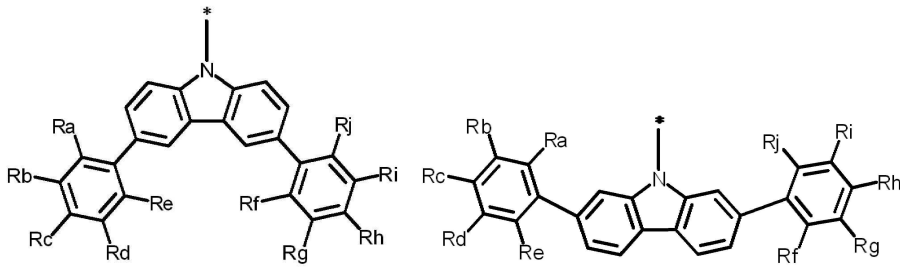
[0093]

[0094] 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며 R₁ 및 R₁₁ 내지 R₁₈은 수소 원자 이외에 각각 독립적으로 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있으며, 복수 개의 R₁ 들 중 선택되는 두 개 이상 또는 R₁₁ 내지 R₁₈ 중 선택되는 적어도 두 개 이상은 서로 동일하거나 또는 서로 상이할 수 있다.

[0095] 화학식 2-1은 하기 화학식 3-1 내지 하기 화학식 3-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0096] [화학식 3-1]

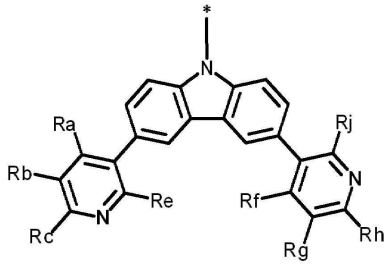
[화학식 3-2]



[0097]

[0098]

[화학식 3-3]



[0099]

[0100]

화학식 3-1 내지 화학식 3-3에서, Ra 내지 Rj는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있으며, Ra 내지 Rj 중 선택되는 적어도 두 개 이상은 서로 동일하거나 또는 서로 상이할 수 있다. 예를 들어, Ra 내지 Rj는 수소 원자일 수 있다.

[0101]

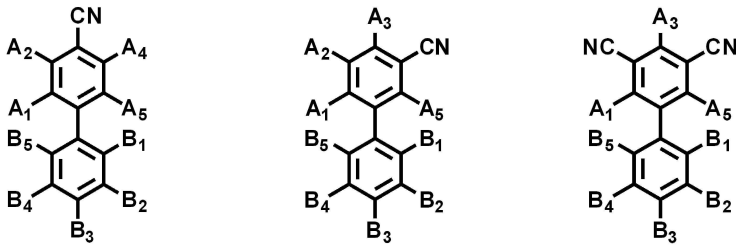
화학식 1에서 A₁ 내지 A₅중 선택되는 하나 또는 두 개는 시아노기일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-3 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0102]

[화학식 1-1]

[화학식 1-2]

[화학식 1-3]



[0103]

[0104]

화학식 1-1 및 화학식 1-2는 각각 하나의 시아노기가 제1 페닐기에 치환된 경우를 나타낸 것이고, 화학식 1-3은 두 개의 시아노기가 제1 페닐기에 치환된 경우를 나타낸 것이다.

[0105]

화학식 1-1은 치환된 시아노기가 제2 페닐기에 대하여 파라 위치에 치환된 화합물을 나타낸 것이고, 화학식 1-2는 치환된 시아노기가 제2 페닐기에 대하여 메타 위치에 치환된 화합물을 나타낸 것이다. 또한, 화학식 1-3은 두 개의 시아노기들을 치환기로 포함한 화합물을 나타낸 것으로, 두 개의 시아노기들은 각각 제2 페닐기에 대하여 메타 위치에 치환된 것에 해당한다.

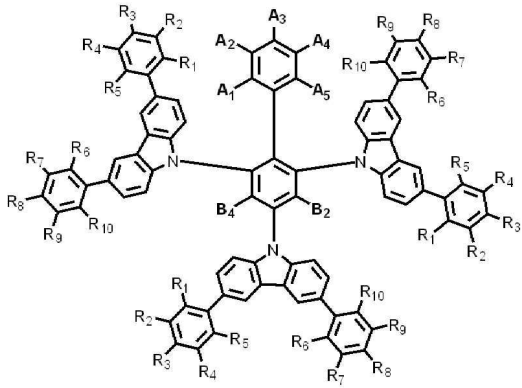
[0106]

한편, 상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-3에서, A₁ 내지 A₅, 및 B₁ 내지 B₅에 대하여는 상술한 화학식 1에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

[0107]

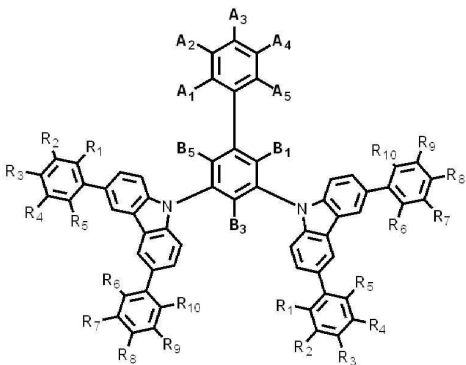
화학식 1에서 B₁ 내지 B₅중 선택되는 두 개 또는 세 개는 화학식 2-1로 표시되고 나머지는 화학식 2-2로 표시되는 것일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1은 하기 화학식 1-4 또는 화학식 1-5로 표시되는 것일 수 있다.

[0108] [화학식 1-4]



[0109]

[0110] [화학식 1-5]



[0111]

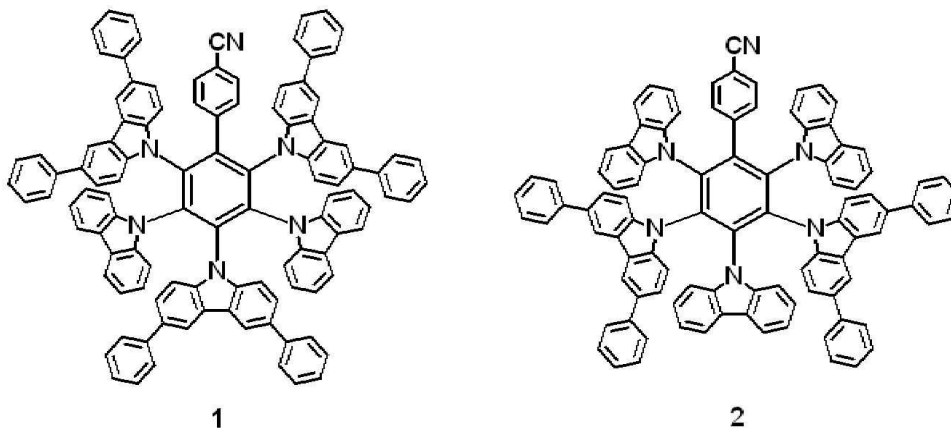
[0112] 상기 화학식 1-4에서 B₂ 및 B₄는 상술한 화학식 2-2로 표시되고, 상기 화학식 1-5에서 B₁, B₃, 및 B₅는 상술한 화학식 2-2로 표시되는 것일 수 있다.

[0113] 즉, 화학식 1-4는 제2 페닐기가 3개의 치환된 카바졸기들을 치환기들로 포함하는 경우를 나타낸 것이고, 화학식 1-5는 제2 페닐기가 2개의 치환된 카바졸기들을 치환기들로 포함하는 경우를 나타낸 것이다.

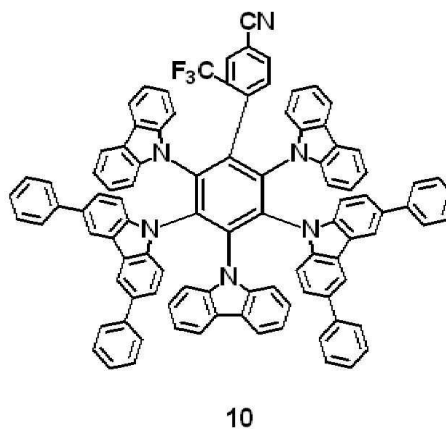
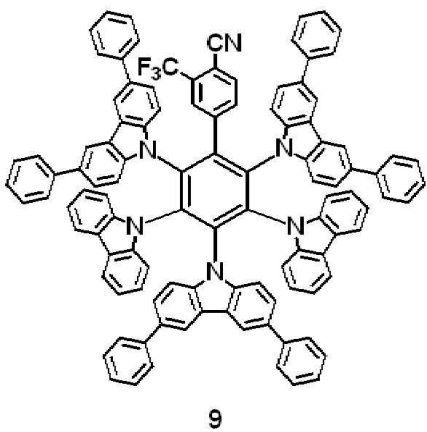
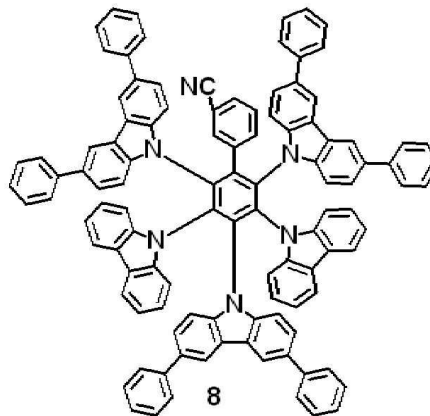
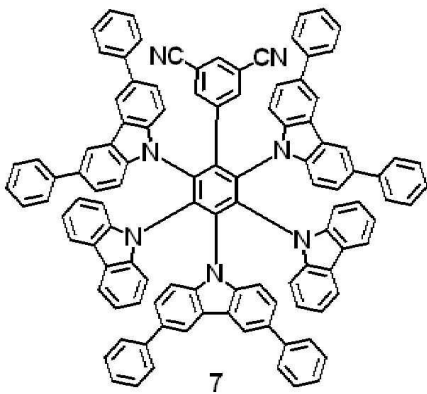
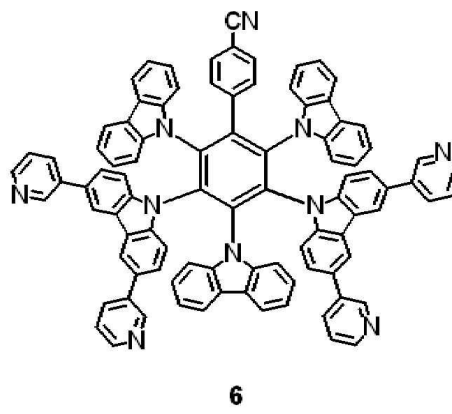
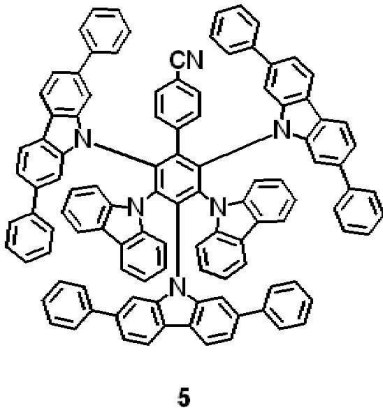
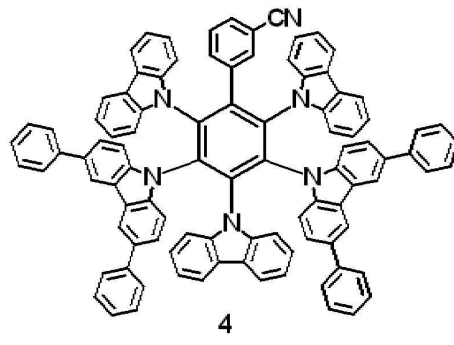
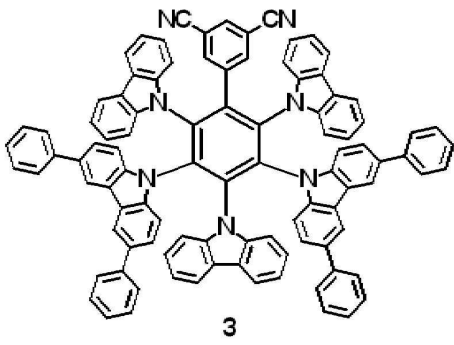
[0114] 한편, 상기 화학식 1-4 및 화학식 1-5에서, A₁ 내지 A₅에 대하여는 상술한 화학식 1에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

[0115] 일 실시예의 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나일 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나의 화합물을 발광층(EML)에 포함할 수 있다.

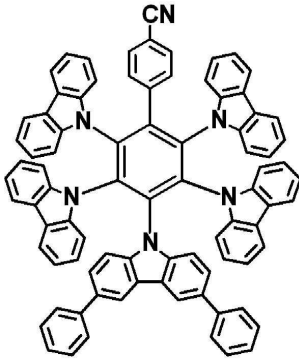
[0116] [화합물군 1]



[0117]



[0118]



11

- [0119]
- [0120] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 화합물은 열활성 지연 형광 발광 재료일 수 있다. 또한, 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 화합물은 최저 삼중항 여기 에너지 준위(T1 level)와 최저 일중항 여기 에너지 준위(S1 level)의 차이(ΔE_{ST})가 0.25eV 이하인 열활성 지연 형광 도펀트일 수 있다.
- [0121] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 화합물은 490nm 이하의 파장 영역에서 발광 중심 파장(λ_{max})을 갖는 발광 재료일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 화합물은 430nm 이상 490nm 이하의 파장 영역에서 발광 중심 파장을 갖는 발광 재료일 수 있다. 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 화합물은 심청색(Deep Blue) 열활성 지연 형광 도펀트일 수 있다.
- [0122] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 지연 형광을 방출하는 것일 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)은 열활성 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)을 방출하는 것일 수 있다.
- [0123] 한편, 도면에 도시되지는 않았으나 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 복수의 발광층들을 포함하는 것일 수 있다. 복수의 발광층들은 순차적으로 적층되어 제공되는 것일 수 있으며, 예를 들어 복수의 발광층들을 포함하는 유기 전계 발광 소자(10)는 백색광을 방출하는 것일 수 있다. 복수의 발광층들을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 탠덤(Tandem) 구조의 유기 전계 발광 소자일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 복수의 발광층들을 포함하는 경우 적어도 하나의 발광층(EML)은 상술한 일 실시예의 화합물을 포함할 수 있다.
- [0124] 일 실시예에서, 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함하며 상술한 일 실시예의 화합물을 도펀트로 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 지연 형광 발광용 호스트 및 지연 형광 발광용 도펀트를 포함할 수 있고, 상술한 일 실시예의 화합물을 지연 형광 발광용 도펀트로 포함할 수 있다. 발광층(EML)은 상술한 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나를 열활성 지연 형광 도펀트로 포함할 수 있다.
- [0125] 일 실시예에서 발광층(EML)은 지연 형광 발광층이고, 발광층(EML)은 공지의 호스트 재료 및 상술한 일 실시예의 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 일 실시예에서 화합물은 TADF 도펀트로 사용되는 것일 수 있다.
- [0126] 한편, 일 실시예에서 발광층(EML)은 공지의 호스트 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예에서 발광층(EML)은 호스트 재료로, AlQ_3 (tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(n-vinylcarbazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TCTA(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4' -bis(9-carbazolyl)-2,2' -dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO (bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide), CP1 (Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), $DPSiO_3$ (Hexaphenylcyclotrisiloxane), $DPSiO_4$ (Octaphenylcyclotetra siloxane), 또는 PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran), mCBP(3,3'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며, 제시된 호스트 재료 이외에 공지의 지연 형광 발광 호스트 재료가 포함될 수 있다.
- [0127] 한편, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 공지의 도펀트 재료를 더 포함할 수 있다. 일 실시예에서 발광층(EML)은 도펀트로 스티릴 유도체(예를 들어, 1, 4-bis[2-(3-N-ethylcarbazoryl)vinyl]benzene(BCzVB), 4-(di-p-tolylamino)-4'-[(di-p-tolylamino)styryl]stilbene(DPAVB),

N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(diphenylamino)styryl)naphthalen-2-yl)vinyl)phenyl)-N-phenylbenzenamine(N-BDAVBi), 페릴렌 및 그 유도체(예를 들어, 2, 5, 8, 11-Tetra-t-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체(예를 들어, 1, 1-dipyrene, 1, 4-dipyrenylbenzene, 1, 4-Bis(N, N-Diphenylamino)pyrene) 등의 2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene(TBP)) 등을 더 포함할 수 있다.

- [0128] 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.
- [0129] 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.
- [0130] 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.
- [0131] 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.
- [0132] 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-hydroxyquinolinato)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-yl)phenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), 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.
- [0133] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, LiQ(8-hydroxyquinolinolato-lithium), Li₂O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI와 같은 할로젠화 금속 등이 사용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭(energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0134] 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.
- [0135] 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.

[0136] 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.

[0137] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)가 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소시킬 수 있다.

[0138] 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.

[0139] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 상술한 일 실시예의 화합물을 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 발광층(EML)에 포함하여 양호한 수명 특성을 나타내며 단파장 영역의 청색광을 방출할 수 있다. 또한, 일 실시예에 따른 화합물은 열활성 지연 형광 도펀트일 수 있으며, 발광층(EML)은 일 실시예의 화합물을 포함하여 열활성 지연 형광 발광함으로써 단파장의 청색광을 방출하면서 양호한 발광 효율 특성을 나타낼 수 있다.

[0140] 한편, 상술한 일 실시예의 화합물은 발광층(EML) 이외의 유기층에서 유기 전계 발광 소자(10)용 재료로 포함될 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 상술한 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.

[0141] 이하에서는, 실시예 및 비교예를 참조하면서, 본 발명의 일 실시 형태에 따른 화합물 및 일 실시예의 유기 전계 발광 소자에 대해서 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 나타내는 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 일 예시이며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

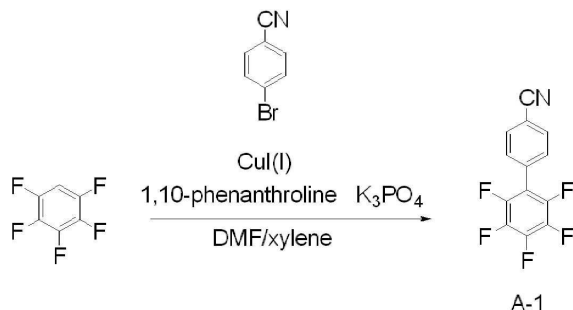
[0142] [실시예]

[0143] 1. 일 실시예의 화합물의 합성

[0144] 먼저, 본 실시 형태에 따른 화합물의 합성 방법에 대해서, 화합물 1 내지 화합물 4의 합성 방법을 예시하여 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 설명하는 화합물의 합성법은 일 실시예로서, 본 발명의 실시형태에 따른 화합물의 합성법이 하기의 실시예에 한정되지 않는다.

[0145] (화합물 1의 합성예)

[0146] <중간체 A-1의 합성>

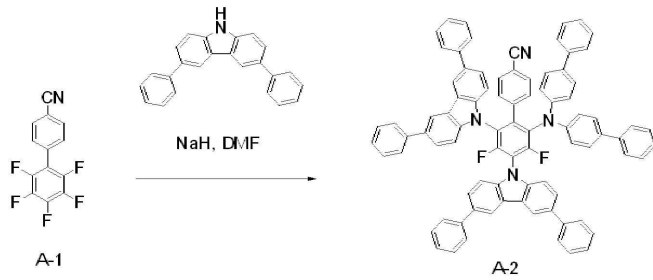


[0147]

[0148] 3구 플라스크에(Three-necked flask)에 4-Bromobenzonitrile 10g(55 mmol), Pentafluorobenzene 9.2g(55 mmol), Cu(I) 1.0g(5.5 mmol), Phenanthroline 1.0g(5.5 mmol), K₃PO₄ 23g(110 mmol)을 추가하여, 아르곤(Ar) 치환을 실시한 후, DMF 16 mL, Xylene 16 mL를 더해, 130궤에서 24 시간 동안 가열 교반 하였다. 획득한 반응 용액을 Ethylacetate로 추출하여, 염수(Brine)로 세정 후 Magnesium Sulfate로 건조하고, Silica gel Pad를 이용하여 여과를 실시한 후 실리카겔컬럼크로마토그래피(Hexane/Ethylacetate 혼합 용매)로 정제하여, 백색 고체

9.6g(수율 65%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 269임을 확인하여, 목적물인 중간체 A-1을 획득한 것을 확인하였다.

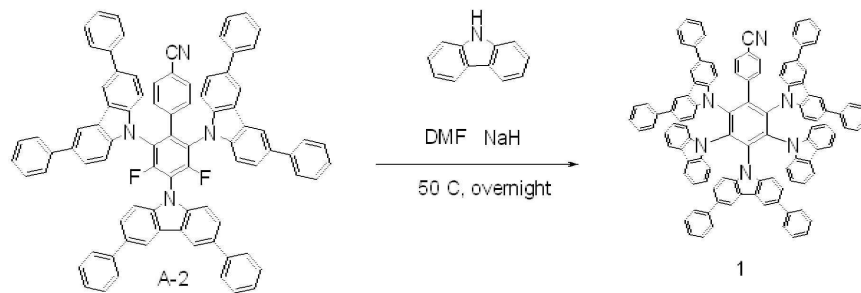
[0149] <중간체 A-2의 합성>



[0150]

[0151] 3구 플라스크에 중간체 화합물 A-1 1.0g(3.7 mmol), 3,6-Diphenyl carbazole 4.2g(13 mmol), NaH 0.22g(9.3 mmol)을 추가하여 아르곤 치환을 실시한 후, DMF 60 mL를 더해 0꺼에서 30분 동안 교반하였다. 그 후, 반응계를 상온까지 온도 상승시켜, 6시간 동안 교반을 실시하였다. 반응계에 물을 추가하여, Dichloromethane을 이용하여 유기층을 추출한 후, MgSO₄로 건조하여, 용매를 유거하였다. 획득한 조생성물을 실리카겔컬럼크로마토그래피 (Hexane/Toluene 혼합 용매)와 재결정 용매(Ethanol/Toluene 혼합 용매)로 정제하여, 연황색 고체 0.79g(수율 30%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 1167임을 확인하여, 목적물인 중간체 A-2를 획득한 것을 확인하였다.

[0152] <화합물 1의 합성>

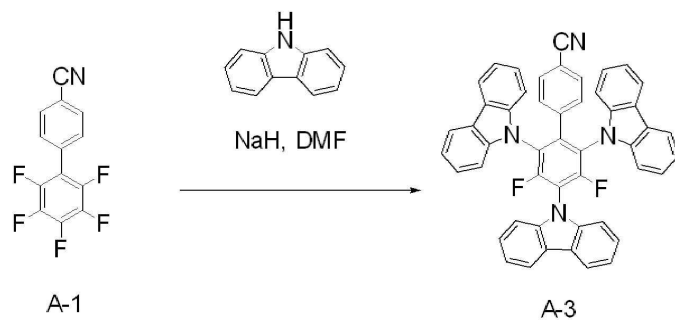


[0153]

[0154] 3구 플라스크에 중간체 A-2 0.67 g(0.94 mmol), Carbazole 0.30 g(1.9 mmol), NaH 0.57g(2.3 mmol)을 더해 아르곤 치환을 실시한 후, DMF 60 mL를 더해 0꺼에서 30분 간 교반하였다. 그 후, 반응계를 상온까지 온도 상승시켜, 6시간 동안 교반을 실시하였다. 반응계에 물을 더해, Dichloromethane을 이용하여 유기층을 추출 후, MgSO₄로 건조하여, 용매를 유거하였다. 획득한 조생성물을 실리카겔컬럼크로마토그래피 (Hexane/Toluene 혼합 용매)와 재결정 용매(Ethanol/Toluene 혼합 용매)로 정제하여, 연황색 고체 0.74g(수율 60%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 1448임을 확인하여, 화합물 1을 획득한 것을 확인하였다.

[0155] (화합물 2의 합성에)

[0156] <중간체 A-3의 합성>

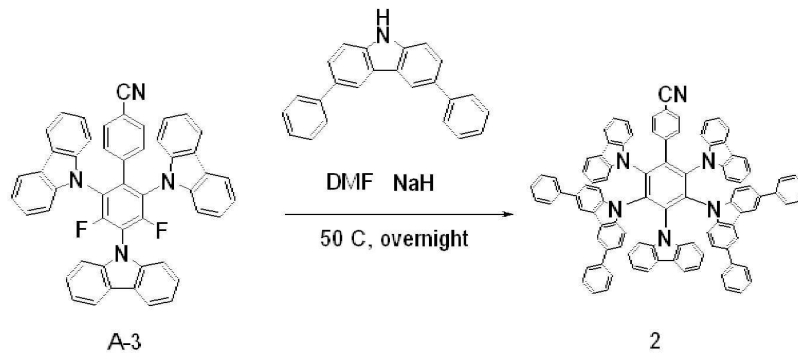


[0157]

[0158] 3,6-Diphenyl carbazole 대신에 Carbazole을 이용한 것을 제외하고는 중간체 A-2의 합성 방법과 동일한 절차를 이용하여 중간체 A-3을 합성하였다. 연황색 고체 0.42 g(수율 16%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에

의해 분자량이 711임을 확인하여, 목적물인 중간체 A-3을 획득한 것을 확인하였다.

[0159] <화합물 2의 합성>

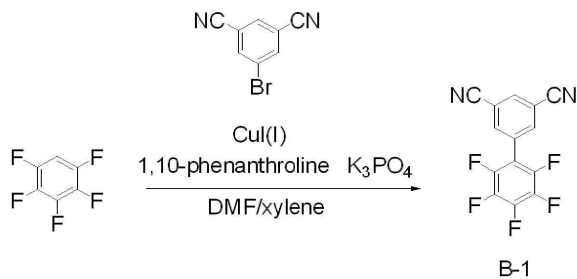


[0160]

[0161] Carbazole 대신에 3,6-Diphenyl carbazole을 이용한 것을 제외하고는 화합물 1의 합성 방법과 동일한 절차를 이용하여 화합물 2를 합성하였다. 연황색 고체 0.43 g(수율 70%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 1310임을 확인하여, 화합물 2를 획득한 것을 확인하였다.

[0162] (화합물 3의 합성예)

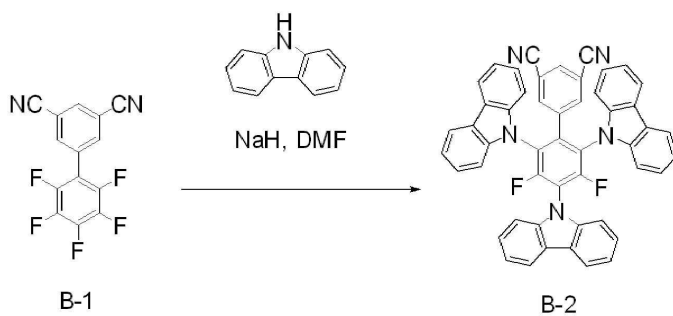
[0163] <중간체 B-1의 합성>



[0164]

[0165] 4-Bromobenzonitrile 대신에 5-Bromoisophthalonitrile을 이용한 것을 제외하고는 중간체 A-1의 합성 방법과 동일한 절차를 이용하여 중간체 B-1을 합성하였다. 백색 고체 11 g(수율 80%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 294임을 확인하여, 목적물인 중간체 B-1을 획득한 것을 확인하였다.

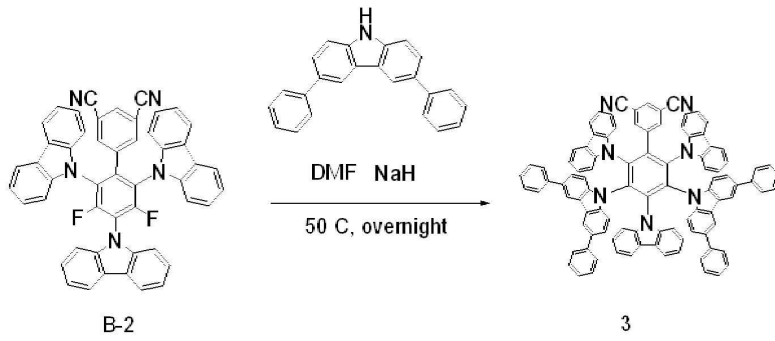
[0166] <중간체 B-2의 합성>



[0167]

[0168] 중간체 A-1 대신 중간체 B-1, 3,6-Diphenyl carbazole 대신 Carbazole을 이용한 것을 제외하고는 중간체 A-2의 합성 방법과 동일한 절차를 이용하여 중간체 B-2를 합성하였다. 연황색 고체 0.53 g(수율 21%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 736임을 확인하여, 목적물인 중간체 B-2를 획득한 것을 확인하였다.

[0169] <화합물 3의 합성>

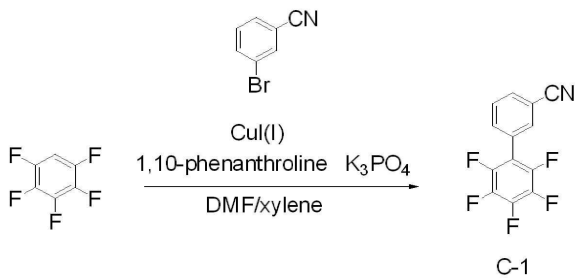


[0170]

[0171] 중간체 A-2 대신에 B-2, Carbazole 대신에 3,6-Diphenyl carbazole을 이용한 것을 제외하고는 화합물 1의 합성 방법과 동일한 절차를 이용하여 화합물 3을 합성하였다. 연황색 고체 0.34 g(수율 63%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 1335임을 확인하여, 화합물 3을 획득한 것을 확인하였다.

[0172] (화합물 4의 합성예)

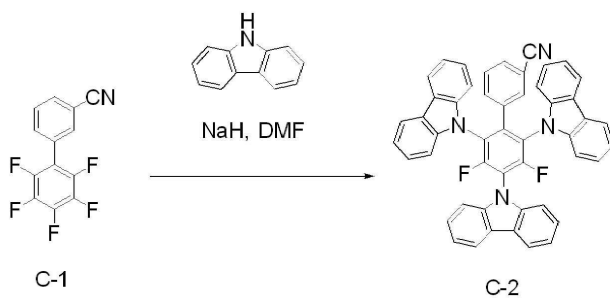
[0173] <중간체 C-1의 합성>



[0174]

[0175] 4-Bromobenzonitrile 대신에 3-Bromobenzonitrile을 이용한 것을 제외하고는 중간체 A-1의 합성 방법과 동일한 절차를 이용하여 중간체 C-1을 합성하였다. 백색 고체 11 g(수율 76%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 269임을 확인하여, 목적물인 중간체 C-1을 획득한 것을 확인하였다.

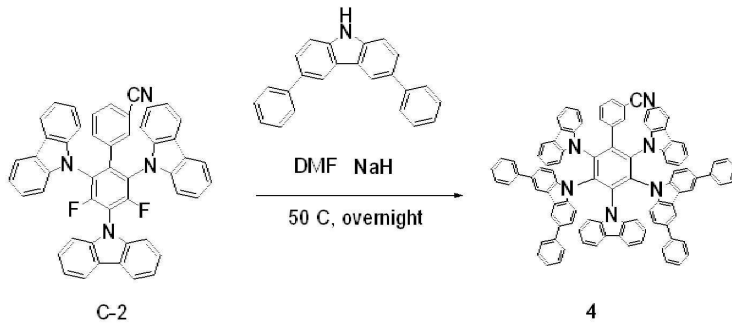
[0176] <중간체 C-2의 합성>



[0177]

[0178] 중간체 A-1 대신에 중간체 C-1, 3,6-Diphenyl carbazole 대신에 Carbazole을 이용한 것을 제외하고는 중간체 A-2의 합성 방법과 동일한 절차를 이용하여 중간체 C-2를 합성하였다. 연황색 고체 0.37 g(수율 14%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 711임을 확인하여, 목적물인 중간체 C-2를 획득한 것을 확인하였다.

[0179] <화합물 4의 합성>



[0180]

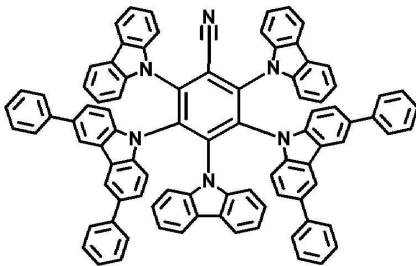
[0181] 중간체 A-2 대신에 중간체 C-2, Carbazole 대신에 3,6-Diphenyl carbazole을 이용한 것을 제외하고는 화합물 1의 합성 방법과 동일한 절차를 이용하여, 화합물 4를 합성하였다. 연황색 고체 0.41 g(수율 76%)을 얻었다. 획득한 정제물의 FAB-MS 측정에 의해 분자량이 1310임을 확인하여, 화합물 4를 획득한 것을 확인하였다.

[0182]

2. 화합물의 에너지 준위 평가

[0183]

아래 표 1에서는 실시예 화합물인 화합물 1 내지 화합물 4, 및 하기의 비교예 화합물 C1의 최저 일중항 여기 에너지 준위(S1 level)와 최저 삼중항 여기 에너지 준위(T1 level), 및 E_{ST} 값을 나타내었다.



C1

[0184]

[0185] 표 1에서의 에너지 준위 값은 비경험적 분자 궤도법에 의해 계산되었다. 구체적으로 Gaussian사의 Gaussian 09를 사용하여 B3LYP/6-31G(d)로 계산되었다. E_{ST} 는 최저 일중항 여기 에너지 준위(S1 level)와 최저 삼중항 여기 에너지 준위(T1 level)의 차이를 나타낸 것이다.

표 1

[0186]

화합물 종류	S1 level (eV)	T1 level (eV)	E_{ST} (eV)
화합물 1	2.87	2.73	0.14
화합물 2	2.92	2.75	0.17
화합물 3	3.01	2.79	0.22
화합물 4	3.86	2.71	0.15
비교예 화합물 C1	2.60	2.46	0.14

[0187]

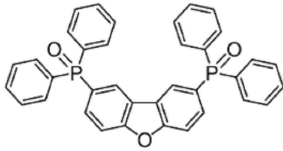
실시예 화합물인 화합물 1 내지 화합물 4는 E_{ST} 값이 0.25 eV 이하의 값을 가진다. 이로부터 화합물 1 내지 화합물 4는 열활성 지연 형광 도펀트 재료로 사용될 수 있을 것으로 판단된다. 또한, 비교예 화합물 C1 역시 낮은 E_{ST} 값을 나타내는 것으로부터 열활성 지연 형광 도펀트 재료로 사용될 수 있을 것으로 판단된다.

[0188]

3. 화합물의 형광 발광 특성 평가

[0189]

형광 발광 특성은 JASCO사의 V-670 spectrometer를 이용하여 평가하였다. 하기에 표시된 PPF를 호스트 물질로 사용하고 화합물 1 내지 화합물 4 및 비교예 화합물 C1을 도펀트 물질로 사용하여 공중착하여 퀴츠 글래스(quartz glass) 상에 유기층을 형성하였다.



PPF

[0190]

[0191] 공증착된 호스트 및 도펀트의 비율은 80:20으로 하였다. 제작된 유기층에 대하여 형광 발광 스펙트럼을 측정하였다. 형광 양자 수율은 JASCO 사의 ILF-835 integrating sphere system을 이용하여 측정하였다.

[0192] 아래 표 2는 실시예 및 비교예에 대한 형광 발광 특성을 나타낸 것으로 형광 발광 특성 평가에서 λ_{max} 는 발광 피크에서 최대 발광 세기(intensity)를 나타내는 발광 중심 파장을 나타낸 것이다.

표 2

[0193]

구분	도펀트 재료	λ_{max} (nm)	형광 양자 수율(%)
실시예 1	화합물 1	450	85
실시예 2	화합물 2	443	78
실시예 3	화합물 3	430	80
실시예 4	화합물 4	452	75
비교예 1	비교예 화합물 C1	495	80

[0194] 표 2의 결과를 참조하면 형광 양자 수율에 있어서는 실시예 1 내지 실시예 4와 비교예 1은 유사한 수준을 나타내었다. 실시예 1 내지 실시예 4의 발광 중심 파장인 λ_{max} 는 비교예 1의 발광 중심 파장과 비교하여 단파장 영역에 해당하는 것을 알 수 있다. 즉, 표 2의 결과로부터 실시예 화합물들은 비교예 화합물 C1에 비하여 단파장 영역의 청색광인 심청색 광을 방출하는 것임을 알 수 있다.

[0195] 4. 유기 전계 발광 소자의 제작 및 평가

[0196] (유기 전계 발광 소자의 제작)

[0197] 일 실시예의 화합물을 발광층에 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자를 아래의 방법으로 제조하였다. 상술한 화합물 1 내지 화합물 4의 화합물을 발광층의 도펀트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 실시예 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 비교예 1은 상술한 비교예 화합물 C1을 발광층 도펀트 재료로 사용하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0198] 유리 기판 상에 두께 1500Å의 ITO를 패터닝한 후, 초순수로 세척하고 초음파로 세정한 후 30 분 동안 UV를 조사하고 이후 오존 처리를 실시하였다. 그 후, 100Å 두께로 HAT-CN(1,4,5,8,9,11-Hexaazatriphenylenehexacarbonitrile)를 증착하여 정공 주입층을 형성하고, 다음으로 800Å 두께로 NPB(N,N'-Di(1-naphthyl)-N,N'-diphenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine)를 증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 다음으로 50Å 두께로 mCBP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene)를 증착하여 전자 저지층을 형성하였다.

[0199] 전자 저지층 상에 DPEPO(Bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide)와 본 발명의 실시예 화합물들 또는 비교예 화합물을 80:20의 비율로 공증착하여 두께 200Å의 발광층을 형성하였다. 즉, 공증착하여 형성된 발광층은 실시예 1 내지 실시예 4에서는 각각 화합물 1, 2, 3 및 4를 DPEPO와 혼합하여 증착하였고, 비교예 1에서는 비교예 화합물 C1을 DPEPO와 혼합하여 증착하였다.

[0200] 발광층 상에 DPEPO로 두께 100Å의 정공 저지층을 형성하고, 다음으로 TPBi(2,2',2''-(1,3,5-Benzinetriyl)-tris(1-phenyl-1-H-benzimidazole))로 두께 300Å의 전자 수송층을 형성하였다. 이후 Liq(8-Hydroxyquinolinolato-lithium)로 두께 10Å의 전자 주입층을 형성하였다. 다음으로, 알루미늄(Al)으로 두께 1000Å의 제2 전극을 형성하였다.

[0201] 실시예에서, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층, 및 제2 전극은 진공 증착 장치를 이용하여 형성하였다.

[0202] (유기 전계 발광 소자의 특성 평가)

[0203] 표 3에서는 실시예 1 내지 실시예 4, 및 비교예 1에 대한 유기 전계 발광 소자의 평가 결과를 나타내었다. 표 3에서는 제작된 유기 전계 발광 소자에서의 발광 중심 파장인 λ_{max} , 발광 효율, 및 수명을 비교하여 나타내었다. 표 3에 나타난 실시예 및 비교예에 대한 특성 평가 결과에서 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 사용하여 측정하였다. 발광 효율은 전류 밀도 10mA/cm²에 대한 전류 효율 값을 나타낸 것이고, 수명은 1.0mA/cm²에서의 반감 수명을 나타낸 것이다.

[0204] 한편, 표 3에서 발광 효율과 수명은 상대적인 값으로 비교하여 나타내었다. 비교예 1에서의 발광 효율 및 수명을 1로 할 때 실시예의 발광 효율과 수명을 상대적으로 나타내었다.

표 3

구분	도펀트 재료	λ_{max} (nm)	발광 효율	수명
실시예 1	화합물 1	453	1.03	0.95
실시예 2	화합물 2	442	0.98	1.01
실시예 3	화합물 3	435	0.95	0.91
실시예 4	화합물 4	454	0.96	0.95
비교예 1	비교예 화합물 C1	497	1	1

[0206] 표 3의 결과를 참조하면, 실시예 1 내지 실시예 4의 유기 전계 발광 소자는 비교예 1의 유기 전계 발광 소자와 비교하여 유사한 수준의 발광 효율과 수명 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 다만, 실시예 1 내지 실시예 4의 유기 전계 발광 소자는 비교예 1의 유기 전계 발광 소자에 비하여 단파장 영역에서 발광 최대 피크인 λ_{max} 를 나타내는 것으로부터 실시예 1 내지 실시예 4는 비교예 1에 비하여 단파장의 청색광인 심청색광을 방출하는 것임을 알 수 있다.

[0207] 실시예 화합물들 및 유기 전계 발광 소자의 실시예들에 대한 평가 결과를 참조할 때 일 실시예의 화합물은 심청색 광을 방출하는 발광 재료로 사용될 수 있으며 양호한 수명 특성을 나타내는 것을 알 수 있다. 또한, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 일 실시예의 화합물을 발광층에 포함하여 심청색의 광을 방출하면서 양호한 발광 효율 특성 및 수명 특성을 나타내는 것을 알 수 있다.

[0208] 즉, 일 실시예의 화합물은 전자 수용성기인 시아노기와 전자 공여성기인 카바졸기가 치환된 페닐기 사이에 링커로 페닐기를 포함하여, 시아노기의 전자 수용성을 약화시킴으로써 양호한 수명 특성을 나타내면서 심청색 광을 방출하는 발광 재료로 사용될 수 있다. 또한, 발광층에 일 실시예의 화합물은 포함한 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 양호한 발광 효율 및 수명 특성을 나타내면서 심청색 광을 발광할 수 있다.

[0209] 이상에서는 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하였지만, 해당 기술 분야의 숙련된 당업자 또는 해당 기술 분야에 통상의 지식을 갖는 자라면, 후술될 특허청구범위에 기재된 본 발명의 사상 및 기술 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할 수 있을 것이다.

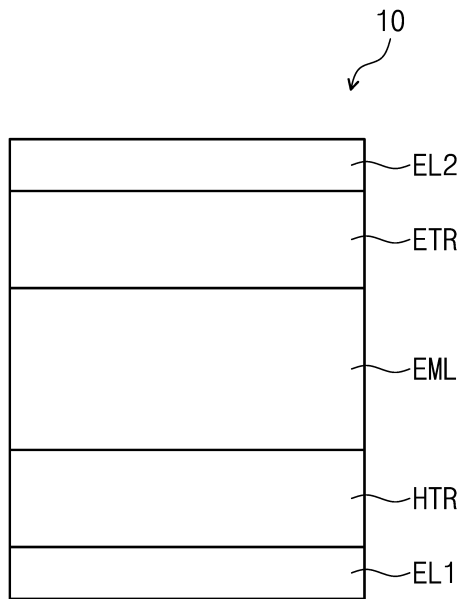
[0210] 따라서, 본 발명의 기술적 범위는 명세서의 상세한 설명에 기재된 내용으로 한정되는 것이 아니라 특허청구범위에 의해 정하여져야만 할 것이다.

부호의 설명

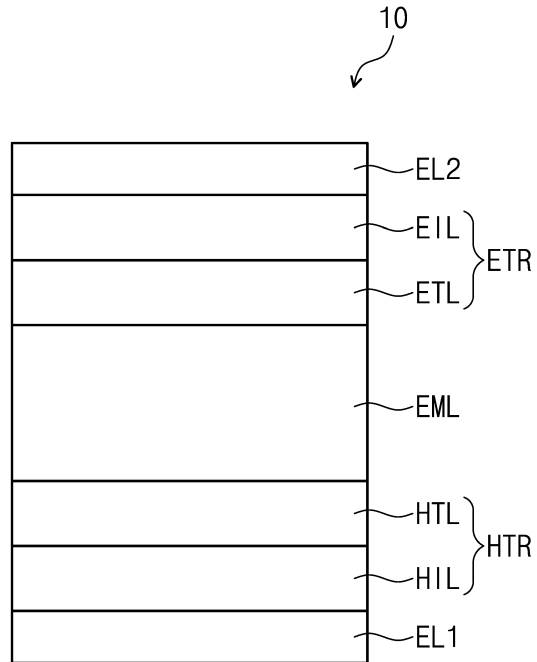
- [0211] 10 : 유기 전계 발광 소자
- EL1 : 제1 전극
- EL2 : 제2 전극
- HTR : 정공 수송 영역
- EML : 발광층
- ETR : 전자 수송 영역

도면

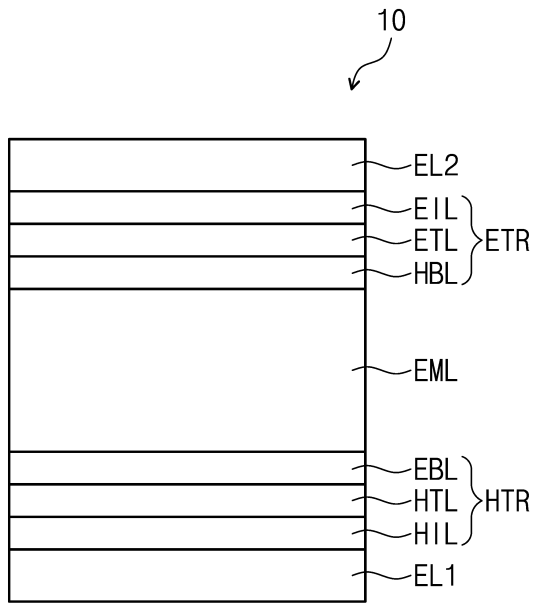
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	有机电致发光器件和用于有机电致发光器件的化合物		
公开(公告)号	KR1020200057886A	公开(公告)日	2020-05-27
申请号	KR1020180141922	申请日	2018-11-16
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
发明人	후지타, 요시마사 호시, 게이고 미야자키, 유키		
IPC分类号	H01L51/00 C07D209/82 C07D403/14 C07D405/14 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D209/82 C07D403/14 C07D405/14 H01L51/5012 H01L51/5024 C07D209/86 C09K11/06 H05B33/14 C09K2211/1018 H01L51/001 H01L51/56 H01L2251/558		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机电致发光器件包括第一电极，在第一电极上的第二电极以及在第一电极和第二电极之间的发射层。发光层包括化合物，该化合物包括被至少一个氟基取代的第一苯基和被五个取代或未取代的咪唑基取代的第二苯基，第二苯基直接键合至第一苯基。

