



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0113659
(43) 공개일자 2018년10월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0072 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2017-0044684
(22) 출원일자 2017년04월06일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
후치와키, 준타
일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초
2-7 주식회사 삼성 요코하마 연구소내
사토, 토오루
일본 교우토시 사쿄우쿠 요시다혼마치 606-8501
(74) 대리인
특허법인 고려

전체 청구항 수 : 총 23 항

(54) 발명의 명칭 발광 재료 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

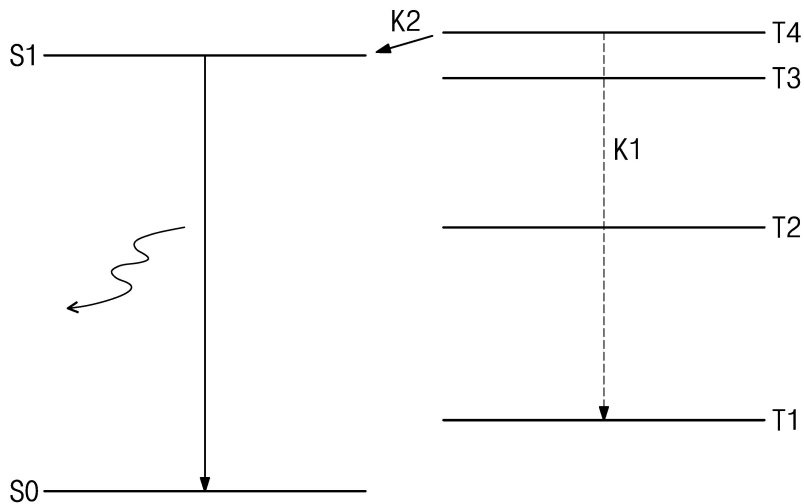
본 발명은 하기 식 1을 만족하는 제1 화합물을 포함하는 발광 재료에 관한 것이다. 본 발명은 또한, 상기 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[식 1]

$$K2 \geq 0.1K1$$

상기 식 1에서, K1은 n번째 삼중항 여기 상태에서 최저 삼중항 여기 상태를 포함하는 저차(lower order) 삼중항 여기 상태로의 무 복사 천이 속도의 합이고, K2는 n번째 삼중항 여기 상태에서 n번째 삼중항 여기 상태와 인접한 일중항 여기 상태로의 역 항간 천이 속도이며, n은 2 이상의 정수이다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

하기 식 1을 만족하는 제1 화합물을 포함하는 발광 재료:

[식 1]

$$K2 \geq 0.1K1$$

상기 식 1에서,

K1은 n번째 삼중항 여기 상태에서 최저 삼중항 여기 상태를 포함하는 저차(lower order) 삼중항 여기 상태로의 무 복사 천이 속도의 합이고, K2는 n번째 삼중항 여기 상태에서 상기 n번째 삼중항 여기 상태와 인접한 일중항 여기 상태로의 역 항간 천이 속도이며,

n은 2 이상의 정수이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 K1이 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 이하인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 제1 화합물이 하기 식 2를 더 만족하는 것을 특징으로 하는 발광 재료:

[식 2]

$$V_n < 1.5 \times 10^{-4} \text{ (원자 단위, atomic unit)}$$

상기 식 2에서,

V_n 은 양자 화학 계산에 의해 계산된 n번째 삼중항 여기 상태 및 최저 삼중항 여기 상태 사이의 각 기준 진동 모드에 대한 비대각 진동-전자 상호작용 상수(Off-diagonal Vibronic Coupling Constant)이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

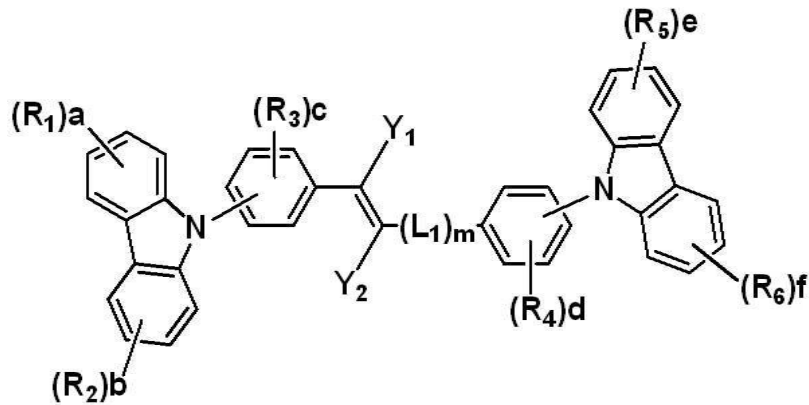
최대 발광 파장이 480nm 이하인 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 제1 화합물이 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 하는 발광 재료:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L_1 은 2개의 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 10 이하의 알케닐기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이고,

m 은 0 내지 3의 정수이며,

m 이 2 이상일 경우, 복수의 L_1 은 서로 동일하거나 상이하고,

R_1 내지 R_6 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

a 내지 f 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

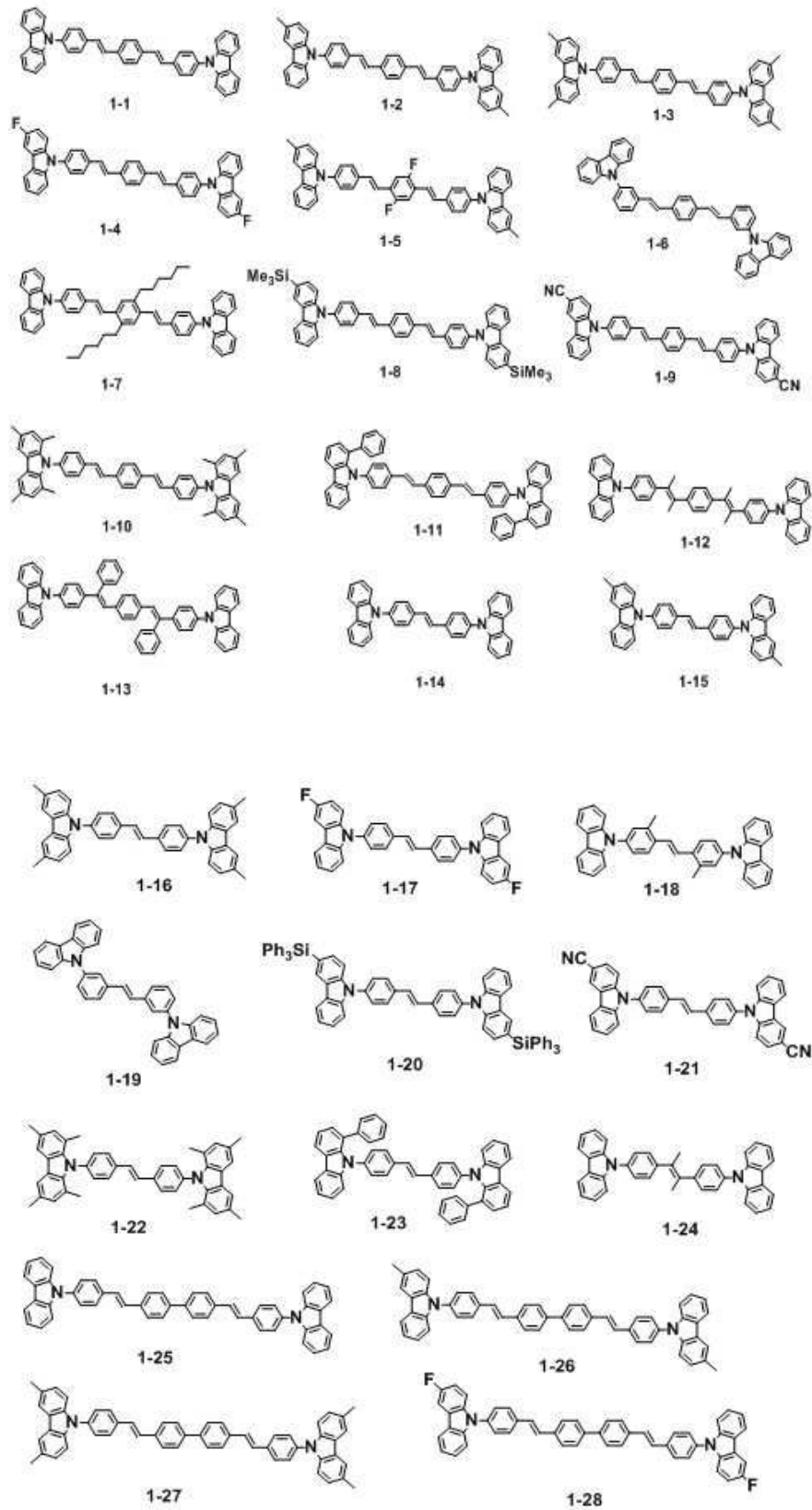
Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 제1 화합물이 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 발광 재료:

[화합물군 1]

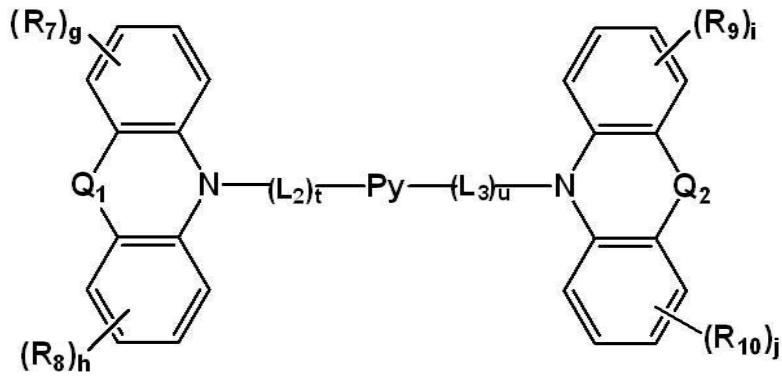


청구항 7

제1항에 있어서,

상기 제1 화합물이 하기 화학식 2로 표시되는 것을 특징으로 하는 발광 재료:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

L_2 및 L_3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이고,

t 및 u 는 각각 독립적으로 0 또는 1이며,

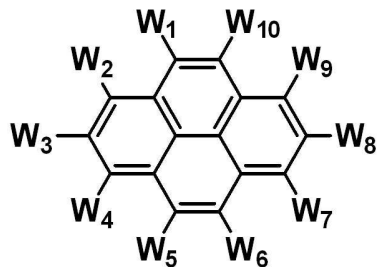
Q_1 및 Q_2 는 각각 독립적으로 직접 결합(direct linkage), $CR_{11}R_{12}$ 또는 $SiR_{13}R_{14}$ 이고,

R_7 내지 R_{14} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하며,

g 내지 j 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

Py는 하기 화학식 3으로 표시된다:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

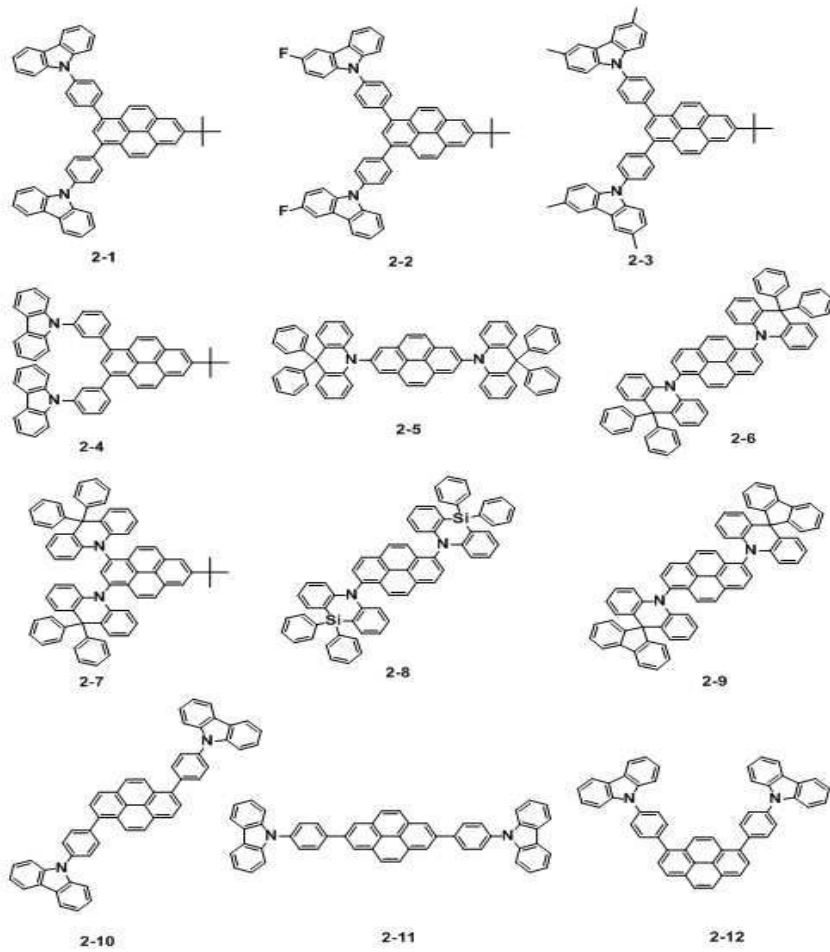
W_1 내지 W_{10} 중 2개는 연결되는 부위이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 제1 화합물이 하기 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 발광 재료:

[화합물군 2]



청구항 9

제1항에 있어서,

제2 화합물을 더 포함하고,

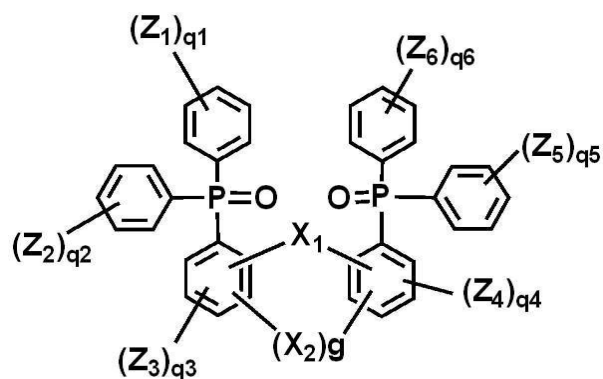
상기 제2 화합물의 최저 삼중항 여기 에너지 준위는 상기 제1 화합물의 최저 일중항 여기 에너지 준위보다 높은 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 10

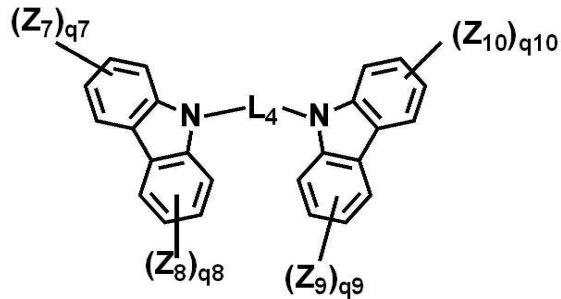
제9항에 있어서,

상기 제2 화합물은 하기 화학식 4 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 발광 재료:

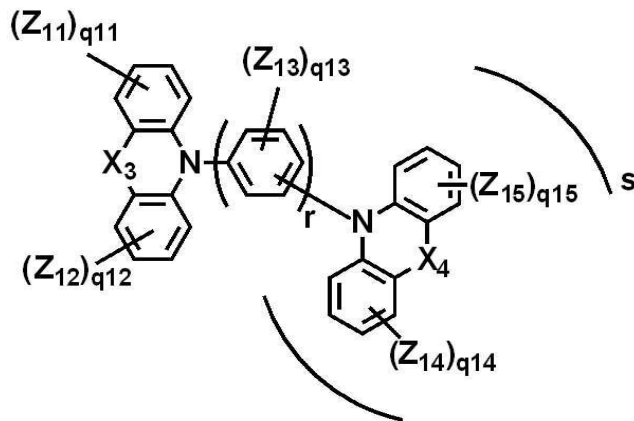
[화학식 4]



[화학식 5]



[화학식 6]



상기 화학식 4 내지 6에서,

X_1 내지 X_4 는 각각 독립적으로 직접결합, O, S, CRaRb 또는 SiRcRd이고,

Ra 내지 Rd 및 Z_1 내지 Z_{15} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

g 및 s는 각각 독립적으로 0 또는 1 이고,

r은 1 또는 2이며,

q1 내지 q15는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

L_4 는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아틸렌기이다.

청구항 11

제1항에 있어서,

일중항 상태에서 바닥 상태로의 전이에 기초한 발광 메커니즘을 갖는 것을 특징으로 하는 발광 재료.

청구항 12

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

상기 발광층은 하기 식 1을 만족하는 제1 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자:

[식 1]

$$K2 \geq 0.1K1$$

상기 식 1에서,

K1은 n번째 삼중항 여기 상태에서 최저 삼중항 여기 상태를 포함하는 저차(lower order) 삼중항 여기 상태로의 무 복사 천이 속도의 합이고,

K2는 n번째 삼중항 여기 상태에서 상기 n번째 삼중항 여기 상태와 인접한 일중항 여기 상태로의 역 공간 천이 속도이며,

n은 2 이상의 정수이다.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 K1이 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 이하인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 14

제12항에 있어서,

상기 제1 화합물이 하기 식 2를 더 만족하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:

[식 2]

$$V_n < 1.5 \times 10^{-4} (\text{원자 단위, atomic unit})$$

상기 식 2에서,

V_n 은 양자 화학 계산에 의해 계산된 n번째 삼중항 여기 상태 및 최저 삼중항 여기 상태 사이의 각 기준 진동 모드에 대한 비대각 진동-전자 상호작용 상수(Off-diagonal Vibronic Coupling Constant)이다.

청구항 15

제12항에 있어서,

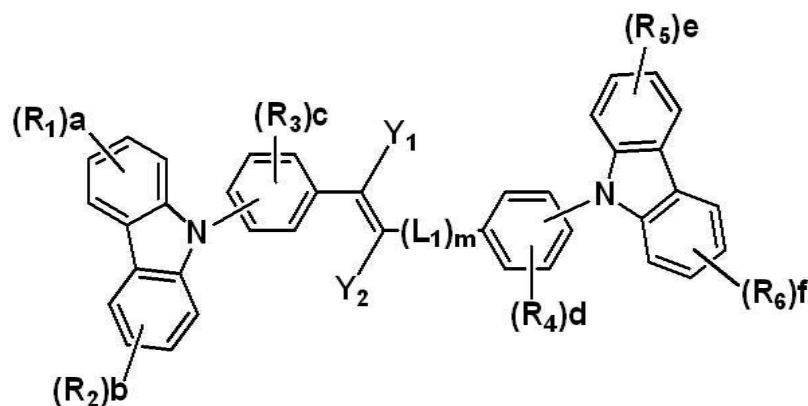
상기 발광층의 최대 발광 파장이 480nm 이하인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 16

제12항에 있어서,

상기 제1 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L_1 은 2개의 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 10 이하의 알케닐기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이고,

m 은 0 내지 3의 정수이며,

m 이 2 이상일 경우, 복수의 L_1 은 서로 동일하거나 상이하고,

R_1 내지 R_6 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

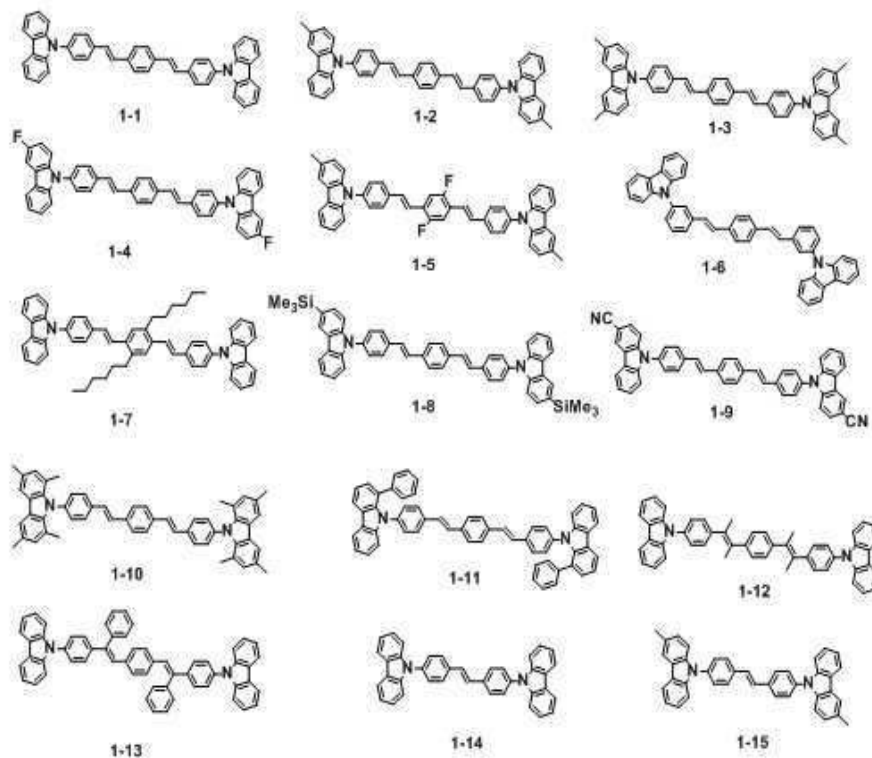
a 내지 f 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

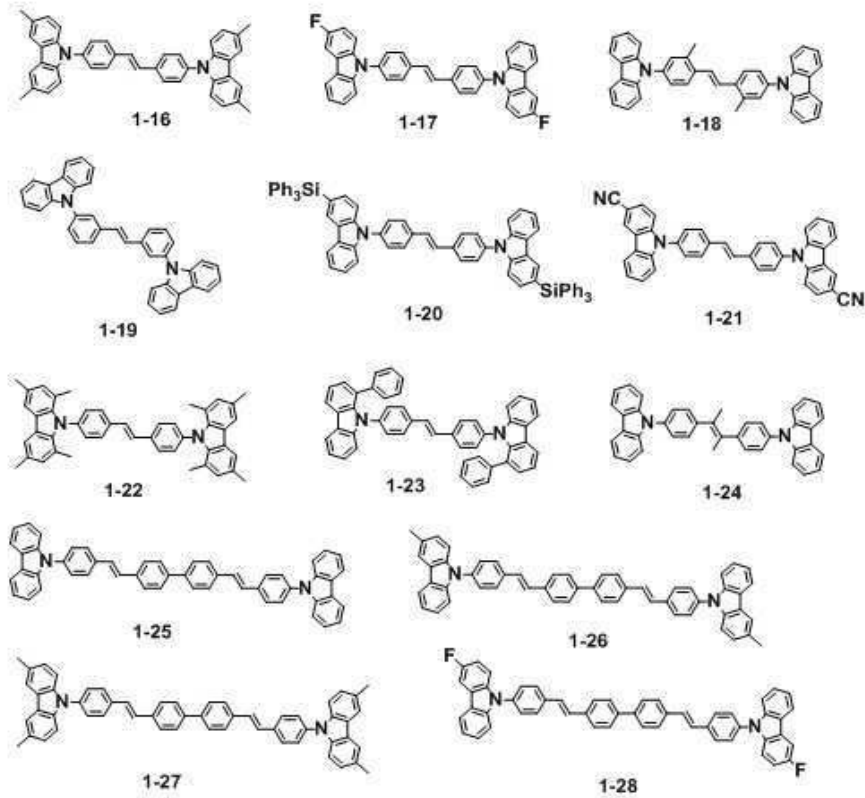
Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 17

제12항에 있어서,

상기 제1 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:



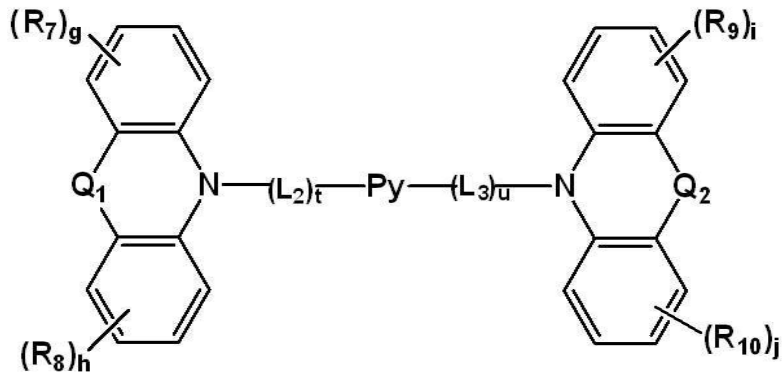


청구항 18

제12항에 있어서,

상기 제1 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

L_2 및 L_3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이고,

t 및 u 는 각각 독립적으로 0 또는 1이며,

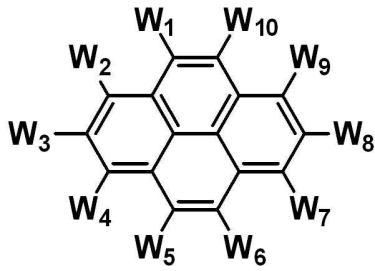
Q_1 및 Q_2 는 각각 독립적으로 직접 결합(direct linkage), $CR_{11}R_{12}$ 또는 $SiR_{13}R_{14}$ 이고,

R_7 내지 R_{14} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하며,

g 내지 j 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

Py는 하기 화학식 3으로 표시된다:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

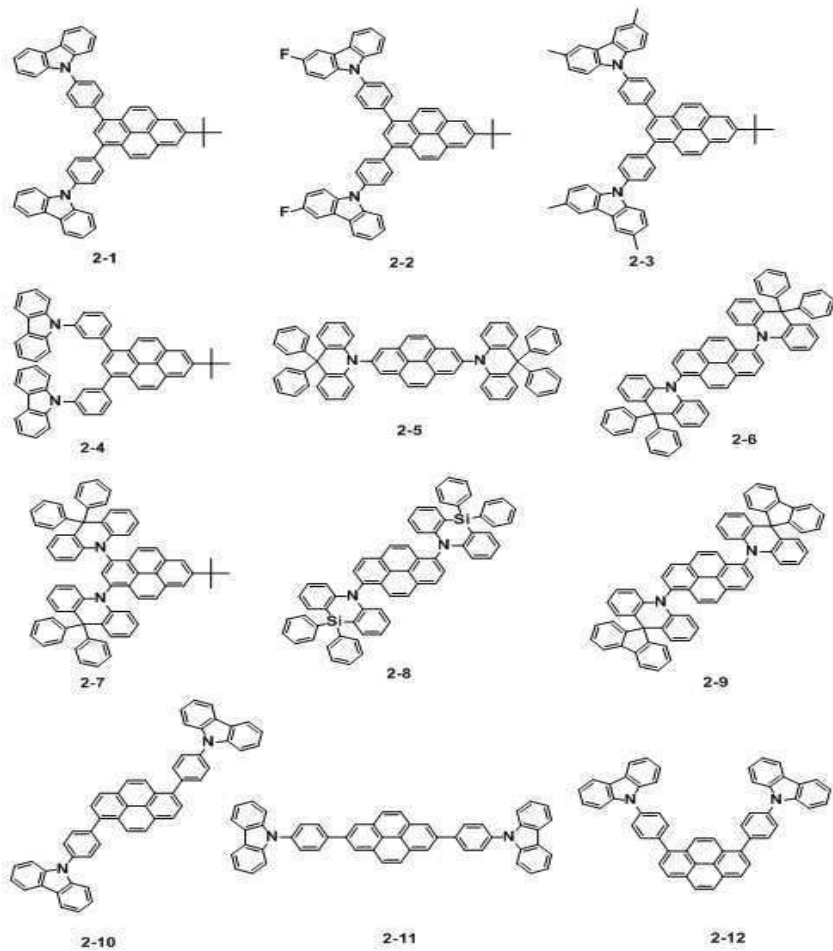
W₁ 내지 W₁₀ 중 2개는 연결되는 부위이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 19

제12항에 있어서,

상기 제1 화합물은 하기 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 2]



청구항 20

제12항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고,

상기 도펀트가 상기 제1 화합물인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 21

제20항에 있어서,

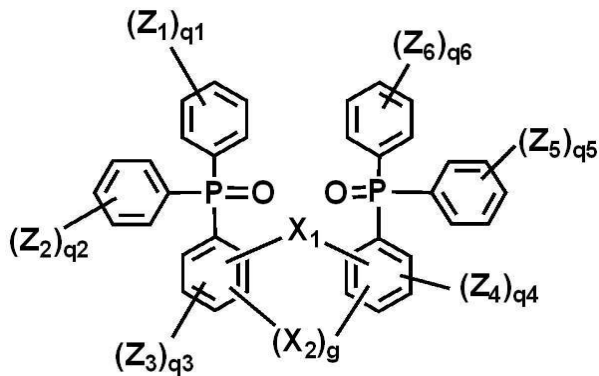
상기 호스트의 최저 삼중항 여기 에너지 준위는 상기 도펀트의 최저 일중항 여기 에너지 준위보다 높은 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 22

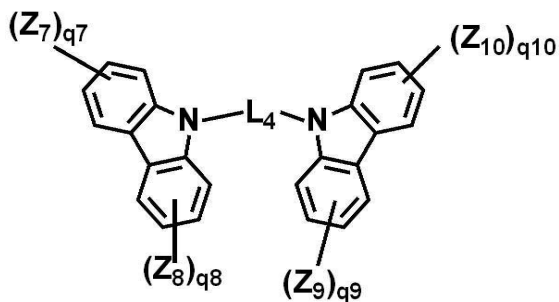
제20항에 있어서,

상기 호스트는 하기 화학식 4 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 제2 화합물인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자:

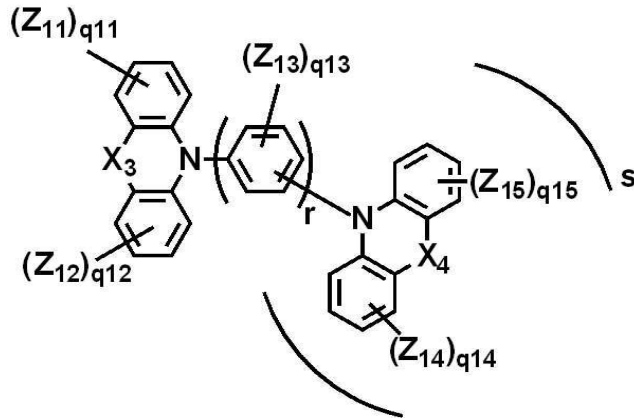
[화학식 4]



[화학식 5]



[화학식 6]



상기 화학식 4 내지 6에서,

X_1 내지 X_4 는 각각 독립적으로 0, S, CRaRb 또는 SiRcRd이고,

Ra 내지 Rd 및 Z_1 내지 Z_{15} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

g 및 s 는 각각 독립적으로 0 또는 1 이고,

r 은 1 또는 2 이며,

q_1 내지 q_{15} 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

L_4 는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기이다.

청구항 23

제12항에 있어서,

상기 발광층은 형광 발광층이며,

최대 외부 양자 수율이 5% 이상인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 고효율의 발광 재료 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 소자를 이용한 유기 전계 발광 표시 장치(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 활발히 이루어지고 있다. 유기 전계 발광 표시 장치는 액정 표시 장치 등과는 다르고, 제1 전극 및 제2 전극으로부터 주입된 정공 및 전자를 발광층에서 재결합시킴으로써, 발광층에 포함되는 유기 화합물인 발광 재료를 발광시켜서 표시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

[0003] 유기 전계 발광 소자로서는, 예를 들어, 제1 전극, 제1 전극 상에 배치된 정공 수송층, 정공 수송층 상에 배치된 발광층, 발광층 상에 배치된 전자 수송층 및 전자 수송층 상에 배치된 제2 전극으로 구성된 유기 소자가 알려져 있다. 제1 전극으로부터는 정공이 주입되고, 주입된 정공은 정공 수송층을 이동하여 발광층으로 주입된다. 한편, 제2 전극으로부터는 전자가 주입되고, 주입된 전자는 전자 수송층을 이동하여 발광층으로 주입된다. 발광층으로 주입된 정공과 전자가 재결합함으로써, 발광층 내에서 여기자가 생성된다. 유기 전계 발광 소자는 그 여기자가 다시 바닥상태로 떨어질 때 발생하는 광을 이용하여 발광한다. 한편, 유기 전계 발광 소자는 이상에 설

명한 구성에 한정되지 않고, 여러 가지의 변경이 가능하다.

[0004] 유기 전계 발광 소자는 발광 원리에 따라 형광 유기 전계 발광 소자 및 인광 유기 전계 발광 소자로 분류될 수 있다. 형광 유기 전계 발광 소자는 외부 양자 효율이 5%를 넘기 어렵다는 한계가 있으며, 인광 유기 전계 발광 소자는 구동 내구성이 취약하다는 문제점이 있다. 일반적인 형광 유기 전계 발광 소자 및 인광 유기 전계 발광 소자의 한계를 개선하기 위해 삼중항 여기자의 충돌에 의해 일중항 여기자가 생성되는 현상(Triplet-triplet annihilation, TTA)을 이용한 형광 유기 전계 발광 소자, 열 활성화 지연 형광(thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)을 이용한 형광 유기 전계 발광 소자 등이 제안되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 본 발명은 고효율의 발광 재료를 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

[0006] 본 발명은 고효율 및 풀-오프 저감을 동시에 구현할 수 있는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명의 일 실시예는 하기 식 1을 만족하는 제1 화합물을 포함하는 발광 재료를 제공한다.

[0008] [식 1]

[0009] $K2 \geq 0.1K1$

[0010] 상기 식 1에서, K1은 n번째 삼중항 여기 상태에서 최저 삼중항 여기 상태를 포함하는 저차(lower order) 삼중항 여기 상태로의 무 복사 천이 속도의 합이고, K2는 n번째 삼중항 여기 상태에서 n번째 삼중항 여기 상태와 인접한 일중항 여기 상태로의 역 항간 천이 속도이며, n은 2 이상의 정수이다.

[0011] K1이 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 이하인 것일 수 있다.

[0012] 제1 화합물이 하기 식 2를 더 만족하는 것일 수 있다.

[0013] [식 2]

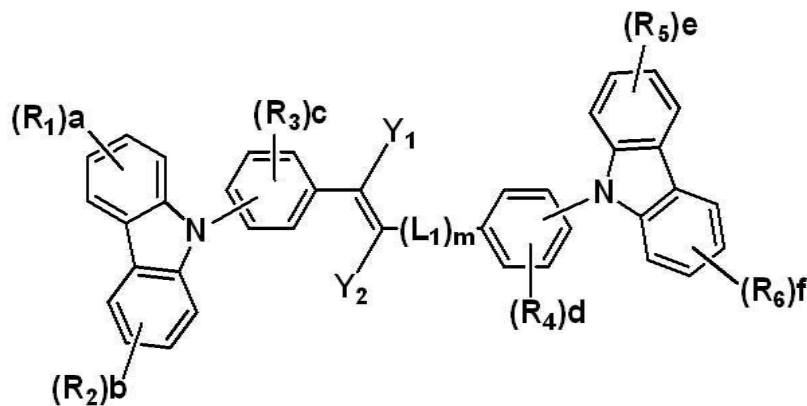
[0014] $Vn < 1.5 \times 10^{-4}$ (원자 단위, atomic unit)

[0015] 상기 식 2에서, Vn은 양자 화학 계산에 의해 계산된 n번째 삼중항 여기 상태 및 최저 삼중항 여기 상태 사이의 각 기준 진동 모드에 대한 비대각 진동-전자 상호작용 상수(Off-diagonal Vibronic Coupling Constant)이다.

[0016] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 최대 발광 파장이 480nm 이하인 것일 수 있다.

[0017] 제1 화합물이 하기 화학식 1로 표시되는 것일 수 있다.

[0018] [화학식 1]



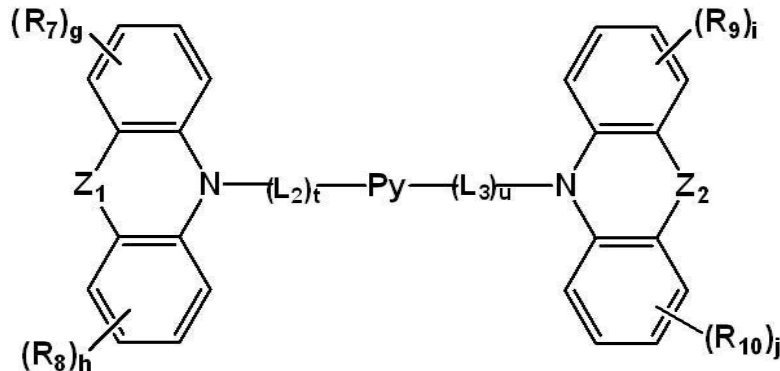
[0019]

[0020] 상기 화학식 1에서, L1은 2가의 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 10 이하의 알케닐기, 또는 치환 또는 비치환

된 고리 형성 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이고, m은 0 내지 3의 정수이며, m이 2 이상일 경우, 복수의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고, R₁ 내지 R₆는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, a 내지 f는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, Y₁ 및 Y₂는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0021] 제1 화합물이 하기 화학식 2로 표시되는 것일 수 있다.

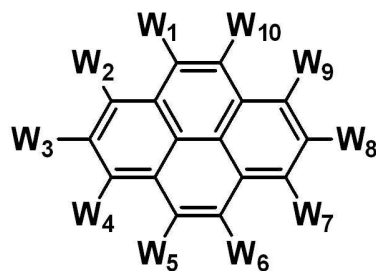
[0022] [화학식 2]



[0023]

[0024] 상기 화학식 2에서, L₂ 및 L₃은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이고, t 및 u는 각각 독립적으로 0 또는 1이며, Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 직접 결합(direct linkage), CR₁₁R₁₂ 또는 SiR₁₃R₁₄이고, R₇ 내지 R₁₄는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하며, g 내지 j는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, Py는 하기 화학식 3으로 표시된다.

[0025] [화학식 3]



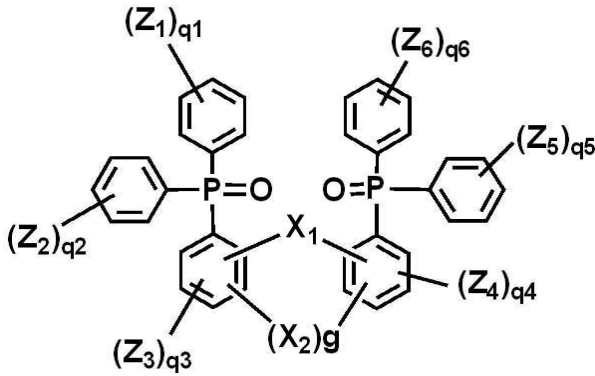
[0026]

[0027] 상기 화학식 3에서, W₁ 내지 W₁₀ 중 2개는 연결되는 부위이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0028] 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 제2 화합물을 더 포함할 수 있고, 제2 화합물의 최저 삼중항 여기 에너지 준위는 제1 화합물의 최저 일중항 여기 에너지 준위보다 높은 것일 수 있다.

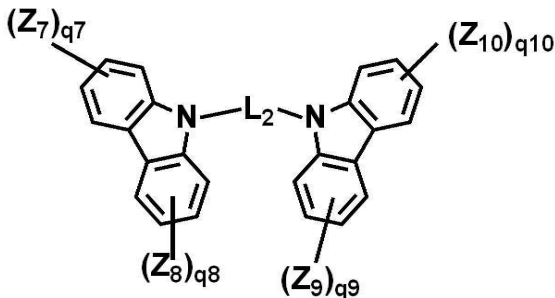
[0029] 제2 화합물은 하기 화학식 4 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0030] [화학식 4]



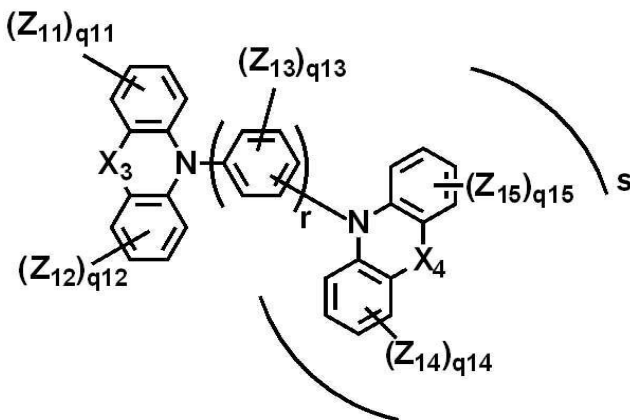
[0031]

[0032] [화학식 5]



[0033]

[0034] [화학식 6]



[0035]

[0036] 상기 화학식 4 내지 6에서, X_1 내지 X_4 는 각각 독립적으로 0, S, CRaRb 또는 SiRcRd이고, Ra 내지 Rd 및 Z_1 내지 Z_{15} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, g 및 s는 각각 독립적으로 0 또는 1 이고, q1 내지 q15는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, L_2 는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기이며, r은 1 또는 2 이다.

[0037] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 일중항 상태에서 바닥 상태로의 전이에 기초한 발광 메커니즘을 갖는 것일 수 있다.

[0038] 본 발명의 일 실시예는 제1 전극, 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층, 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역 및 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고, 발광층은 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0039] 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 도펀트가 제1 화합물인 것일 수 있다. 호스트는 제2 화합물인 것일 수

있다.

- [0040] 호스트의 최저 삼중항 여기 에너지 준위는 도펀트의 최저 일중항 여기 에너지 준위보다 높은 것일 수 있다.
- [0041] 발광층은 형광 발광층이고, 유기 전계 발광 소자의 최대 외부 양자 수율이 5% 이상인 것일 수 있다.

발명의 효과

- [0042] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 발광 효율이 우수하다.
- [0043] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 삼중항에서 일중항으로 변환될 때 필요한 열 에너지가 지극히 작아 유기 전계 발광 소자에 적용될 경우 롤-오프(roll-off) 현상 발생률을 최소화할 수 있다.
- [0044] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 고효율과 동시에 롤-오프 저감화를 구현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0045] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물의 여기 상태의 에너지 다이어그램이다.
- 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물의 여기 상태의 에너지 다이어그램이다.
- 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물의 최저 일중항 에너지 준위 및 제2 화합물의 최저 삼중항 에너지 준위 관계를 나타낸 도면이다.
- 도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.
- 도 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0046] 이상의 본 발명의 목적들, 다른 목적들, 특징들 및 이점들은 첨부된 도면 및 이하의 바람직한 실시예들을 통해서 쉽게 이해될 것이다. 그러나 본 발명은 여기서 설명되는 실시예들에 한정되지 않고 다른 형태로 구체화될 수도 있다. 오히려, 여기서 소개되는 실시예들은 개시된 내용이 철저하고 완전해질 수 있도록 그리고 통상의 기술자에게 본 발명의 사상이 충분히 전달될 수 있도록 하기 위해 제공되는 것이다.
- [0047] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0048] 본 명세서에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "하부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.
- [0049] 먼저, 도 1 내지 도 3을 참조하여, 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 대해 설명한다.
- [0050] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 하기 식 1을 만족하는 제1 화합물을 포함한다.
- [0051] [식 1]
- [0052] $K2 \geq 0.1K1$
- [0053] 식 1에서, K1은 n번째 삼중항 여기 상태에서 최저 삼중항 여기 상태를 포함하는 저차(lower order) 삼중항 여기 상태로의 무 복사 천이 속도의 합이고, K2는 n번째 삼중항 여기 상태에서 상기 n번째 삼중항 여기 상태와 인접한 일중항 여기 상태로의 역 향간 천이 속도이며, n은 2 이상의 정수이다. n은 2 초과 정수일 수 있다.

- [0054] 다시 말해, 제1 화합물은 n번째 삼중항 여기 상태에서 최저 삼중항 여기 상태로의 비복사 실활 속도가, n번째 삼중항 여기 상태에서 n번째 삼중항 여기 상태와 인접한 일중항 여기 상태로 천이하는 역 공간 교차(reverse intersystem crossing) 속도보다 0.1배 큰 화합물이다. K2가 K1보다 크나, 0.1배 이상 크지 않을 경우, K2가 K1보다 큰 것에 의해 기대할 수 있는 효과가 미비하다. 따라서, K2는 K1의 0.1배 이상이라는 조건을 만족한다면 클수록 바람직하다. 예를 들어, K2는 K1의 0.1배 큰 것보다 0.2배 큰 것이 바람직하다.
- [0055] 예를 들어, 제1 화합물은 K2가 K1보다 0.1배 이상 20배 이하 큰 것일 수 있다.
- [0056] 본 명세서에서, "역 공간 교차"는 삼중항 상태에서 일중항 상태로 천이되는 것을 의미하는 것일 수 있다.
- [0057] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물의 여기 상태의 에너지 다이어그램이다. 도 1에서는 식 1에서 n이 4인 경우를 예를 들어 도시하였다.
- [0058] 도 1을 참조하면, 제1 화합물은 4번째 삼중항 여기 상태(T4)에서 최저 삼중항 여기 상태(T1)로의 천이 속도(K1)가 4번째 삼중항 여기 상태(T4)에서 4번째 삼중항 여기 상태(T4)와 인접한 일중항 여기 상태(S1)로의 천이 속도(K2)보다 0.1배 이상 빠른 것에 의해, 여기자(exciton)가 4번째 삼중항 여기 상태(T4)에서 4번째 삼중항 여기 상태(T4)보다 에너지 준위가 낮은 삼중항 여기 상태(T3, T2, T1)로 천이되는 확률보다 4번째 삼중항 여기 상태(T4)에서 인접한 일중항 여기 상태(S1)로 천이되는 확률이 높게 된다. 제1 화합물은 삼중항 여기자가 일중항 여기자로 천이된 후, 일중항 여기자가 바닥 상태로 떨어지면서 발광한다.
- [0059] 삼중항 여기자를 일중항 여기자로 천이시킨 후 발광을 행하는 발광 메커니즘으로는 열 활성화 지연 형광이 알려져 있다. 열 활성화 지연 형광의 경우, 일반적인 형광 발광보다 이론적인 효율 한계가 높으나, 삼중항에서 일중항으로의 천이를 위해 일정 수준 이상의 열을 필요로 하기 때문에 고전류밀도하에서 급격하게 휘도가 떨어지는 롤-오프 현상 발생 가능성이 높다는 한계를 가지고 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물은 최저 삼중항 여기 상태(T1)보다 에너지 준위가 높은 삼중항 여기 상태(예를 들어, T3 또는 T4)를 이용하는 바, 삼중항 여기자를 일중항 여기자로 천이시키기 위해 필요한 열 에너지가 제로이거나 지극히 낮다. 결과적으로 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 제1 화합물을 포함함으로써 고효율의 발광을 구현할 있으며, 유기 전계 발광 소자에 이용되는 경우, 유기 전계 발광 소자의 롤-오프 현상 발생 가능성을 최소화할 수 있게 된다.
- [0060] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 열 활성화 지연 형광 발광 재료가 아니며, 통상의 형광 발광 재료와는 차이점이 있는 고차 3중항 경유의 형광 발광(fluorescence via highly excited triplets) 재료이다. 통상의 형광 발광 재료는 $K1 > K2$ 의 관계를 만족하는 바, IQE 값이 최대 0.25 수준이지만, 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 $K2 > K1$ 관계를 만족하는 바, IQE 값이 0.32 이상이 될 수 있어, 인광 발광 재료 및 열 활성화 지연 형광 재료와 같이 IQE=1을 달성할 수 있다. 외부양자효율은 IQE의 20%이며, IQE는 하기 식에 의해 도출될 수 있다.
- [0061]
$$IQE = 0.25 + 0.75 \times K2 / (K1 + K2)$$
- [0062] 도 1에서는 4번째 삼중항 여기 상태(T4)에서 최저 삼중항 여기 상태(T1)로 천이하는 역 공간 교차를 예를 들어 도시하였으나 이에 의하여 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 식 1의 K2는 5번째 삼중항 여기 상태(식 1에서 n이 5인 경우)에서 3번째 일중항 여기 상태로의 천이 속도를 의미하는 것일 수 있다. 즉, 역 공간 교차 대상은 식 1의 n이 2 이상인 경우만 만족하면 특별히 한정되지 않는다.
- [0063] 도 1에서는 식 1의 K2로 n번째 삼중항 여기 상태(T4)가 n번째 삼중항 여기 상태(T4)와 인접하면서 에너지 준위가 낮은 일중항 여기 상태(S1)로의 천이 속도를 예를 들어 도시하였으나 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0064] 도 2를 참조하면, 식 1의 K2는 3번째 삼중항 여기 상태(T4)에서 3번째 삼중항 여기 상태(T4)와 인접하면서 에너지 준위가 높은 일중항 여기 상태(S1)로의 천이 속도인 것일 수도 있다. 다시 말해, K2의 정의에서 n번째 삼중항 여기 상태와 인접한 일중항 여기 상태는 n번째 삼중항 여기 상태보다 에너지 준위가 높을 수도 있고 낮을 수도 있다. K2의 정의에서 n번째 삼중항 여기 상태와 인접한 일중항 여기 상태가 n번째 삼중항 여기 상태보다 에너지 준위가 높을 경우, 에너지 갭은 작을수록 바람직하다.
- [0065] 식 1에서 K1은 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 이하인 것일 수 있다. 예를 들어, K1은 $1 \times 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ 이상 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 이하인 것일 수 있다. 예를 들어, 4번째 삼중항 여기 상태(T4)에서 최저 삼중항 여기 상태(T1)로의 천이 속도는 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 이하인 것일 수 있다. 식 1의 K1가 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 이하로 작은 값을 가질 경우 삼중항 여기 상태의 열 실활 속도가

느린 것을 의미하며, 이로 인해 삼중항 여기 상태에서 인접한 일중항 여기 상태로의 역 공간 교차 가능성이 높아질 수 있다.

[0066] 도 1 및 도 2에서는 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료가 최저 일중항 여기 상태의 여기자가 기저 상태로 떨어지면서 발광하는 것을 예를 들어 도시하였으나, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 제1 화합물은 식 1을 만족하지만 한다면 제2 일중항 여기 상태의 여기자가 기저 상태로 떨어지면서 발광하는 것일 수도 있다.

[0067] 상기 식 1을 만족하는 제1 화합물은 하기 식 2를 더 만족하는 것이 바람직하다.

[0068] [식 2]

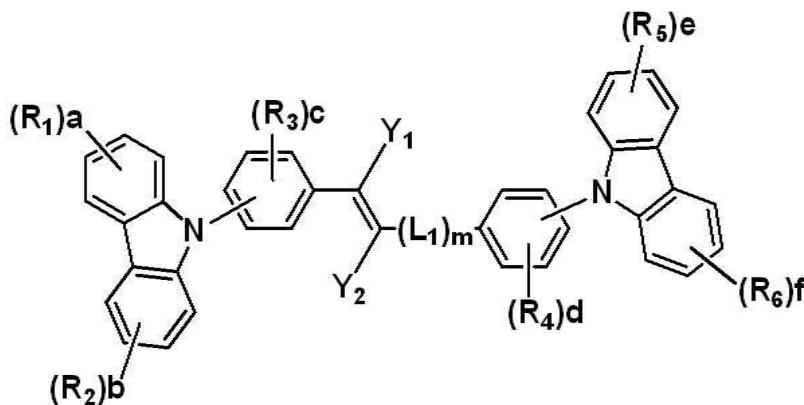
[0069] $V_n < 1.5 \times 10^{-4}$ (원자 단위, atomic unit)

[0070] 상기 식 2에서, V_n 은 양자 화학 계산에 의해 계산된 n 번째(특정 n 이며, n 은 정수이다) 삼중항 여기 상태 및 최저 삼중항 여기 상태 사이의 각 기준 진동 모드에 대한 비대각 진동-전자 상호작용 상수(Off-diagonal Vibronic Coupling Constant)이다. 식 2를 만족하는 제1 화합물은 비교적 작은 비대각 진동-전자 상호작용 상수를 갖는 것에 의해, $K1$ 이 작아져서, $K2 > 0.1K1$ 을 달성할 수 있다. 그 결과 삼중항 여기 상태에서 일중항 여기 상태로의 전이 및 형광 발광을 일으키는 것에 의해, 일반적으로 알려진 형광 발광 재료보다 더 높은 양자 효율을 얻을 수 있다.

[0071] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 청색광을 발광하는 것일 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료의 최대 발광 파장은 480nm 이하인 것일 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 430nm 이상 480nm 이하의 파장 영역대의 청색광을 발광하는 것일 수 있다.

[0072] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물은 식 1을 만족하는 것이라면 구조는 특별히 한정되지 않는다. 제1 화합물은 예를 들어, 하기 화학식 1로 표시되는 것일 수 있다. 다만, 제1 화합물의 구조가 하기 화학식 1에 한정되는 것은 아니다.

[0073] [화학식 1]



[0074]

[0075] 화학식 1에서, L_1 은 2가의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이고, m 은 0 내지 3의 정수이며, m 이 2 이상일 경우, 복수의 L_1 은 서로 동일하거나 상이하고, R_1 내지 R_6 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, a 내지 f 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0076] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 플루오레닐기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 비페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치

환된 페닐기로 해석될 수도 있다.

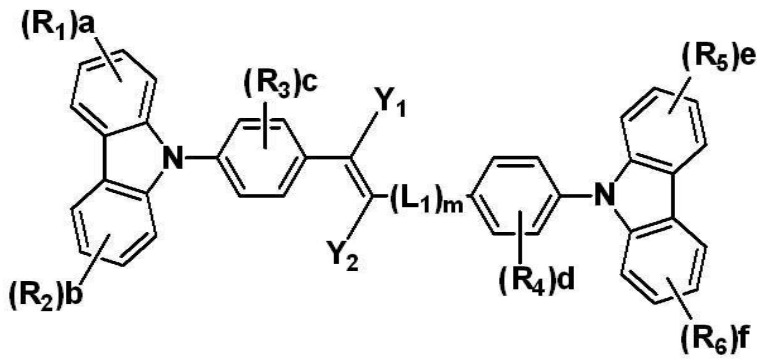
- [0077] 본 명세서에서, "인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성"한다는 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리를 형성하는 것을 의미할 수 있다. 탄화수소 고리는 지방족 탄화수소 고리 및 방향족 탄화수소 고리를 포함한다. 헤테로 고리는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리를 포함한다. 탄화수소 고리 및 헤테로 고리는 단환 또는 다환일 수 있다. 또한, 인접하는 기와 서로 결합하여 형성된 고리는 다른 고리와 연결되어 스피로 구조를 형성하는 것일 수도 있다.
- [0078] 본 명세서에서, "인접하는 기"는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기 또는 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 인접한 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 1,2-디메틸벤젠(1,2-dimethylbenzene)에서 2개의 메틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있고, 1,1-디에틸시클로펜텐(1,1-diethylcyclopentene)에서 2개의 에틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있다.
- [0079] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0080] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 6 이하일 수 있다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2-에틸부틸기, 3,3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리카실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0081] 본 명세서에서, 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, 안트라세닐기, 페난트릴기, 비페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀸크페닐기, 섹스페닐기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0082] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수도 있다.
- [0083] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 이종 원소로 O, N, Si, 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하일 수 있다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로아릴기 또는 다환식 헤테로아릴기일 수 있다. 다환식 헤테로아릴기는 예를 들어, 2환 또는 3환 구조를 갖는 것일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴놀살리닐기, 페녹사질기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난트롤린기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기, 디벤조실릴기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0084] 본 명세서에서, 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0085] 본 명세서에서, 헤테로아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0086] 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.

[0087] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸 붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0088] 본 명세서에서, 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하, 2 이상 10 이하 또는 2 이상 5 이하이다. 알케닐기의 예로는 비닐, 1-부테닐, 1-펜테닐, 1,3-부타디에닐 아릴, 스티레닐기, 스트릴 비닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0089] 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0090] [화학식 1-1]

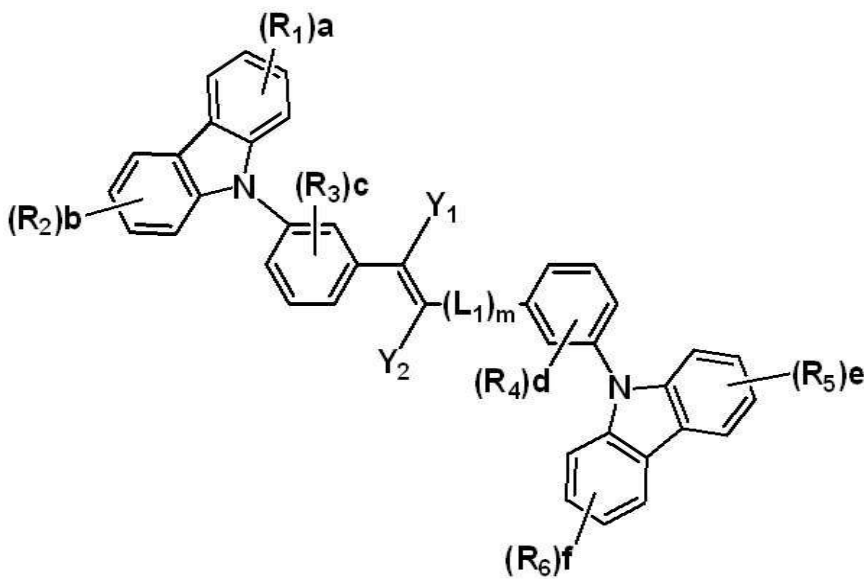


[0091]

[0092] 화학식 1-1에서, R₁ 내지 R₆, a 내지 f, Y₁, Y₂, 및 m은 전술한 바와 동일하다.

[0093] 화학식 1은 하기 화학식 1-2로 표시되는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0094] [화학식 1-2]



[0095]

[0096] 화학식 1-2에서, R₁ 내지 R₆, a 내지 f, Y₁, Y₂, 및 m은 전술한 바와 동일하다.

[0097] 화학식 1에서, m은 0일 수 있다. 이 경우, 화학식 1의 2개의 벤젠이 2가의 에틸렌기를 통해 연결된 구조를 갖는다.

[0098] 화학식 1에서, m이 1일 수 있다.

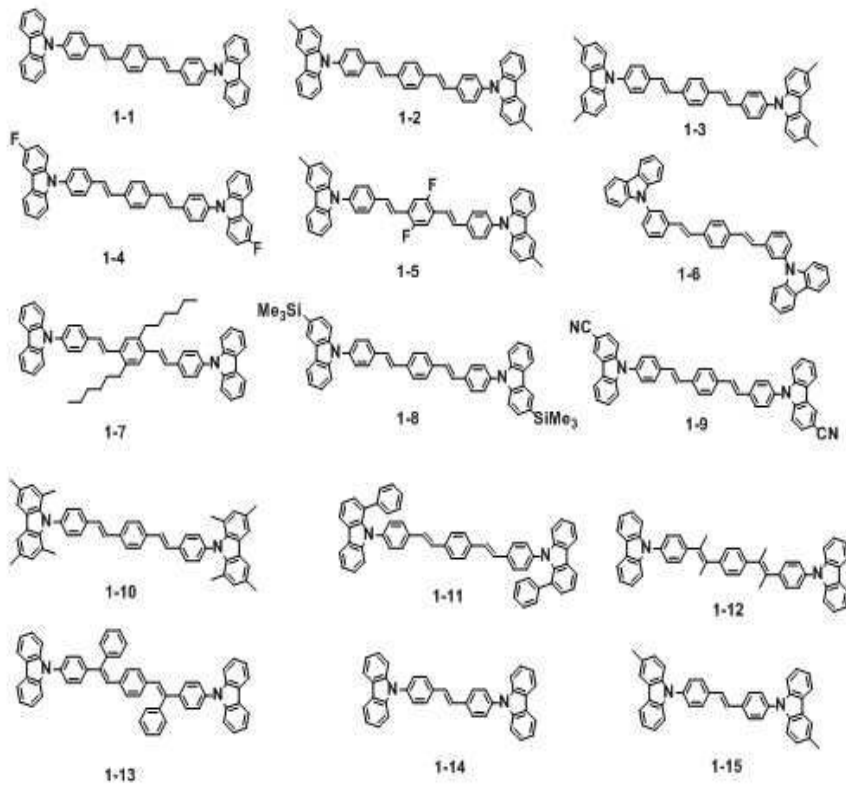
[0099] 화학식 1에서, m이 2이고, 1개의 L₁은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이고, 나머지 1개의 L₁은 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 10 이하의 2가의 알케닐기인 것일 수 있다.

[0100] 화학식 1에서, m이 2이고, 1개의 L₁은 치환 또는 비치환된 페닐렌기이고, 나머지 1개의 L₁은 치환 또는 비치환된

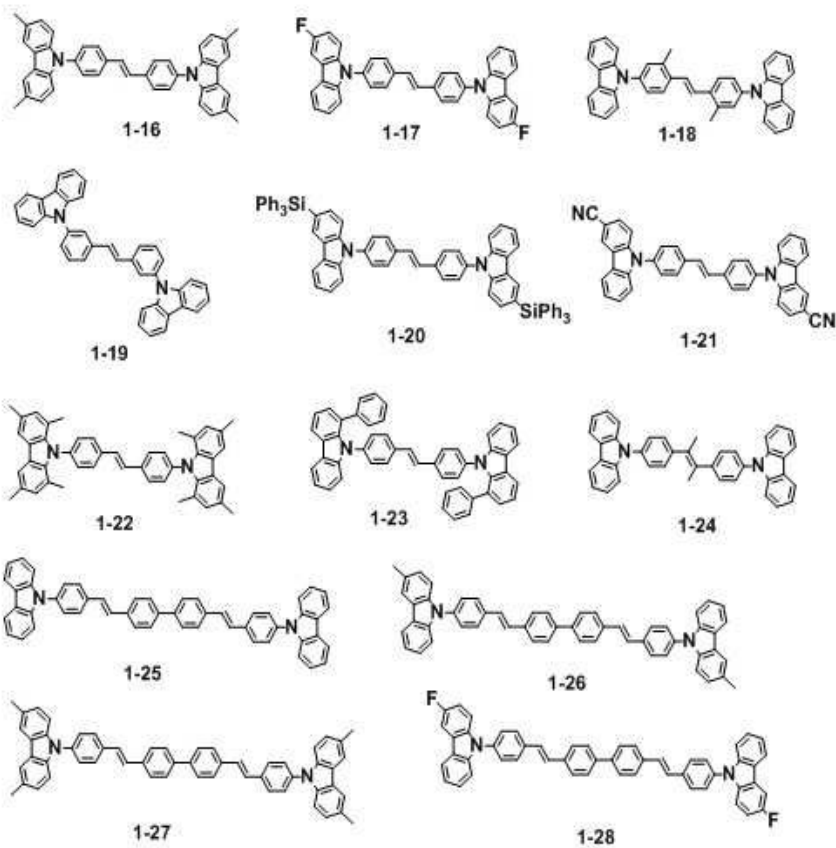
2가의 에틸렌기(비닐)일 수 있다.

- [0101] 화학식 1에서, m 이 2이고, 1개의 L_1 은 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐렌기이고, 나머지 1개의 L_1 은 치환 또는 비치환된 2가의 에틸렌기(비닐)일 수 있다.
- [0102] 화학식 1에서, m 은 3일 수 있다.
- [0103] 화학식 1에서, R_1 내지 R_6 는 모두 수소 원자인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니고, 화학식 1에서 R_1 내지 R_6 중 적어도 하나는 수소 원자 이외의 치환기로 치환된 것일 수 있다.
- [0104] 화학식 1에서, R_1 내지 R_6 는 각각 독립적으로 수소 원자, 불소 원자, 시아노기, 트리메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 페닐기인 것일 수 있다.
- [0105] 화학식 1에서, a 가 2 이상인 경우, 복수의 R_1 은 동일하거나 상이하다. 화학식 1에서, b 가 2 이상인 경우, 복수의 R_2 는 동일하거나 상이하다. 화학식 1에서, c 가 2 이상인 경우, 복수의 R_3 은 동일하거나 상이하다. 화학식 1에서, d 가 2 이상인 경우, 복수의 R_4 는 동일하거나 상이하다. 화학식 1에서, e 가 2 이상인 경우, 복수의 R_5 는 동일하거나 상이하다. 화학식 1에서, f 가 2 이상인 경우, 복수의 R_6 은 동일하거나 상이하다.
- [0106] 화학식 1에서, a , b , e 및 f 는 모두 0일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니고, 화학식 1에서, a , b , e 및 f 중 적어도 하나는 1 이상인 것일 수 있다. 이 경우, R_1 , R_2 , R_5 및 R_6 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 시아노기, 할로젠 원자, 트리메틸실릴기 또는 트리페닐실릴기인 것일 수 있다.
- [0107] 화학식 1에서, c 및 d 는 모두 0인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.
- [0108] 화학식 1에서, Y_1 및 Y_2 는 모두 수소 원자인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니고, Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기인 것일 수 있다. 화학식 1에서, Y_1 및 Y_2 는 모두 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기인 것일 수 있다. 화학식 1에서, Y_1 및 Y_2 는 모두 치환 또는 비치환된 메틸기인 것일 수 있다. 화학식 1에서, Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 페닐기인 것일 수 있다.
- [0109] 제1 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것일 수 있다. 다만, 제1 화합물의 예시가 하기에 한정되는 것은 아니며, 전술한 바와 같이 제1 화합물은 식 1을 만족하는 것이라면 특별히 한정되지 않는다.

[0110] [화합물군 1]



[0111]



[0112]

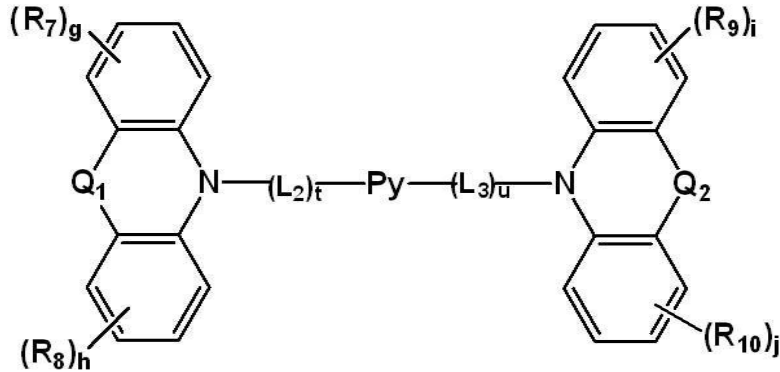
[0113]

제1 화합물의 또 다른 예로는 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 들 수 있다. 다만, 전술한 바와 같이, 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물은 식 1을 만족하는 것이라면 구조는 특별히 한정되지

않는다.

[0114] 제1 화합물의 또 다른 예로는 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 들 수 있다. 다만, 전술한 바와 같이, 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물은 식 1을 만족하는 것이라면 구조는 특별히 한정되지 않는다.

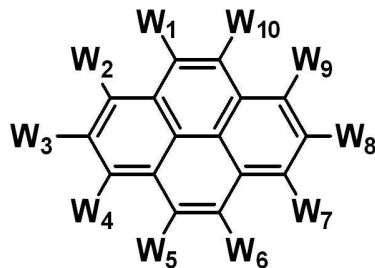
[0115] [화학식 2]



[0116]

[0117] 화학식 2에서, L₂ 및 L₃는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이고, t 및 u는 각각 독립적으로 0 또는 1이며, Q₁ 및 Q₂는 각각 독립적으로 직접 결합(direct linkage), CR₁₁R₁₂ 또는 SiR₁₃R₁₄이고, R₇ 내지 R₁₄는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하며, g 내지 j는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, Py는 하기 화학식 3으로 표시된다.

[0118] [화학식 3]



[0119]

[0120] 화학식 3에서, W₁ 내지 W₁₀ 중 2개는 연결되는 부위이고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0121] 화학식 2에서, Q₁ 및 Q₂는 각각 직접 결합인 것일 수 있다. 이 경우, 화학식 2로 표시되는 화합물은 2개의 카바졸기를 포함한다.

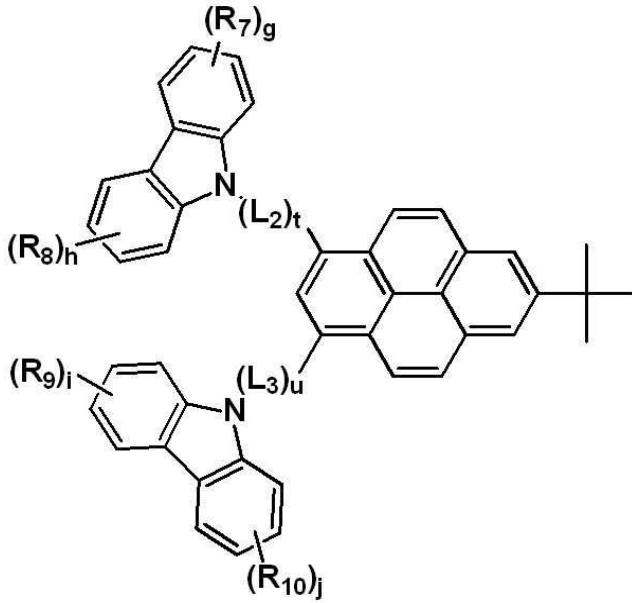
[0122] 화학식 2에서, L₂ 및 L₃는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, p 및 q가 각각 0일 수도 있다.

[0123] 화학식 2에서, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, R₁₃ 및 R₁₄는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0124] 화학식 2에서, t 및 u가 각각 0이고, Q₁ 및 Q₂가 각각 CR₁₁R₁₂ 또는 SiR₁₃R₁₄일 수 있다. 여기서, R₁₁ 내지 R₁₄는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있고, 예를 들어, 페닐기일 수 있다. R₁₁ 및 R₁₂는 서로 결합하여 플루오렌 고리를 형성할 수도 있다.

[0125] 화학식 2는 하기 화학식 2-1로 표시될 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0126] [화학식 2-1]



[0127]

[0128] 화학식 2-1에서, R_7 내지 R_{10} , g 내지 j , L_2 , L_3 , t 및 u 는 전술한 바와 동일하다.

[0129] 화학식 2-1에서, t 및 u 는 각각 1이고, L_2 및 L_3 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다. 화학식 2-1에서, t 및 u 는 각각 1이고, L_2 및 L_3 는 비치환된 페닐렌기일 수 있다.

[0130] 화학식 2-1에서, g 내지 j 는 각각 0일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, $g+t+i+j \geq 1$ 일 수 있고, R_7 내지 R_{10} 중 적어도 하나는 할로젠 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. 화학식 2-1에서, R_7 내지 R_{10} 중 적어도 하나는 불소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 메틸기일 수 있다.

[0131] 화학식 3에서, W_2 및 W_3 이 연결되는 부위일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 예를 들어, 화학식 3에서, W_3 및 W_8 이 연결되는 부위일 수 있다. 또 다른 예로는 W_4 및 W_9 가 연결되는 부위일 수 있다.

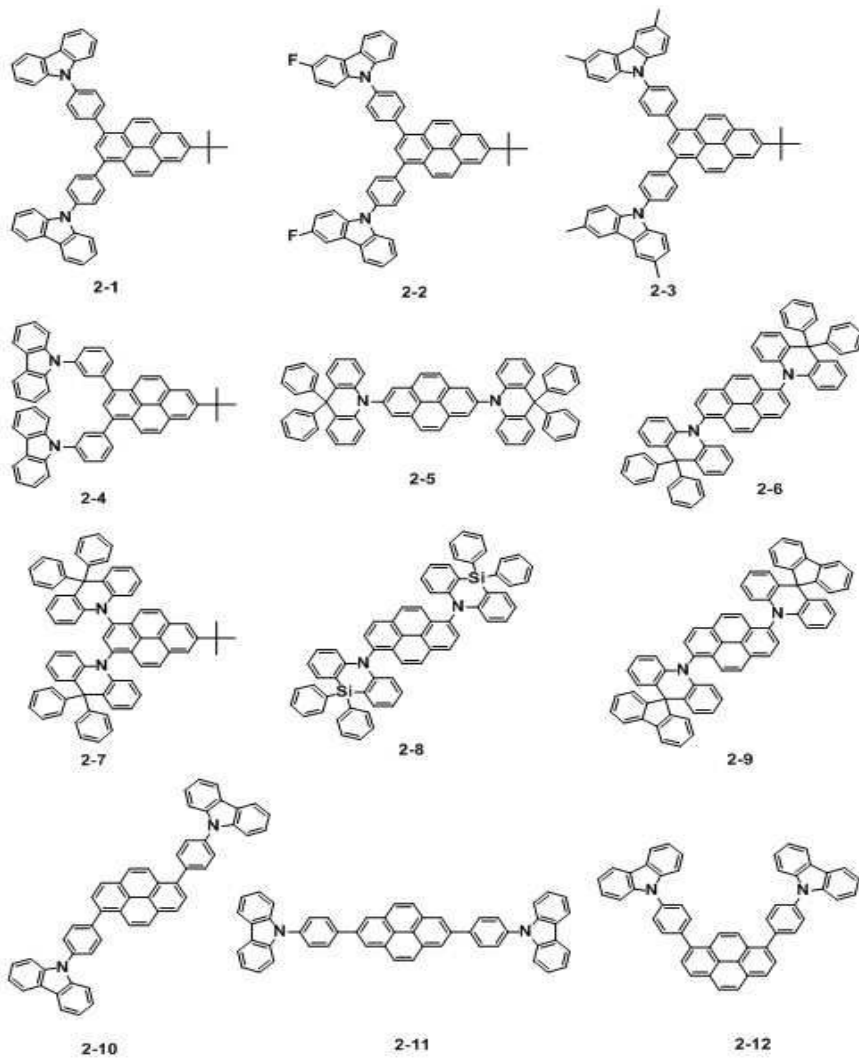
[0132] 화학식 2에서, Q_1 및 Q_2 는 서로 동일하고, L_2 및 L_3 이 서로 동일한 것일 수 있다. 화학식 2에서, Q_1 및 Q_2 는 서로 동일하고, L_2 및 L_3 이 서로 동일하고, R_7 및 R_9 는 서로 동일하고, R_8 및 R_{10} 은 서로 동일한 것일 수 있다.

[0133] 화학식 2에서, Q_1 및 Q_2 는 $CR_{11}R_{12}$ 이고, R_{11} 및 R_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있고, 예를 들어, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. R_{11} 및 R_{12} 는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, 예를 들어, 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

[0134] 화학식 2에서, Q_1 및 Q_2 는 $SiR_{13}R_{14}$ 이고, R_{13} 및 R_{14} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있고, 예를 들어, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0135] 제1 화합물은 하기 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것일 수 있다. 다만, 제1 화합물의 예시가 하기에 한정되는 것은 아니며, 전술한 바와 같이 제1 화합물은 식 1을 만족하는 것이라면 특별히 한정되지 않는다.

[0136] [화합물군 2]



[0137]

[0138] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 제1 화합물로만 이루어진 것일 수 있다. 이 경우, 1종의 제1 화합물만을 포함하는 것일 수도 있고 2종 이상의 제1 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

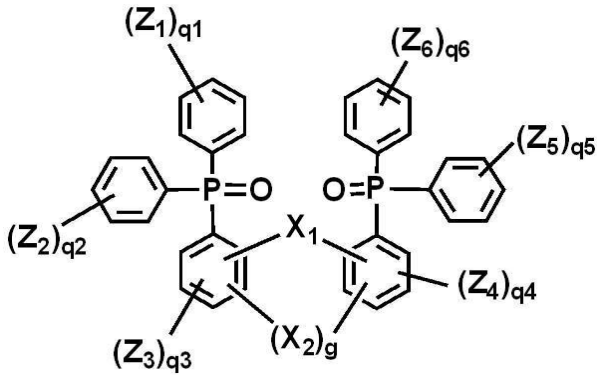
[0139] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 제1 화합물과 상이한 제2 화합물을 더 포함하는 것일 수 있다. 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물의 최저 일중항 에너지 준위 및 제2 화합물의 최저 삼중항 에너지 준위 관계를 나타낸 도면이다. 도 3을 참조하면, 제2 화합물의 최저 삼중항 여기 에너지 준위 (E_{T1}^h)은 제1 화합물의 최저 일중항 여기 에너지 준위 (E_{S1}^d)보다 높은 것일 수 있다.

[0140] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료가 제1 화합물 및 제2 화합물을 모두 포함할 경우, 제2 화합물의 중량%는 제1 화합물의 중량%보다 큰 것일 수 있다.

[0141] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 2종 이상의 제2 화합물을 더 포함하는 것일 수도 있고, 1종의 제2 화합물을 더 포함하는 것일 수도 있다.

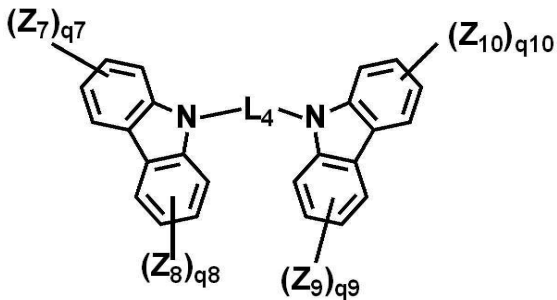
[0142] 제2 화합물은 예를 들어, 하기 화학식 4 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0143] [화학식 4]



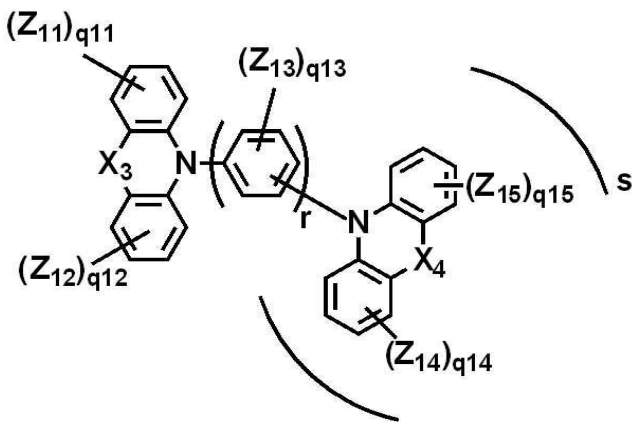
[0144]

[0145] [화학식 5]



[0146]

[0147] [화학식 6]



[0148]

[0149] 화학식 4에서, X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 직접결합, O, S, CRaRb 또는 SiRcRd이고, Ra 내지 Rd 및 Z_1 내지 Z_6 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, g 는 0 또는 1이고, q_1 내지 q_6 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, r 은 1 또는 2이다.

[0150] 화학식 4에서, q_1 이 2 이상일 경우, 복수의 Z_1 은 동일하거나 상이하다. 화학식 2에서, q_2 가 2 이상일 경우, 복수의 Z_2 는 동일하거나 상이하다. 화학식 2에서, q_3 이 2 이상일 경우, 복수의 Z_3 은 동일하거나 상이하다. 화학식 2에서, q_4 가 2 이상일 경우, 복수의 Z_4 는 동일하거나 상이하다. 화학식 2에서, q_5 가 2 이상일 경우, 복수의 Z_5 는 동일하거나 상이하다. 화학식 2에서, q_6 이 2 이상일 경우, 복수의 Z_6 은 동일하거나 상이하다.

[0151] 화학식 5에서, Z_7 내지 Z_{10} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, L_4 는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6

이상 30 이하의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기이고, q7 내지 q10은 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

[0152] 화학식 5에서, q7이 2 이상일 경우, 복수의 Z₇은 동일하거나 상이하다. 화학식 3에서, q8이 2 이상일 경우, 복수의 Z₈은 동일하거나 상이하다. 화학식 3에서, q9가 2 이상일 경우, 복수의 Z₉은 동일하거나 상이하다. 화학식 3에서, q10이 2 이상일 경우, 복수의 Z₁₀은 동일하거나 상이하다.

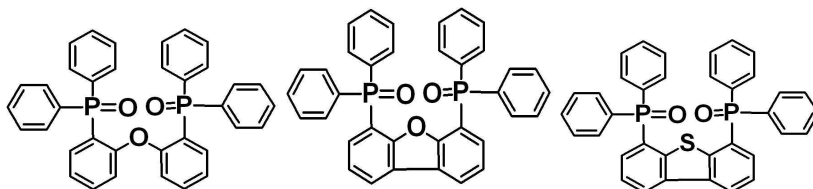
[0153] 화학식 6에서, X₃ 및 X₄는 각각 독립적으로 O, S, CRaRb 또는 SiRcRd이고, Ra 내지 Rd 및 Z₁₁ 내지 Z₁₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, q11 내지 q15는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, s는 0 또는 1이고, r은 1 또는 2이다. 화학식 6에서, s가 0일 경우, q15는 0 이상 5 이하의 정수이다.

[0154] 화학식 6에서, q11이 2 이상일 경우, 복수의 Z₁₁은 동일하거나 상이하다. 화학식 6에서, q12가 2 이상일 경우, 복수의 Z₁₂는 동일하거나 상이하다. 화학식 6에서, q13이 2 이상일 경우, 복수의 Z₁₃은 동일하거나 상이하다. 화학식 6에서, q14가 2 이상일 경우, 복수의 Z₁₄은 동일하거나 상이하다. 화학식 6에서, q15가 2 이상일 경우, 복수의 Z₁₅는 동일하거나 상이하다.

[0155] 화학식 4에서, X₁은 O 또는 S이고, g는 1이고, X₂는 직접결합, 또는 CRaRb일 수 있다. 화학식 2에서, X₁은 O 또는 S이고, g는 0일 수 있다.

[0156] 화학식 4에서, q1 내지 q6이 모두 0인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, q1 내지 q6 중 적어도 하나는 1 이상인 것일 수 있다.

[0157] 화학식 4에서, Z₁ 내지 Z₆ 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기인 것일 수 있다. 화학식 4로 표시되는 제2 화합물은 예를 들어 하기 화합물들 중 어느 하나인 것일 수 있다.

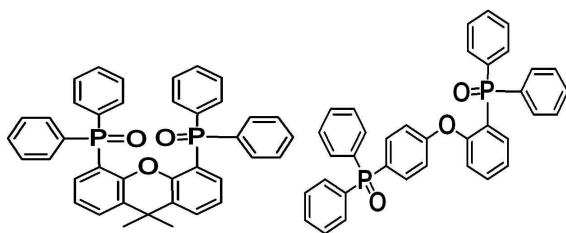


4-1

4-2

4-3

[0158]



4-4

4-5

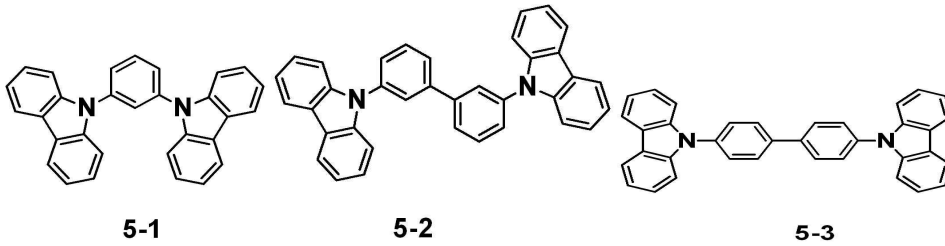
[0159]

[0160] 화학식 5에서, L₄는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기일 수 있다. 화학식 5에서, L₄는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴렌기일 수 있다. 화학식 5에서, L₄는 단환 구조의 아릴렌기일 수 있다. 화학식 5에서, L₄는 치환 또는 비치환된 페닐렌기 또는 2개의 비페닐렌기일 수 있다. 화학식 5에서, L₄는 다환 구조의 아릴렌기일 수 있다. 화학식 5에서, L₄는 2개의 나프틸렌기일 수 있다.

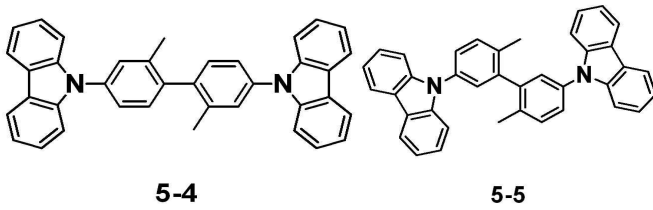
[0161] 화학식 5에서, q7 내지 q10은 모두 0인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니고, q7 내지 q10 중 적어도 하나는 1 이상인 것일 수 있다.

[0162] 화학식 5에서, Z_7 내지 Z_{10} 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기인 것일 수 있다.

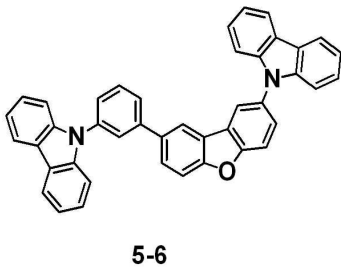
[0163] 화학식 5로 표시되는 제2 화합물은 예를 들어 하기 화합물들 중 어느 하나인 것일 수 있다.



[0164]



[0165]



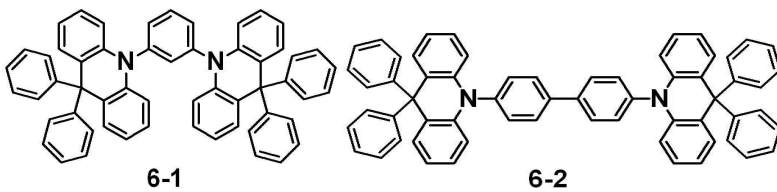
[0166]

[0167] 화학식 6에서, X_3 및 X_4 는 서로 동일할 수 있고, 예를 들어, X_3 및 X_4 는 CRaRb일 수 있다. Ra 및 Rb는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있고, 예를 들어, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 화학식 6에서, s는 0이고, r은 1일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

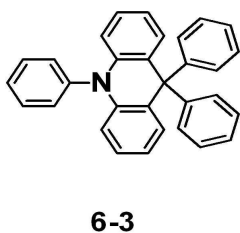
[0168] 화학식 6에서, q11 내지 q13은 모두 0인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니고, q11 내지 q13 중 적어도 하나는 1 이상인 것일 수 있다.

[0169] 화학식 6에서, Z_{11} 내지 Z_{13} 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기인 것일 수 있다.

[0170] 화학식 6으로 표시되는 제2 화합물은 예를 들어 하기 화합물들 중 어느 하나인 것일 수 있다.



[0171]



[0172]

- [0173] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 일중향 상태에서 바닥 상태로의 전이에 기초한 발광 메커니즘을 갖는 것일 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 형광 발광 재료인 것일 수 있다.
- [0174] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 발광 효율이 우수하다. 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료를 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 고효율 및 물-오프 현상 최소화를 동시에 구현할 수 있다.
- [0175] 이하에서는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다. 이하에서는 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료와의 차이점을 위주로 구체적으로 설명하고, 설명되지 않은 부분은 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 관한 설명에 따른다.
- [0176] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료를 포함한다.
- [0177] 도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.
- [0178] 도 4 및 도 5를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함한다.
- [0179] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 화소 전극 또는 양극일 수 있다. 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등을 포함할 수 있다. 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.
- [0180] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 예를 들어, 약 500Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.
- [0181] 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.
- [0182] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질과 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0183] 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.
- [0184] 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)), α-NPD(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.
- [0185] 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, α -NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenyl-benzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 등을 포함할 수도 있다.

- [0186] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 모두 포함하면, 정공 주입층(HIL)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å 이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0187] 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.
- [0188] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.
- [0189] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)의 두께는 예를 들어, 약 100Å 내지 약 300Å 인 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.
- [0190] 발광층(EML)은 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 제1 화합물을 포함하는 발광 재료를 포함한다.
- [0191] 발광층(EML)은 1종의 제1 화합물로만 이루어진 발광층일 수도 있고, 2종 이상의 제1 화합물로만 이루어진 발광층일 수도 있다. 발광층(EML)은 제1 화합물 및 제2 화합물을 모두 포함하는 발광 재료로 이루어진 발광층일 수도 있다. 이 경우, 제2 화합물은 1종만 포함될 수도 있고, 2종 이상이 포함될 수도 있다.
- [0192] 발광층(EML)은 형광 발광층인 것일 수 있다. 형광 발광층이란 발광 재료가 형광 메커니즘에 의해 발광하는 층을 의미하는 것일 수 있다.
- [0193] 발광층(EML)은 청색 발광층인 것일 수 있다. 발광층(EML)은 최대 발광 파장이 480nm 이하인 광을 발광한 것일 수 있다. 발광층(EML)은 430nm 이상 480nm 이하의 파장 영역대의 청색광을 발광하는 것일 수 있다.
- [0194] 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함하는 것일 수 있다. 다시 도 3을 참조하면, 발광층(EML)은 최저 삼중항 여기 에너지 준위(E_{T1}^h)가 도펀트의 최저 일중항 여기 에너지 준위(E_{S1}^d)보다 높은 호스트를 포함하는 것이 바람직하다. 이 경우, 도펀트에서 호스트로의 역 에너지 이동에 의한 효율 저하를 최소화할 수 있다.
- [0195] 발광층(EML)의 도펀트는 상기 제1 화합물인 것일 수 있다.
- [0196] 발광층(EML)의 호스트는 상기 제2 화합물인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니고 발광층(EML)은 당 기술분야에 알려진 일반적인 호스트 재료를 포함하는 것일 수도 있다.
- [0197] 발광층(EML)은 예를 들어 약 100Å 내지 약 1000Å의 두께를 갖는 것일 수 있다.
- [0198] 다시 도 5 및 도 6을 참조하면, 전자 수송 영역(ETR)은 발광층(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 전자 저지층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0199] 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.
- [0200] 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, 제1 전극(AN)로부터 차례로 적층된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

[0201] 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.

[0202] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 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-N1,08)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq₂(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0203] 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 할로겐화 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.

[0204] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층을 포함할 수 있다. 정공 저지층은 예를 들어, DPEPO(bis(2-[di(phenyl) phosphino]phenyl)ether oxide), 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.

[0205] 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.

[0206] 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.

[0207] 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.

[0208] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여

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

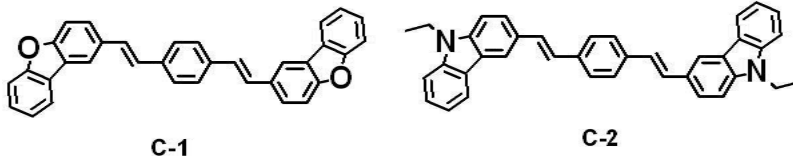
- [0209] 유기 전계 발광 소자(10)가 전면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 반사형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 배면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 반사형 전극일 수 있다.
- [0210] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 형광 발광층을 포함하면서 최대 외부 양자 수율이 5% 이상인 것일 수 있다.
- [0211] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료를 포함함으로써 고 효율 및 롤-오프 현상 저하를 동시에 구현할 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료를 포함함으로써, 형광 발광의 한계로 여겨졌던 최대 외부 양자 수율 5%를 초과할 수 있으며, 발광 재료가 발광을 위해 필요로 하는 열 에너지가 제로이거나 지극히 작은 바 롤-오프 현상 발생 가능성도 줄일 수 있다.
- [0212] 이하, 구체적인 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 예시에 불과하며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0213] (합성예)
- [0214] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료에 포함되는 제1 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성하였다. 다만, 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0215] 1. 화합물 1-1의 합성
- [0216] (4-(Carbazol-9-yl)benzaldehyde) 8.13g, p-Xylylenediphosphonic Acid Tetraethyl Ester 5.67g을 THF 용매 250ml에 용해하고, 0.05M으로 조정한 tert-potassium butoxide의 THF 용액을 교반하면서, 실온에서 6시간에 걸쳐서 적하했다. 생성된 침전을 여과하고, 물 100ml, 에탄올 300ml의 순으로 씻고, 황색 화합물을 7.75g (수율 84%)을 얻었다. 생성된 황색 화합물의 FAB-MS 분석 결과는 하기와 같았다.
- [0217] M/z 612(M+), 613(MH+)
- [0218] 분석 결과를 통해, 황색 화합물이 화합물 1-1임을 확인하였다.
- [0219] 2. 화합물 1-4의 합성
- [0220] 화합물 1-1의 합성 방법에서 (4-(Carbazol-9-yl)benzaldehyde) 대신 4-(3-Fluorocarbazol-9-yl)benzaldehyde 8.69g을 사용한 것 외에는 동일한 방법으로 합성하여, 황색 화합물 7.70g (수율 80%)을 얻었다. 생성된 황색 화합물의 FAB-MS 분석 결과는 하기와 같았다.
- [0221] M/z 648(M+), 649(MH+)
- [0222] 분석 결과를 통해, 황색 화합물이 화합물 1-4임을 확인하였다.
- [0223] 3. 화합물 1-14의 합성
- [0224] 아르곤(Ar) 분위기 하에서 9H-carbazole 3.27 g, 4,4"-dibromostilbene 3.0g, Palladium(0)Bis(dibenzylideneacetone) 0.56 g, natrium-tert-butoxide 5.11 g에 toluene 30ml, tri(tert-butyl)phosphine의 2M toluene 용액 0.7ml을 순서대로 더하고, 5시간 가열 환류했다. 실온까지 냉각해서 석출한 결정을 여과하고, 물 50ml, 에탄올100ml의 순서대로 씻어서 황색 화합물 3g (수율 61%)을 얻었다. 생성된 황색 화합물의 FAB-MS 분석 결과는 하기와 같았다.
- [0225] M/z 551(M+), 552(MH+)
- [0226] 분석 결과를 통해, 황색 화합물이 화합물 1-14임을 확인하였다.
- [0227] 4. 화합물 2-1의 합성
- [0228] 4-(9-carbazolyl)phenylboronic acid 1.6g, 1,3-Dibromo-7-tert-butylpyrene 1.13 g, tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) 0.35g, Potassium Phosphate 2.5 g, 물 10 ml, THF 150ml를 12시간 reflux한 후, 실온이 될 때까지 두었다. 석출한 결정을 여과하고, 에탄올, 물, 아세톤 순서로 씻어서 건조하고, 담황색 결정 1.2g(수율 48%)을 얻었다. 담황색결정의 FAB-MS 분석 결과는 하기와 같았다.

[0229] (m/z 740.3(M+), 741.3(MH+))

[0230] (실험예 1)

[0231] 화합물 1-1, 1-4, 1-14 및 하기 비교예 C-1, C-2의 최저 일중항 여기 상태 에너지, n번째 삼중항 여기 상태 에너지 및 발광에 기여하는 삼중항 여기 상태 에너지 준위와의 비대각 진동-전자 상호작용 상수(off-diagonal vibronic coupling constant)를 정리하여 하기 표 1에 나타내었다. 하기 표 1에는 각 화합물을 발광층에 포함한 소자의 최대 외부 양자 수율도 기재되어 있다.

[0232] (비교예 화합물)



[0233]

표 1

[0234]

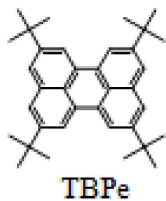
화합물	S1 Energy (eV)	Tn Energy (eV)	비대각진동전자상호작용상수 Vn (a.u.)	최대외부양자수율 (%)
1-1	2.79	T4 : 2.88	2×10^{-5}	6.3
1-4	2.78	T4 : 2.88	2×10^{-5}	6.3
1-14	3.08	T3 : 2.88	4×10^{-5}	5.5
C1	3.25	T3 : 3.39	4×10^{-4}	2.5
C2	2.91	T3 : 3.08	2×10^{-4}	4.3

[0235] 계산방법은 Gaussian09을 사용하고, 여기 에너지 준위의 계산은 B3LYP/6-31G(d), 비대각 진동-전자 상호작용 상수 Vn은 Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 14244-14256(2014) (Sato et al.)에 기재된 방법에 따랐다.

[0236] Tn Energy는 "Energy level of Triplet state which enhance fluorescence"를 의미하고, Vn은 "off-diagonal vibronic coupling constant of Triplet state which enhance fluorescence"를 의미한다.

[0237] (실험예 2)

[0238] 화합물 1-1, 1-4 및 1-14를 발광층의 도펀트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 3의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 실시예 1에서 호스트 재료만 상이하게 하여 비교예 1의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 하기 화합물 TPBe, 비교예 화합물 C-1 및 C-2를 사용하여 비교예 2 내지 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.



[0239]

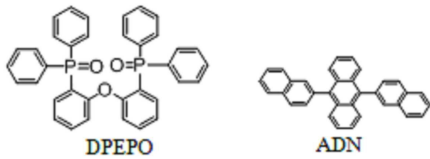
[0240] 실시예 1 내지 3 및 비교예 1 내지 4의 유기 전계 발광 소자는 다음과 같이 제작하였다.

[0241] ITO로 150nm 두께의 제1 전극을 형성하고, dipyrzino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile (HAT-CN)로 10nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, α-NPD로 80nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, mCP로 5nm 두께의 전자 저지층을 형성하고, 도펀트를 x% 도핑한 20nm 두께의 발광층을 형성하고, bis{2-[di(phenyl) phosphino]phenyl}ether oxide (DPEPO)로 10nm 두께의 정공 저지층을 형성하고, 1,3,5-Tris(1-phenyl-1H-benzimidazol-2-yl) benzene(TPBi)로 30nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, Lithium fluoride(LiF)로 0.5nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al로 100nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층 및 제2 전극은 모두 진공 증착법으로 형성하였다. 또한, 제작한 유기EL 소자의 발광 특성의 평가에는, 하마마쓰 포토닉스제

C9920-11 휘도배향특성 측정 장치를 사용했다.

표 2

소자작성예	Host	호스트(x%)	구동전압 (V, 10mA/cm ²)	최대 외부 양자 효율 (%)
실시예1	DPEPO	화합물 1-1(25%)	6.3	6.3
실시예2	DPEPO	화합물 1-4(24%)	6.0	6.3
실시예3	DPEPO	화합물 1-14(25%)	6.2	5.5
비교예1	ADN	화합물 1-1(6%)	4	3.2
비교예2	DPEPO	TBPe(25%)	9	0.4
비교예3	DPEPO	C1(12%)	8.2	2.5
비교예4	DPEPO	C2(6%)	7.3	4.3



[0243]

[0244] 호스트의 최저 삼중항 여기 상태 에너지(T1)는 저온에서의 인광 발광 스펙트럼의 측정, 도펀트의 최저 일중항 여기 상태 에너지(S1)는 실온에서의 형광 발광 스펙트럼의 측정으로 구했다. 각 Energy의 값은 DPEPO(T1 3.6eV), ADN(T1 2.6eV), 화합물 1(S1 3.0eV), TBPe(S1 2.83eV)이었다.

[0245] 표 2를 참고하면, 실시예 1 내지 3은 최대 외부 양자 효율이 5%이상임을 알 수 있다. 이는 n번째 삼중항 여기 상태와 최저 삼중항 여기 상태 사이의 비대각 진동-전자 상호작용 상수(Vn)가 작은 것에 의해, n번째 삼중항 여기 상태에서 열 실활이 일어나기 어렵게 되고, n번째 삼중항 여기 상태에서 인접한 일중항 여기 상태(ex: 최저 일중항 여기 상태)로의 역 향간 교차로 발광하고 있기 때문이다.

[0246] 실시예 1 및 비교예 1을 비교하면, 호스트의 최저 삼중항 여기 에너지 준위가 도펀트의 최저 일중항 여기 에너지 준위보다 높은 것이 바람직함을 알 수 있다. 구체적으로, 비교예 1에서는 화합물 1-1의 최저 일중항 여기 에너지 준위인 3.0eV보다 최저 삼중항 여기 에너지 준위가 낮은(2.6eV)를 호스트를 사용하였고, 최대 외부 양자 효율이 실시예 1에 비해 현저히 낮아짐을 알 수 있다.

[0247] 실시예 1 내지 3에서는 지연발광이 관측되지 않았는 바, 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료는 열 활성 지연 형광 발광 재료가 아님을 알 수 있었다. 또한, 실시예 1 내지 3에서는 transient(과도) 유기 전계 발광 소자 실험에서 지연발광이 관측되지 않았는 바, 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자는 TTA(Triplet-triplet annihilation) 발광 재료도 아님을 알 수 있었다.

[0248] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자는 최대 외부 양자 효율이 5%이상인 형광 발광 소자를 구현할 수 있으며, 동시에 롤-오프 현상을 최소화할 수 있다.

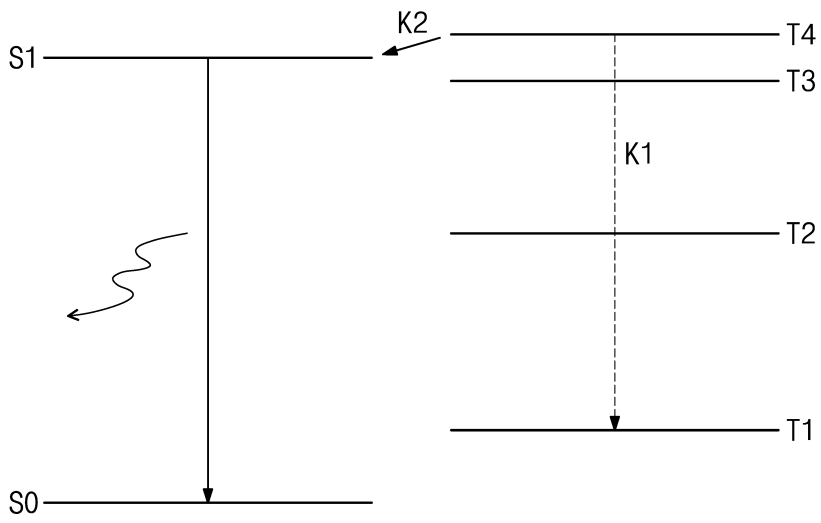
[0249] 이상, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

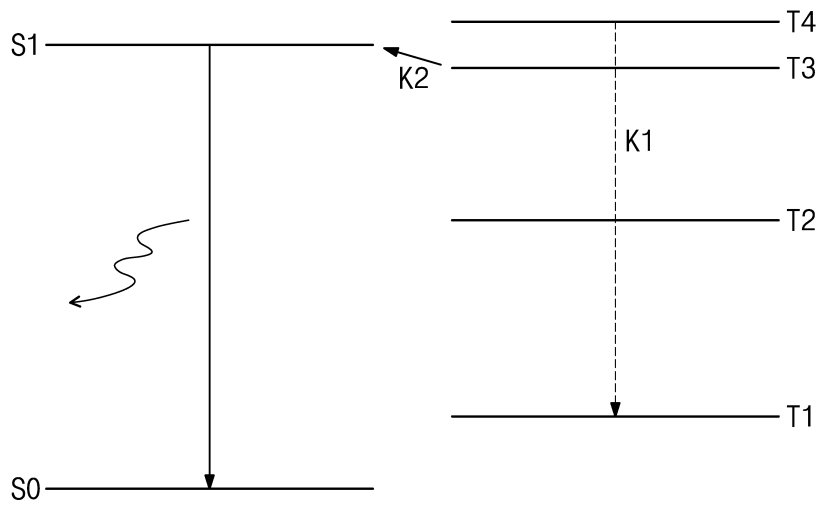
- [0250] 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극
- HTR: 정공 수송 영역 EML: 발광층
- ETR: 전자 수송 영역 EL2: 제2 전극

도면

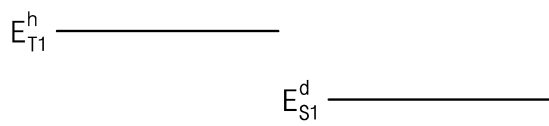
도면1



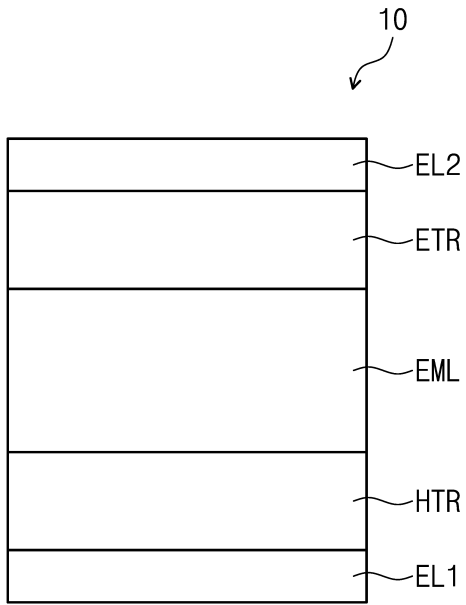
도면2



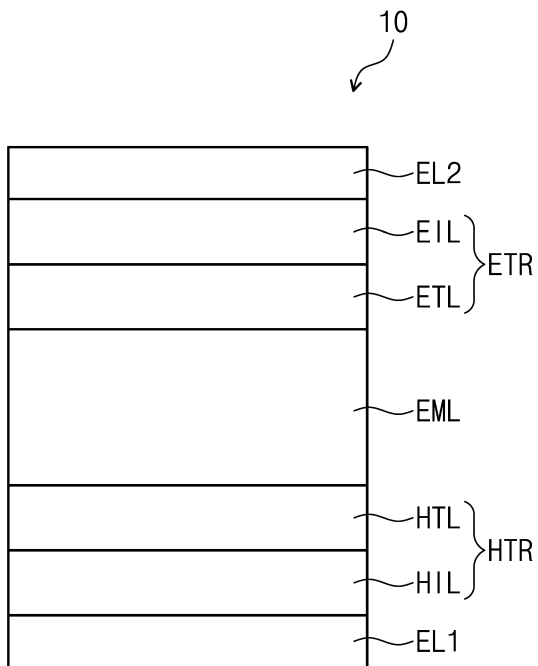
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	发光材料和包括其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020180113659A	公开(公告)日	2018-10-17
申请号	KR1020170044684	申请日	2017-04-06
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	FUCHIWAKI JUNTA 후치와키준타 SATO TOHRU 사토토오루		
发明人	후치와키,준타 사토,토오루		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0072 H01L51/50 C09K2211/1029 C07D209/86 C07D209/88 C07D221/08 C07F7/0814 C07F7/0816 C09K11/025 C09K2211/1007 C09K2211/1014 H01L51/005 H01L51/0054 H01L51/0094 H01L51/5004 H01L51/5012 H01L51/5028 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/5206 H01L51/5221 H01L2251/552		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

发光材料技术领域本发明涉及包含满足下式 (1) 的第一化合物的发光材料。本发明还涉及包含发光材料的有机电致发光器件。[等式1] $K_2 \geq 0$ 。
 $1/K_1$ 在等式1中, K_1 是从第n个三重态激发态到包括最低的三重态激发态的低阶三重态激发态的辐射跃迁速度的总和, 并且 K_2 是第n个三重态激发态。从第n个三重态激发态到相邻的单重态激发态的逆转变速度, 其中n是大于或等于2的整数。

