



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0031651
(43) 공개일자 2016년03월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) *C07D 211/80* (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2014-0121266

(22) 출원일자 2014년09월12일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기 용인시 기흥구 삼성로1(농서동)

(72) 발명자

박일수

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

김슬옹

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95(농서동)

신효섭

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95(농서동)

(74) 대리인

리앤티특허법인

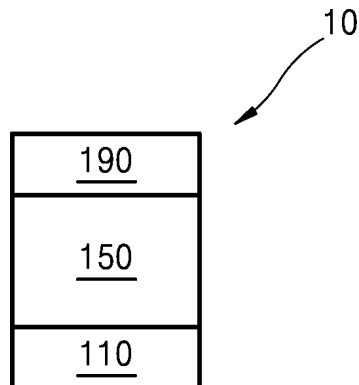
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 유기 발광 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

(57) 요약

유기 발광 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1



명세서

청구범위

청구항 1

하기 식 1을 만족하는 유기 발광 소자용 화합물:

<식 1>

$$E_{S1} < 2E_{T1} < E_{T2}$$

상기 식 1 중,

E_{S1} 은 상기 유기 발광 소자용 화합물의 첫번째 일중항 에너지이고;

E_{T1} 은 상기 유기 발광 소자용 화합물의 첫번째 삼중항 에너지이고;

E_{T2} 는 상기 유기 발광 소자용 화합물의 두번째 삼중항 에너지이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

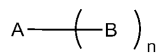
E_{S1} 은 2.7 eV 내지 3.3 eV인, 유기 발광 소자용 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

하기 화학식 1로 표시되는, 유기 발광 소자용 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

A는 n개의 치환 또는 비치환된 C_6-C_{15} 아릴 및 n개의 치환 또는 비치환된 C_1-C_{15} 헤테로아릴 중에서 선택되고;

B는 1개의 치환 또는 비치환된 C_6-C_{15} 아릴 및 1개의 치환 또는 비치환된 C_1-C_{15} 헤테로아릴 중에서 선택되고;

n은 1, 2 및 3 중에서 선택되고;

상기 치환된 C_6-C_{15} 아릴 및 상기 치환된 C_1-C_{15} 헤테로아릴의 적어도 하나의 치환기는,

-F, -Cl, -Br, -I, C_1-C_{10} 알킬기, C_6-C_{15} 아릴기 및 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$;

C_1-C_{10} 알킬기 및 C_6-C_{15} 아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{10} 알킬기 및 C_6-C_{15} 아릴기; 및

C_1-C_{10} 알킬기 및 C_6-C_{15} 아릴기 중 적어도 하나로 치환된, C_6-C_{15} 아릴기 중 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{10} 알킬기 및 C_6-C_{15} 아릴기; 중에서 선택되고;

Q_{11} 내지 Q_{13} 는 서로 독립적으로, 수소, C_1-C_{10} 알킬기 및 C_6-C_{15} 아릴기 중에서 선택된다.

청구항 4

제3항에 있어서,

A의 첫번째 삼중항 에너지(E_{AT1}) 및 B의 첫번째 삼중항 에너지(E_{BT1})은 하기 식 2를 만족하는 유기 발광 소자용 화합물:

<식 2>

$$E_{AT1} < E_{BT1}$$

청구항 5

제4항에 있어서,

A의 두번째 삼중항 에너지(E_{AT2})는 하기 식 3을 더 만족하는, 유기 발광 소자용 화합물:

<식 3>

$$E_{AT2} < E_{BT1}$$

청구항 6

제3항에 있어서,

A는 안트라센인, 유기 발광 소자용 화합물.

청구항 7

제3항에 있어서,

B는 페닐기 및 피리디닐기; 및

-F, 메틸기, tert-부틸기, 페닐기, 메틸기로 치환된 페닐기 및 -Si(CH₃)₃ 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기 및 피리디닐기; 중에서 선택되는, 유기 발광 소자용 화합물.

청구항 8

제3항에 있어서,

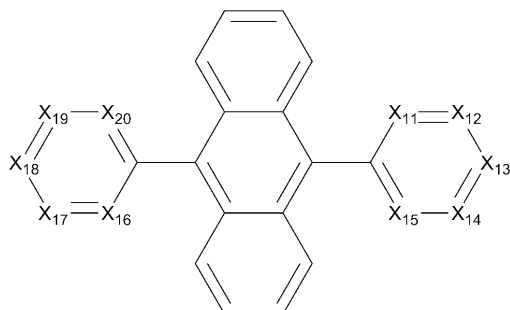
n은 2인, 유기 발광 소자용 화합물.

청구항 9

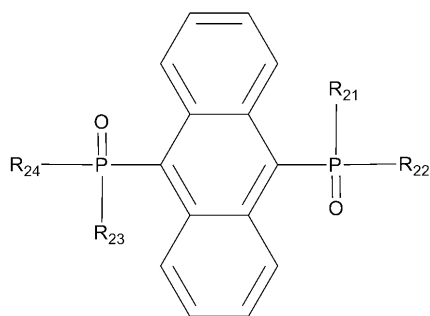
제1항에 있어서,

하기 화학식 1A 및 2A 중 어느 하나로 표시되는, 유기 발광 소자용 화합물:

<화학식 1A>



<화학식 2A>



상기 화학식 1A 및 2A 중,

X_{11} 은 질소 원자(N) 또는 CR_{11} 이고; X_{12} 는 N 또는 CR_{12} 이고, X_{13} 는 N 또는 CR_{13} 이고; X_{14} 는 N 또는 CR_{14} 이고; X_{15} 는 N 또는 CR_{15} 이고; X_{16} 는 N 또는 CR_{16} 이고; X_{17} 은 N 또는 CR_{17} 이고; X_{18} 는 N 또는 CR_{18} 이고, X_{19} 는 N 또는 CR_{19} 이고; X_{20} 는 N 또는 CR_{20} 이고;

R_{11} 내지 R_{20} 는 서로 독립적으로, 수소, -F, -Cl, -Br, -I, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{15} 아릴기 및 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 중에서 선택되고;

R_{21} 내지 R_{24} 는 서로 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 및 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{15} 아릴기 중에서 선택되고;

Q_{11} 내지 Q_{13} 는 서로 독립적으로, 수소, C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_6 - C_{15} 아릴기 중에서 선택되고;

상기 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 및 치환된 C_6 - C_{15} 아릴기의 적어도 하나의 치환기는,

C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_6 - C_{15} 아릴기; 및

C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_6 - C_{15} 아릴기 중 적어도 하나로 치환된, C_6 - C_{15} 아릴기; 중에서 선택된다.

청구항 10

제9항에 있어서,

X_{11} 은 CR_{11} 이고; X_{12} 는 CR_{12} 이고, X_{13} 는 CR_{13} 이고; X_{14} 는 CR_{14} 이고; X_{15} 는 CR_{15} 이고; X_{16} 는 CR_{16} 이고; X_{17} 은 CR_{17} 이고; X_{18} 는 CR_{18} 이고, X_{19} 는 CR_{19} 이고; X_{20} 는 CR_{20} 인, 유기 발광 소자용 화합물.

청구항 11

제9항에 있어서,

X_{11} 은 N이고; X_{12} 는 CR_{12} 이고, X_{13} 는 CR_{13} 이고; X_{14} 는 CR_{14} 이고; X_{15} 는 CR_{15} 이고; X_{16} 는 N이고; X_{17} 은 CR_{17} 이고; X_{18} 는 CR_{18} 이고, X_{19} 는 CR_{19} 이고; X_{20} 는 CR_{20} 인, 유기 발광 소자용 화합물.

청구항 12

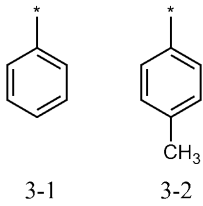
제9항에 있어서,

X_{11} 은 CR_{11} 이고; X_{12} 는 N이고, X_{13} 는 CR_{13} 이고; X_{14} 는 CR_{14} 이고; X_{15} 는 CR_{15} 이고; X_{16} 는 CR_{16} 이고; X_{17} 은 N이고; X_{18} 는 CR_{18} 이고, X_{19} 는 CR_{19} 이고; X_{20} 는 CR_{20} 인, 유기 발광 소자용 화합물.

청구항 13

제9항에 있어서,

R₁₁ 내지 R₂₀는 서로 독립적으로, 수소, -F, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, -Si(CH₃)₃ 및 하기 화학식 3-1 및 3-2 중에서 선택되는, 유기 발광 소자용 화합물:



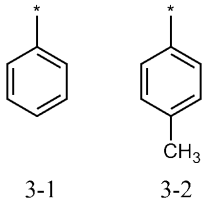
상기 화학식 3-1 및 3-2 중,

*은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 14

제9항에 있어서,

R₂₁ 내지 R₂₄는 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기 및 하기 화학식 3-1 및 3-2 중에서 선택되는, 유기 발광 소자용 화합물:



상기 화학식 3-1 및 3-2 중,

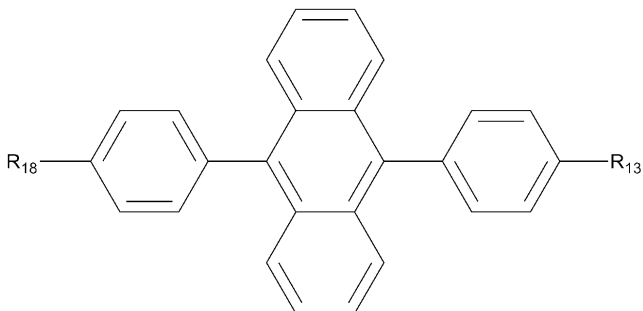
*은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 15

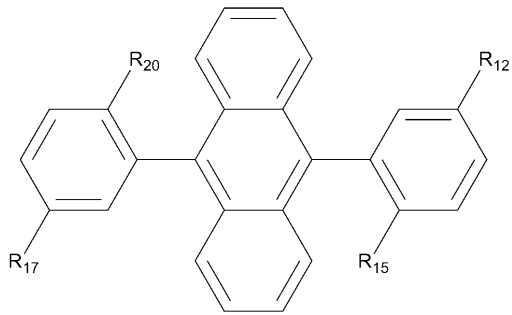
제9항에 있어서,

하기 화학식 1A-1 내지 1A-6 및 2A 중 어느 하나로 표시되는, 유기 발광 소자용 화합물:

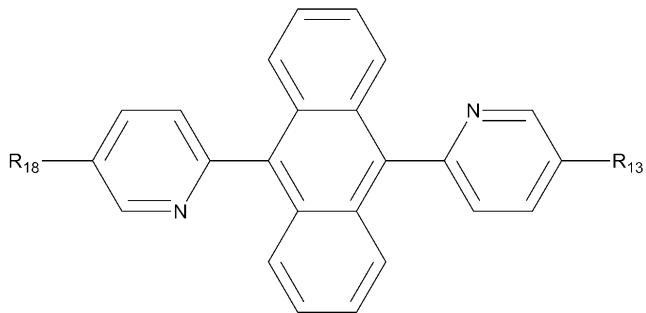
<화학식 1A-1>



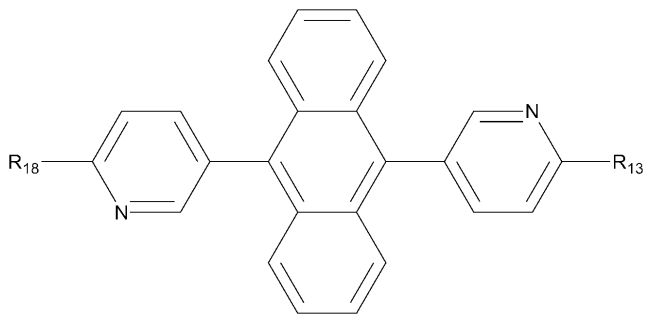
<화학식 1A-2>



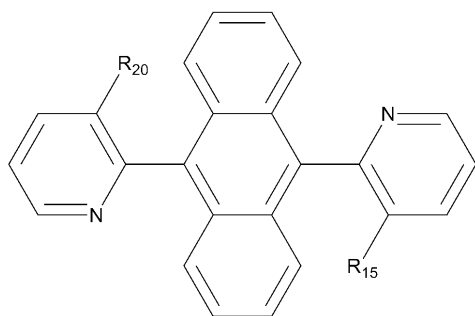
<화학식 1A-3>



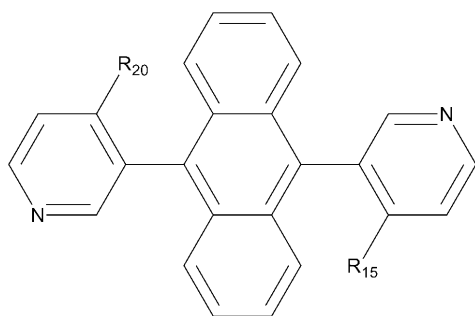
<화학식 1A-4>



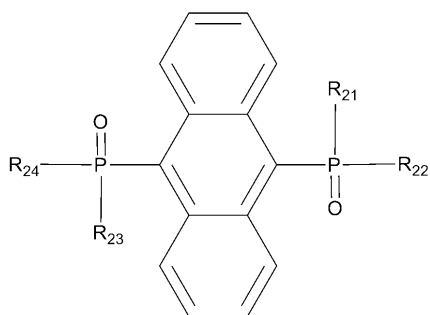
<화학식 1A-5>



<화학식 1A-6>



<화학식 2A>



상기 화학식 1A-1 내지 1A-6 및 2A 중,

R₁₂, R₁₃, R₁₅, R₁₇, R₁₈ 및 R₂₀은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고;

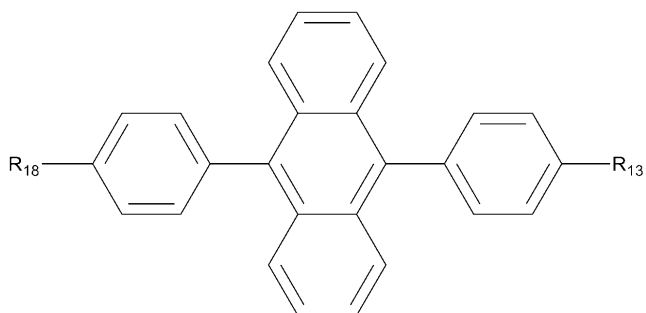
R₂₁ 내지 R₂₄는 상기 화학식 2에서 정의한 바와 같다.

청구항 16

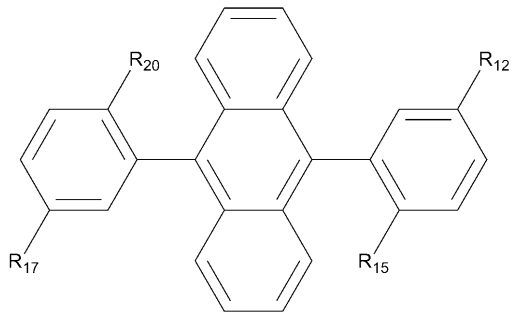
제9항에 있어서,

하기 화학식 1A-1 내지 1A-6 및 2A 중 어느 하나로 표시되는, 유기 발광 소자용 화합물:

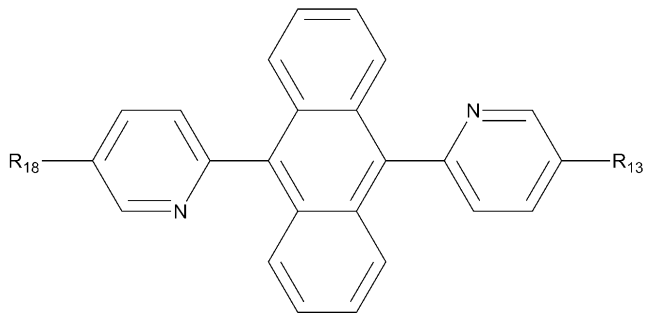
<화학식 1A-1>



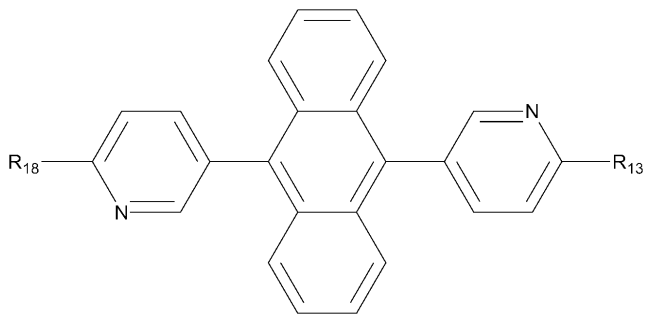
<화학식 1A-2>



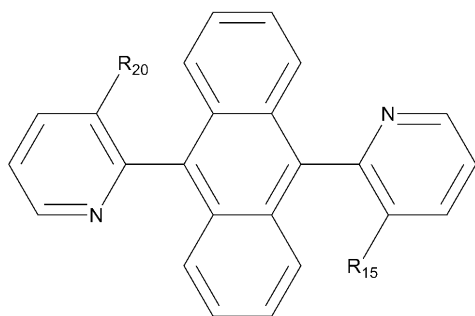
<화학식 1A-3>



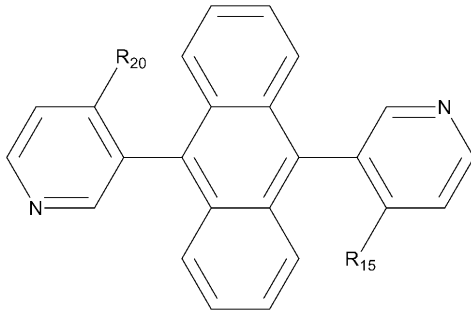
<화학식 1A-4>



<화학식 1A-5>

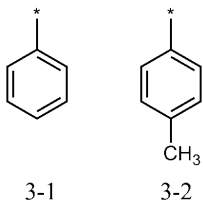


<화학식 1A-6>



상기 화학식 1A-1 내지 1A-6 및 2 중,

R₁₂, R₁₃, R₁₅, R₁₇, R₁₈ 및 R₂₀은 서로 독립적으로, 수소, -F, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, -Si(CH₃)₃ 및 하기 화학식 3-1 및 3-2 중에서 선택되고;



상기 화학식 3-1 및 3-2 중,

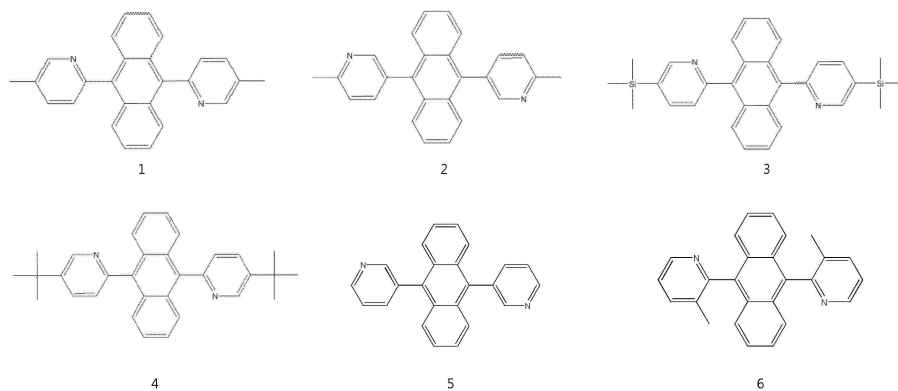
*은 이웃한 원자와의 결합 사이트이고;

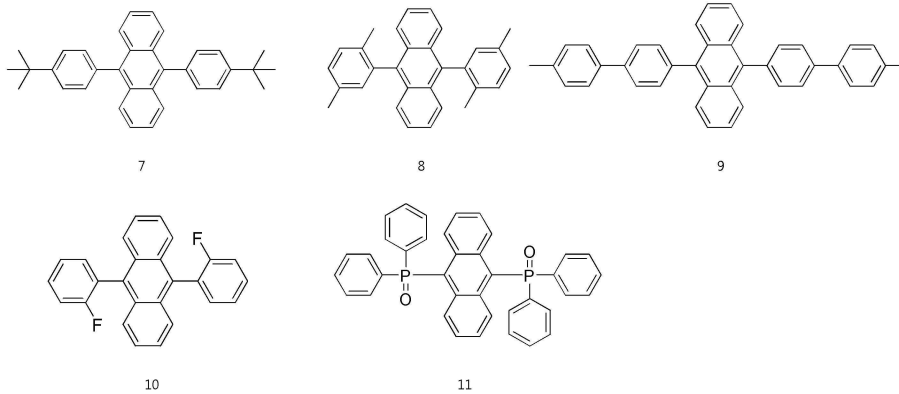
R₂₁ 내지 R₂₄는 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기 및 상기 화학식 3-1 및 3-2 중에서 선택된다.

청구항 17

제9항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 11 중에서 선택되는, 유기 발광 소자:





청구항 18

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 발광층을 포함하는 유기층을 포함하고;
상기 발광층은 제1항 내지 제17항 중 어느 한 항의 유기 발광 소자용 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 19

제18항에 있어서,
상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고;
상기 호스트가 상기 유기 발광 소자용 화합물인, 유기 발광 소자.

청구항 20

제18항에 있어서,
상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고;
상기 도펀트가 상기 유기 발광 소자용 화합물인, 유기 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명의 실시예들은 유기 발광 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light-emitting device)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[0003] 상기 유기 발광 소자는 기판 상부에 제1전극이 배치되어 있고, 상기 제1전극 상부에 정공 수송 영역(hole transport region), 발광층, 전자 수송 영역(electron transport region) 및 제2전극이 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 상기 제1전극으로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 제2전극으로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0004] 본 발명의 실시예들은 유기 발광 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

과제의 해결 수단

- [0005] 본 발명의 일 실시예는, 하기 식 1을 만족하는 유기 발광 소자용 화합물을 개시한다:
- [0006] <식 1>
- [0007] $E_{S1} < 2E_{T1} < E_{T2}$
- [0008] 상기 식 1 중,
- [0009] E_{S1} 은 상기 발광 재료의 첫번째 일중항 에너지이고;
- [0010] E_{T1} 은 상기 발광 재료의 첫번째 삼중항 에너지이고;
- [0011] E_{T2} 는 상기 발광 재료의 두번째 삼중항 에너지이다.
- [0012] 본 발명의 다른 실시예는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 발광층을 포함하는 유기층을 포함하고; 상기 발광층은 상술한 바와 같은 유기 발광 소자용 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 개시한다.

발명의 효과

- [0013] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 발광 소자용 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 고효율 특성을 나타낼 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0014] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.
- 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 발광 소자의 발광 모델을 개략적으로 나타낸 도면이다.
- 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 발광 소자의 Transient EL 분석 결과를 나타낸 도면이다.
- 도 4는 상기 도 3의 결과를 1/(제곱근) 함수에 따라 변환한 결과를 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0015] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다. 본 발명의 효과 및 특징, 그리고 그것들을 달성하는 방법은 도면과 함께 상세하게 후술되어 있는 실시예들을 참조하면 명확해질 것이다. 그러나 본 발명은 이하에서 개시되는 실시예들에 한정되는 것이 아니라 다양한 형태로 구현될 수 있다.
- [0016] 이하, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시예들을 상세히 설명하기로 하며, 도면을 참조하여 설명할 때 동일하거나 대응하는 구성 요소는 동일한 도면부호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다.
- [0017] 이하의 실시예에서, 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0018] 이하의 실시예에서, 포함하다 또는 가지다 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 또는 구성요소가 존재함을 의미하는 것이고, 하나 이상의 다른 특징들 또는 구성요소가 부가될 가능성을 미리 배제하는 것은 아니다.
- [0019] 이하의 실시예에서, 막, 영역, 구성 요소 등의 부분이 다른 부분 위에 또는 상에 있다고 할 때, 다른 부분의 바로 위에 있는 경우뿐만 아니라, 그 중간에 다른 막, 영역, 구성 요소 등이 개재되어 있는 경우도 포함한다.
- [0020] 도면에서는 설명의 편의를 위하여 구성 요소들이 그 크기가 과장 또는 축소될 수 있다. 예컨대, 도면에서 나타난 각 구성의 크기 및 두께는 설명의 편의를 위해 임의로 나타내었으므로, 본 발명이 반드시 도시된 바에 한정되지 않는다.
- [0021] 본 명세서 중 "(유기층이) 제1재료 중에서 선택되는 1종 이상을 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 제1재료 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 제1재료를 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0022] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든

층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.

상기 유기 발광 소자용 화합물은 하기 식 1을 만족한다:

<식 1>

$$E_{S1} < 2E_{T1} < E_{T2}$$

상기 식 1 중,

E_{S1} 은 상기 유기 발광 소자용 화합물의 첫번째 일중항 에너지이고;

E_{T1} 은 상기 유기 발광 소자용 화합물의 첫번째 삼중항 에너지이고;

E_{T2} 는 상기 유기 발광 소자용 화합물의 두번째 삼중항 에너지이다.

상기 유기 발광 소자용 화합물이 상기 식 1을 만족하는 경우, 전자가 삼중항 상태에서 일중항 상태로 여기될 때, 두번째 삼중항 상태로 에너지 전이가 일어나지 않기 때문에, 에너지 손실이 발생하지 않을 수 있다. 따라서, 상기 유기 발광 소자용 화합물이 상기 식 1을 만족하는 경우, 여기되는 삼중항이 모두 일중항으로 변할 수 있다(도 2 참조). 따라서, 상기 유기 발광 소자용 화합물을 포함하는 유기 발광 소자의 내부 양자 효율은 최대 62.5%가 될 수 있다.

예를 들어, 상기 유기 발광 소자용 화합물은 하기 식 1을 만족할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

<식 1-1>

$$E_{T1} < E_{S1} < 2E_{T1} < E_{T2} < E_{Q1}$$

상기 식 1-1 중,

E_{S1} 은 상기 유기 발광 소자용 화합물의 첫번째 일중항 에너지이고;

E_{T1} 은 상기 유기 발광 소자용 화합물의 첫번째 삼중항 에너지이고;

E_{T2} 는 상기 유기 발광 소자용 화합물의 두번째 삼중항 에너지이다.

E_{Q1} 은 상기 유기 발광 소자용 화합물의 첫번째 오중항 에너지이다.

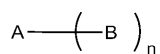
예를 들어, 상기 식 1 중, E_{S1} 은 2.7 eV 내지 3.3 eV일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. E_{S1} 이 상기 범위를 만족하는 경우, 상기 유기 발광 소자용 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 청색, 구체적으로, 청색 형광을 방출할 수 있다.

예를 들어, 상기 식 1 중, E_{T1} 은 1.3 eV 내지 1.7 eV일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

예를 들어, 상기 식 1 중, E_{T2} 는 2.8 eV 내지 3.5 eV일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

예를 들어, 상기 유기 발광 소자용 화합물은 하기 화학식 1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

A는 n개의 치환 또는 비치환된 C_6-C_{15} 아릴 및 n개의 치환 또는 비치환된 C_1-C_{15} 헤테로아릴 중에서 선택되고;

B는 1개의 치환 또는 비치환된 C_6-C_{15} 아릴 및 1개의 치환 또는 비치환된 C_1-C_{15} 헤테로아릴 중에서 선택되고;

n은 1, 2 및 3 중에서 선택되고;

상기 치환된 C_6-C_{15} 아릴 및 상기 치환된 C_1-C_{15} 헤테로아릴의 적어도 하나의 치환기는,

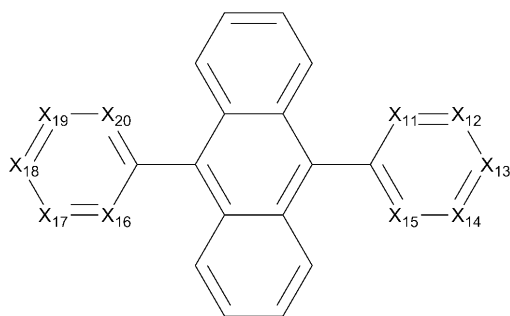
- [0050] -F, -Cl, -Br, -I, C₁-C₁₀알킬기, C₆-C₁₅아릴기 및 -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃);
- [0051] C₁-C₁₀알킬기 및 C₆-C₁₅아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₁-C₁₀알킬기 및 C₆-C₁₅아릴기; 및
- [0052] C₁-C₁₀알킬기 및 C₆-C₁₅아릴기 중 적어도 하나로 치환된, C₆-C₁₅아릴기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₁₀알킬기 및 C₆-C₁₅아릴기; 중에서 선택되고;
- [0053] Q₁₁ 내지 Q₁₃는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₁₀알킬기 및 C₆-C₁₅아릴기 중에서 선택된다.
- [0054] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, A의 첫번째 일중항 에너지(E_{AS1}) 및 B의 첫번째 일중항 에너지(E_{BS1})은 서로 독립적으로, 2.7 eV 내지 3.3 eV일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0055] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, A의 첫번째 삼중항 에너지(E_{AT1}) 및 B의 첫번째 삼중항 에너지(E_{BT1})은 하기 식 2를 만족할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0056] <식 2>
- [0057] $E_{AT1} < E_{BT1}$
- [0058] 상기 유기 발광 소자용 화합물의 E_{T1} 및 E_{T2}는 E_{AT1} 및 E_{BT1}에 의하여 결정될 수 있다.
- [0059] 다른 예로서, 상기 화학식 1 중, A의 첫 번째 삼중항 에너지(E_{AT1}) 및 B의 첫 번째 삼중항 에너지(E_{BT1}) 및 A의 두 번째 삼중항 에너지(E_{AT2})는 하기 식 3을 더 만족할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0060] <식 3>
- [0061] $E_{AT2} < E_{BT1}$
- [0062] 상기 유기 발광 소자용 화합물의 E_{T1} 및 E_{T2}는 E_{AT1}, E_{AT2} 및 E_{BT1}에 의하여 결정될 수 있다.
- [0063] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, A는 안트라센일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0064] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, B는 페닐기 및 피리디닐기; 및
- [0065] -F, 메틸기, tert-부틸기, 페닐기, 메틸기로 치환된 페닐기 및 -Si(CH₃)₃ 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기 및 피리디닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0066] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, n은 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0067] Gaussian 09'을 이용하여 B3LYP/6-31G base set을 이용하여, 안트라센, 페닐, 피리딘 및 비페닐에 대한 E_{S1}, E_{T1} 및 E_{T2}을 계산한 결과, 하기 표 1과 같은 결과를 얻을 수 있었다:

표 1

	E _{S1} (eV)	E _{T1} (eV)	E _{T2} (eV)
안트라센	3.22	1.74	3.26
페닐	5.21	3.79	4.78
피리딘	5.09	3.91	4.14
비페닐(biphenyl)	4.51	3.32	3.91

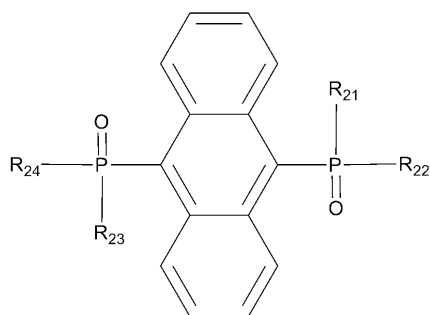
- [0069] 그러므로, 안트라센은 낮은 첫번째 삼중항 에너지 레벨을 가지므로, 선택할 수 있는 치환기의 폭이 매우 넓을 수 있다. 뿐만 아니라, 안트라센을 코어로 갖는 도펀트는 청색 발광에 유리할 수 있다.
- [0070] 페닐, 피리딘, 비페닐 등은 화학적, 물리적 안정성이 높을 뿐만 아니라, 가격이 낮으므로 치환기로 페닐, 피리딘, 비페닐 등이 도입되면 화합물의 화학적, 물리적 안정성이 높고, 가격 경쟁력이 높아질 수 있다.
- [0071] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자용 화합물은 하기 화학식 1A 및 2A 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0072] <화학식 1A>



[0073]

[0074] <화학식 2A>



[0075]

[0076] 상기 화학식 1A 및 2A 중,

[0077] X_{11} 은 질소 원자(N) 또는 CR_{11} 이고; X_{12} 는 N 또는 CR_{12} 이고, X_{13} 는 N 또는 CR_{13} 이고; X_{14} 는 N 또는 CR_{14} 이고; X_{15} 는 N 또는 CR_{15} 이고; X_{16} 는 N 또는 CR_{16} 이고; X_{17} 은 N 또는 CR_{17} 이고; X_{18} 는 N 또는 CR_{18} 이고, X_{19} 는 N 또는 CR_{19} 이고; X_{20} 는 N 또는 CR_{20} 이고;

[0078] R_{21} 내지 R_{20} 는 서로 독립적으로, 수소, -F, -Cl, -Br, -I, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{15} 아릴기 및 -Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13}) 중에서 선택되고;

[0079] R_{21} 내지 R_{20} 는 서로 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 및 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{15} 아릴기 중에서 선택되고;

[0080] Q_{11} 내지 Q_{13} 는 서로 독립적으로, 수소, C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_6 - C_{15} 아릴기 중에서 선택되고;

[0081] 상기 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 및 치환된 C_6 - C_{15} 아릴기의 적어도 하나의 치환기는,

[0082] C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_6 - C_{15} 아릴기; 및

[0083] C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_6 - C_{15} 아릴기 중 적어도 하나로 치환된, C_6 - C_{15} 아릴기; 중에서 선택된다.

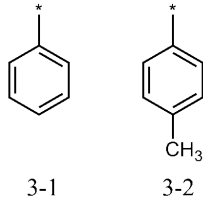
[0084] 예를 들어, 상기 화학식 1A 중, X_{11} 은 CR_{11} 이고; X_{12} 는 CR_{12} 이고, X_{13} 는 CR_{13} 이고; X_{14} 는 CR_{14} 이고; X_{15} 는 CR_{15} 이고; X_{16} 는 CR_{16} 이고; X_{17} 은 CR_{17} 이고; X_{18} 는 CR_{18} 이고, X_{19} 는 CR_{19} 이고; X_{20} 는 CR_{20} 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0085] 다른 예로서, 상기 화학식 1A 중, X_{11} 은 N이고; X_{12} 는 CR_{12} 이고, X_{13} 는 CR_{13} 이고; X_{14} 는 CR_{14} 이고; X_{15} 는 CR_{15} 이고; X_{16} 는 N이고; X_{17} 은 CR_{17} 이고; X_{18} 는 CR_{18} 이고, X_{19} 는 CR_{19} 이고; X_{20} 는 CR_{20} 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0086] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1A 중, X_{11} 은 CR_{11} 이고; X_{12} 는 N이고, X_{13} 는 CR_{13} 이고; X_{14} 는 CR_{14} 이고; X_{15} 는 CR_{15} 이고; X_{16} 는 CR_{16} 이고; X_{17} 은 N이고; X_{18} 는 CR_{18} 이고, X_{19} 는 CR_{19} 이고; X_{20} 는 CR_{20} 일 수 있으나, 이에 한정되는 것

은 아니다.

[0087] 예를 들어, 상기 화학식 1A 중, R_{11} 내지 R_{20} 는 서로 독립적으로, 수소, -F, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, $-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ 및 하기 화학식 3-1 및 3-2 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0088]

[0089]

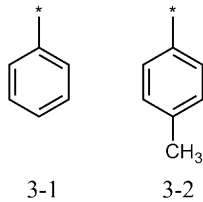
상기 화학식 3-1 및 3-2 중,

[0090]

*은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0091]

또 다른 예로서, 상기 화학식 1A 중, R_{21} 내지 R_{24} 는 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기 및 하기 화학식 3-1 및 3-2 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0092]

[0093]

상기 화학식 3-1 및 3-2 중,

[0094]

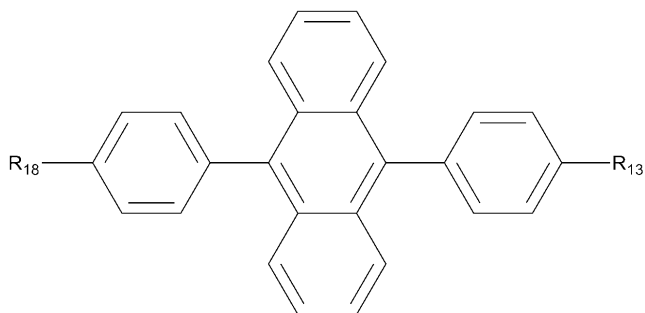
*은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0095]

예를 들어, 상기 유기 발광 소자용 화합물은 하기 화학식 1A-1 내지 1A-6 및 2A 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0096]

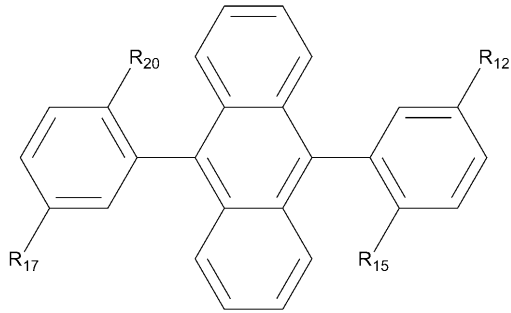
<화학식 1A-1>



[0097]

[0098]

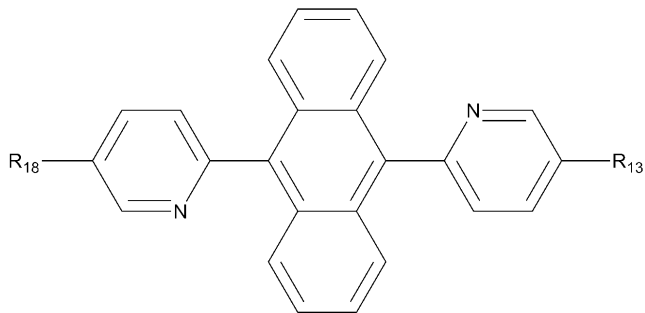
<화학식 1A-2>



[0099]

[0100]

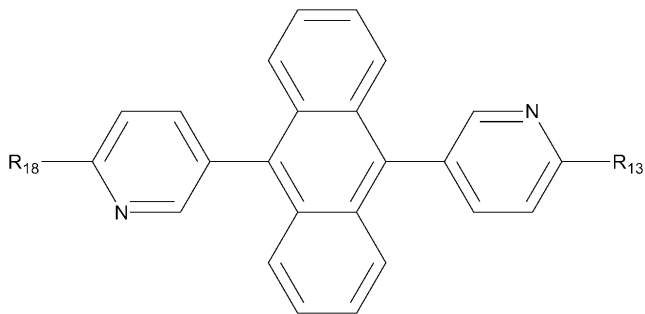
<화학식 1A-3>



[0101]

[0102]

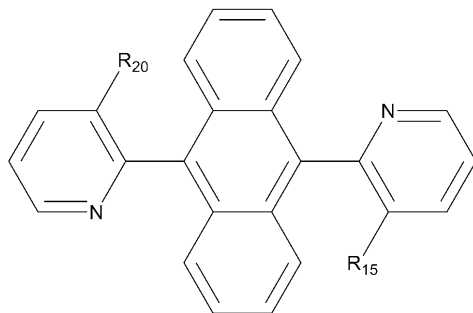
<화학식 1A-4>



[0103]

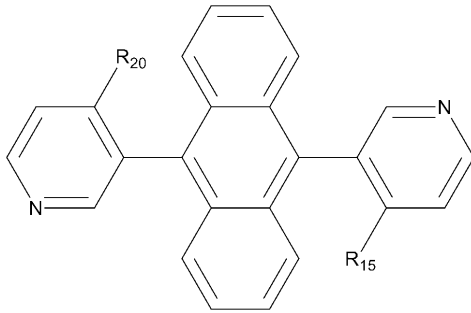
[0104]

<화학식 1A-5>



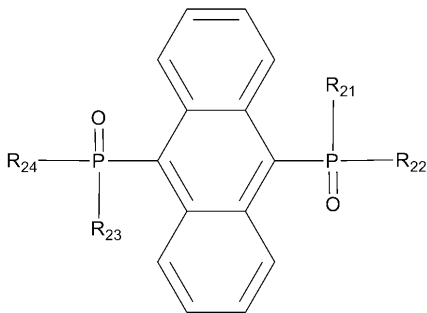
[0105]

[0106] <화학식 1A-6>



[0107]

[0108] <화학식 2A>



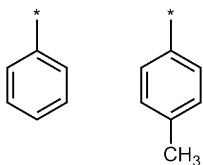
[0109]

[0110] 상기 화학식 1A-1 내지 1A-6 및 2A 중,

[0111] R_{12} , R_{13} , R_{15} , R_{17} , R_{18} 및 R_{20} 은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고;

[0112] R_{21} 내지 R_{24} 는 상기 화학식 2에서 정의한 바와 같다.

[0113] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1A-1 내지 1A-6 및 2A 중, R_{12} , R_{13} , R_{15} , R_{17} , R_{18} 및 R_{20} 은 서로 독립적으로, 수소, -F, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, $-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ 및 하기 화학식 3-1 및 3-2 중에서 선택되고;



3-1

3-2

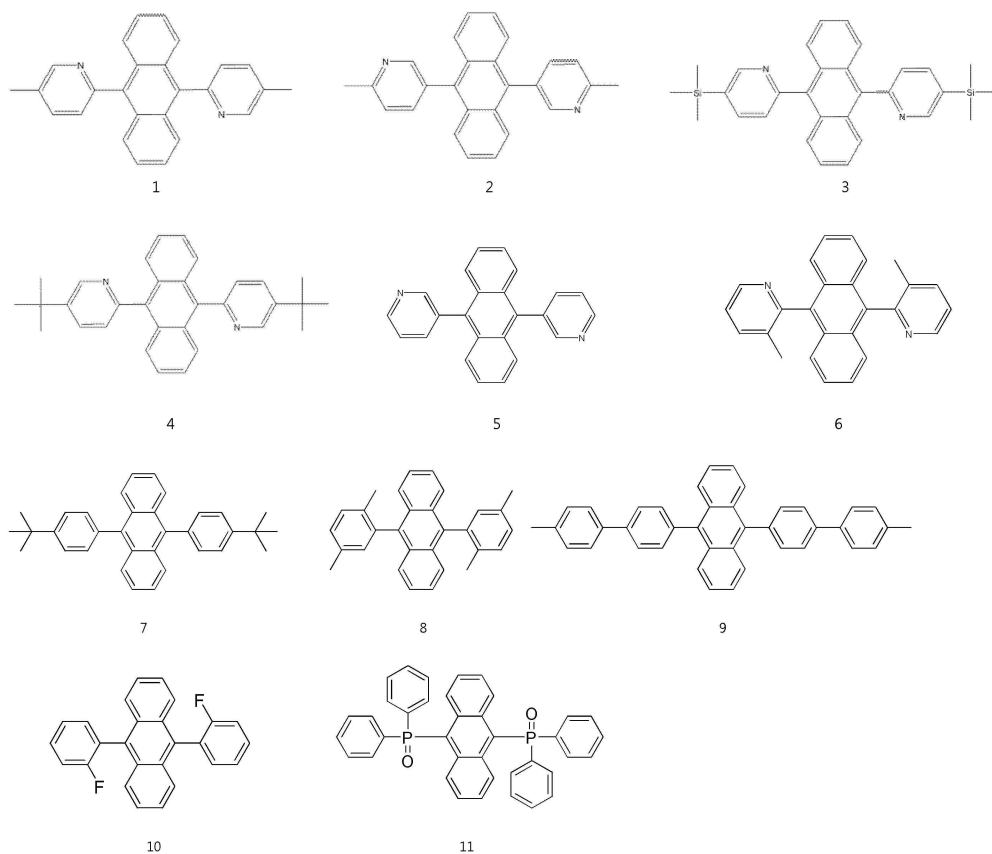
[0114]

[0115] 상기 화학식 3-1 및 3-2 중,

[0116] *은 이웃한 원자와의 결합 사이트이고;

[0117] R_{21} 내지 R_{24} 는 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기 및 상기 화학식 3-1 및 3-2 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0118] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자용 화합물은 하기 화합물 1 내지 11 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



Gaussian 09'을 이용하여 B3LYP/6-31G base set을 이용하여, 화합물 1 내지 11 및 ADN에 대한 E_{S1} , E_{T1} 및 E_{T2} 을 계산한 결과, 하기 표 2와 같은 결과를 얻을 수 있었다:

표 2

	$E_{S1}(eV)$	$E_{T1}(eV)$	$E_{T2}(eV)$
1	3.10	1.68	3.43
2	3.10	1.68	3.43
3	3.10	1.68	3.44
4	3.10	1.68	3.43
5	3.10	1.67	3.43
6	3.12	1.67	3.43
7	3.11	1.69	3.45
8	3.11	1.68	3.45
9	3.11	1.68	3.45
10	3.12	1.67	3.44
11	2.75	1.46	2.99
ADN	3.38	1.68	2.67

상기 식 1을 만족하는 유기 발광 소자용 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다.

상기 유기 발광 소자용 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자용 화합물은 발광층에 포함될 수 있다. 따라서, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층을 포함하되, 상기 유기층은 상술한 바와 같은 유기 발광 소자용 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

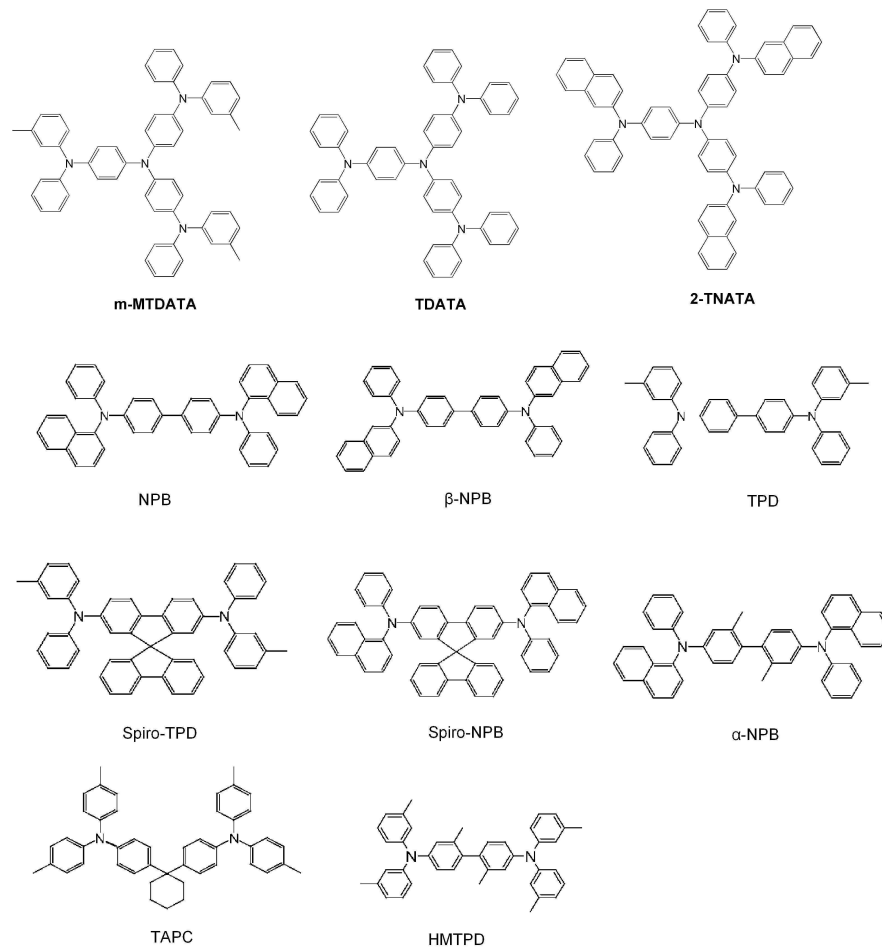
본 명세서 중 "(유기층이) 유기 발광 소자용 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 식 1을 만족하는 1종의 유기 발광 소자용 화합물 또는 상기 식 1을 만족하는 서로 다른 2종 이상의 유기 발광 소자용 화합물

을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

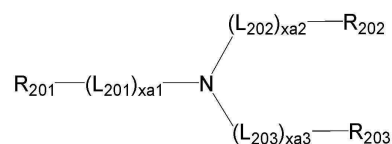
- [0126] 상기 유기층은, i) 상기 제1전극(애노드)과 상기 발광층 사이에 개재되며, 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함한, 정공 수송 영역을 포함하고, ii) 상기 발광층과 상기 제2전극(캐소드) 사이에 개재되며, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한, 전자 수송 영역을 포함할 수 있다.
- [0127] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 유기 발광 소자(10)은 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)을 포함한다.
- [0128] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0129] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판은 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0130] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공 함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질로서, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 중 적어도 하나를 선택할 수 있다.
- [0131] 상기 제1전극(110)은 단일층 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0132] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.
- [0133] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되는 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되는 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.
- [0134] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있고, 상기 전자 수송 영역은 정공 저지층(HBL), 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0135] 상기 정공 수송 영역은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0136] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1전극(110)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/버퍼층, 정공 주입층/버퍼층, 정공 수송층/버퍼층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0137] 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 상기 제1전극(110) 상부에 상기 정공 주입층을 형성할 수 있다.
- [0138] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성할 경우, 증착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500℃의 증착 온도, 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 증착하고자 하는 정공 주입층용 화합물 및 형성하고자 하는 정공 주입층 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0139] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성할 경우, 코팅 조건은 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도 및 약 80℃ 내지 200℃의 열처리 온도 범위 내에서, 증착하고자 하는 정공 주입층용 화합물 및 형성하고자 하는 정공 주입층 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0140] 상기 정공 수송 영역이 정공 수송층을 포함할 경우, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-

Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 제1전극(110) 상부 또는 정공 주입층 상부에 상기 정공 수송층을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층을 형성할 경우, 정공 수송층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.

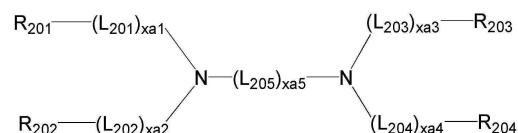
상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β -NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, α -NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸릴)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄퍼술포산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



<화학식 201>



<화학식 202>

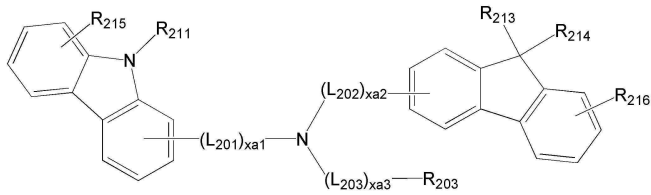


- [0148] 상기 화학식 201 및 202 중,
- [0149] L_{201} 내지 L_{205} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group) 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group) 중에서 선택되고;
- [0150] xa_1 내지 xa_4 는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고;
- [0151] xa_5 는 1, 2, 3, 4 및 5 중에서 선택되고;
- [0152] R_{201} 내지 R_{204} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹일 수 있다.
- [0153] 예를 들어, 상기 화학식 201 및 202 중,
- [0154] L_{201} 내지 L_{205} 는 서로 독립적으로, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 카바졸일렌기 및 트리아지닐렌기; 및
- [0155] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 카바졸일렌기 및 트리아지닐렌기; 중에서 선택되고;
- [0156] xa_1 내지 xa_4 는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고;
- [0157] xa_5 는 1, 2 또는 3이고;
- [0158] R_{201} 내지 R_{204} 는 서로 독립적으로,
- [0159] 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및
- [0160] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 아졸레닐기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한

정되는 것은 아니다.

[0161] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:

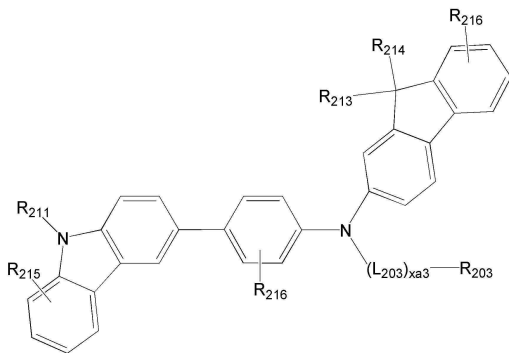
[0162] <화학식 201A>



[0163]

[0164] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

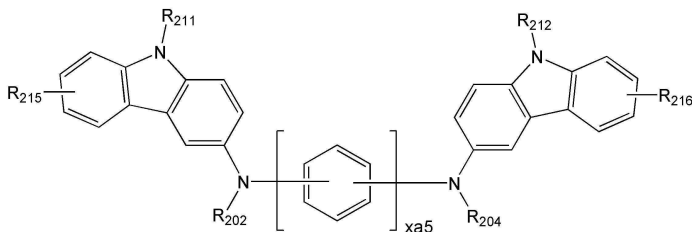
[0165] <화학식 201A-1>



[0166]

[0167] 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0168] <화학식 202A>



[0169]

[0170] 상기 화학식 201A, 201A-1 및 202A 중 L_{201} 내지 L_{203} , $xa1$ 내지 $xa3$, $xa5$ 및 R_{202} 내지 R_{204} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고, R_{211} 은 R_{203} 에 대한 설명을 참조하고, R_{213} 내지 R_{216} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_2 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, C_2 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴기옥시기, C_6 - C_{60} 아릴기티오기, C_2 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹일 수 있다.

[0171] 예를 들어, 상기 화학식 201A, 201A-1 및 202A 중,

[0172] L_{201} 내지 L_{203} 은 서로 독립적으로, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 카바졸일렌기 및 트리아지닐렌기; 및

[0173] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기,

카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 카바졸일렌기 및 트리아지닐렌기; 중에서 선택되고;

[0174] xa1 내지 xa3은 서로 독립적으로, 0 또는 1이고;

[0175] R₂₀₃, R₂₁₁ 및 R₂₁₂는 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및

[0176] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택되고;

[0177] R₂₁₃ 및 R₂₁₄는 서로 독립적으로, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;

[0178] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0179] 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및

[0180] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택되고;

[0181] R₂₁₅ 및 R₂₁₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0182] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세

닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0183]

페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기 및 트리아지닐기; 및

[0184]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택되고;

[0185]

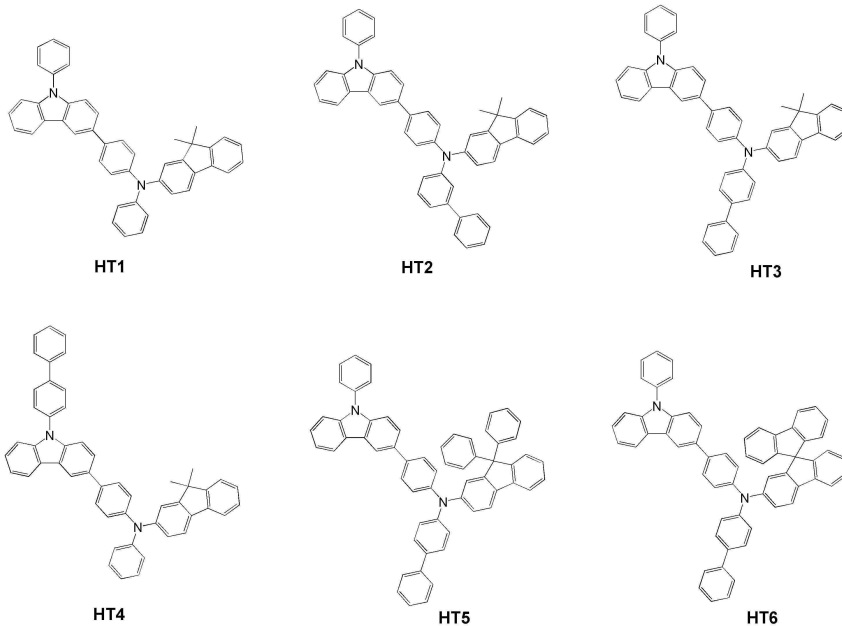
xa5는 1 또는 2이다.

[0186]

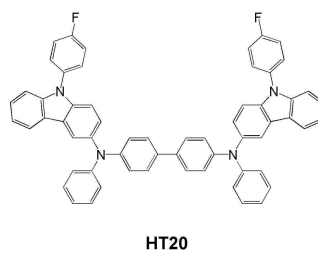
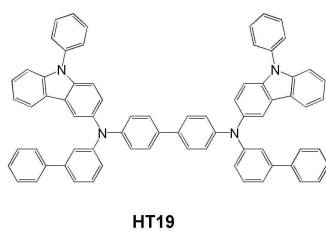
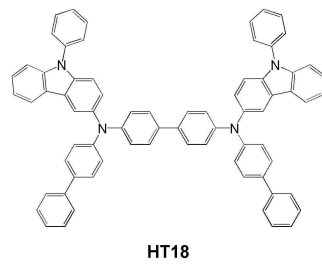
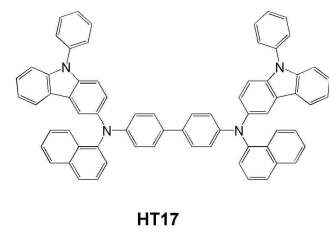
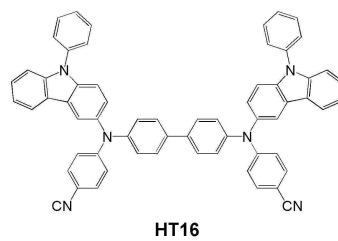
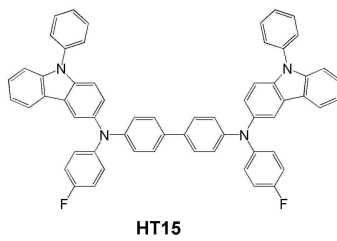
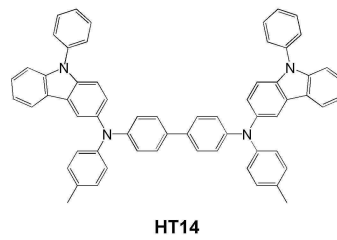
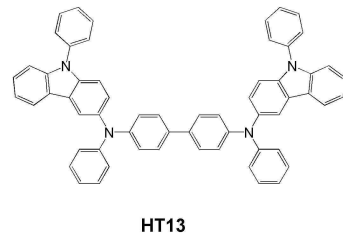
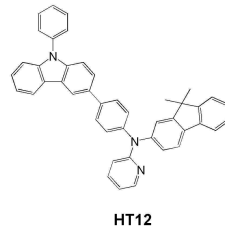
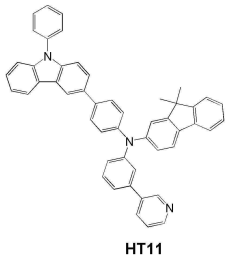
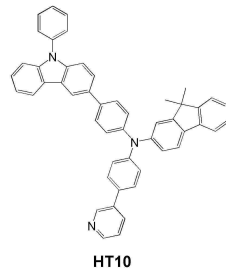
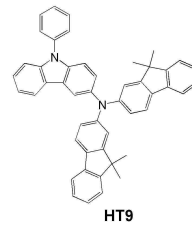
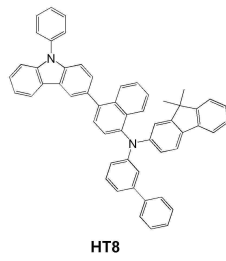
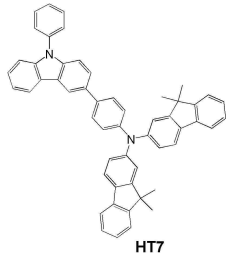
상기 화학식 201A 및 201A-1 중 R₂₁₃ 및 R₂₁₄는 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0187]

상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0188]

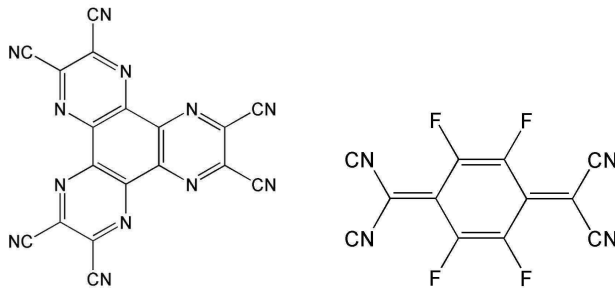


[0192] 상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층을 모두 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0193] 상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 전하-생성 물질은 상기 정공 수송 영역 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

[0194] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라시아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 HT-D1 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0195] <화합물 HT-D1> <F4-TCNQ>



[0196]

[0197] 상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 정공 주입층 및 정공 수송층 외에, 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시키는 역할을 할 수 있다. 상기 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층은 전자 수송 영역으로부터의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

[0198] 상기 제1전극(110) 상부 또는 정공 수송 영역 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 발광층을 형성한다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층을 형성할 경우, 발광층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.

[0199] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층이 적층된 구조를 갖거나, 적색광 발출 물질, 녹색광 발출 물질 및 청색광 발출 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

[0200] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 호스트 및 상기 도펀트 중 적어도 하나는 상기 식 1을 만족하는 유기 발광 소자용 화합물일 수 있다.

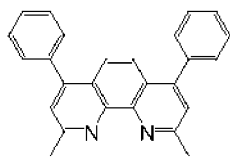
[0201] 상기 발광층은 제1호스트, 제2호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 제1호스트 및 상기 도펀트 중 적어도 하나는 상기 식 1을 만족하는 유기 발광 소자용 화합물일 수 있다.

[0202] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 상기 호스트 대 상기 도펀트의 중량비는 50:50 내지 99:1, 예를 들어, 85:15 내지 98:2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

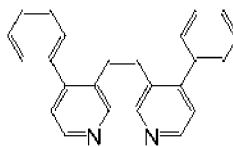
[0203] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0204] 다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치될 수 있다.

- [0205] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0206] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적층된 전자 수송층/전자 주입층 또는 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0207] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 유기층(150)은 발광층과 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역을 포함하고, 상기 전자 수송 영역에, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중 적어도 하나가 존재할 수 있다.
- [0208] 상기 전자 수송 영역은 정공 저지층을 포함할 수 있다. 상기 정공 저지층은, 발광층이 인광 도펀트를 사용할 경우, 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 형성할 수 있다.
- [0209] 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 상기 발광층 상부에 상기 정공 저지층을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 정공 저지층을 형성할 경우, 정공 저지층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.
- [0210] 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP 및 Bphen 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



BCP



Bphen

- [0211]
- [0212] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.
- [0213] 상기 전자 수송 영역은 전자 수송층을 포함할 수 있다. 상기 전자 수송층은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 상기 발광층 상부 또는 정공 저지층 상부에 형성될 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 전자 수송층을 형성할 경우, 전자 수송층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.
- [0214] 한편, 상기 전자 수송층은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 602로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0215] <화학식 601>
- [0216]
$$\text{Ar}_{601}-[(\text{L}_{601})_{\text{xe}1}-\text{E}_{601}]_{\text{xe}2}$$
- [0217] 상기 화학식 601 중, Ar_{601} 은 나프탈렌(naphthalene), 헵탈렌(heptalene), 플루오렌(fluorene), 스파이로-플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 페날렌(phenalene), 페난트렌(phenanthrene), 안트라센(anthracene), 플루오란텐(fluoranthene), 트리페닐렌(triphenylene), 파이렌(pyrene), 크라이센(chrysene), 나프타센(naphthacene), 피센(picene), 페릴렌(perylene), 펜타펜(pentaphene) 및 인데노안트라센(indenoanthracene); 및
- [0218] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_3 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, C_3 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, C_2 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1

가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 및 $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$ (상기 Q_{301} 내지 Q_{303} 은 서로 독립적으로, 수소, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기 또는 C_2 - C_{60} 헤테로아릴기임) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌, 헵탈렌, 플루오렌, 스파이로-플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 페날렌, 페난트렌, 안트라센, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 나프타센, 피센, 페릴렌, 펜타펜 및 인데노안트라센; 중에서 선택되고;

[0219] L_{601} 에 대한 설명은 본 명세서 중 L_{201} 에 대한 설명을 참조하고;

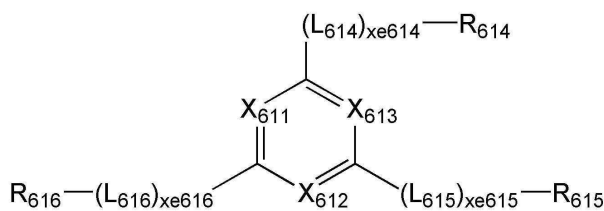
[0220] E_{601} 은, 피롤일기(pyrrolyl), 티오펜일기(thiophenyl), 퓨라닐기(furanyl), 이미다졸일기(imidazolyl), 피라졸일기(pyrazolyl), 티아졸일기(thiazolyl), 이소티아졸일기(isothiazolyl), 옥사졸일기(oxazolyl), 이속사졸일기(isooxazolyl), 피리딘일기(pyridinyl), 피라지닐기(pyrazinyl), 피리미딘일기(pyrimidinyl), 피리다지닐기(pyridazinyl), 이소인돌일기(isoindolyl), 인돌일기(indolyl), 인다졸일기(indazolyl), 푸리닐기(purinyl), 퀴놀리닐기(quinolinyl), 이소퀴놀리닐기(isoquinolinyl), 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 프탈라지닐기(phthalazinyl), 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐기(quinoxaliny), 퀴나졸리닐기(quinazolinyl), 시놀리닐기(cinnolinyl), 카바졸일기(carbazolyl), 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 아크리디닐기(acridinyl), 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 페나지닐기(phenazinyl), 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 벤조퓨라닐기(benzofuranyl), 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 이소벤조티아졸일기(isobenzothiazolyl), 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 이소벤조옥사졸일기(isobenzooxazolyl), 트리아졸일기(triazolyl), 테트라졸일기(tetrazolyl), 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 트리아지닐기(triazinyl), 디벤조퓨라닐기(dibenzofuranyl), 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl), 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0221] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 펜탈렌일기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄렌일기, 헵탈렌일기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날렌일기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이렌일기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 중에서 선택되고;

[0222] $xe1$ 은 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고;

[0223] $xe2$ 는 1, 2, 3 및 4 중에서 선택된다.

[0224] <화학식 602>



[0225] [0226] 상기 화학식 602 중,

[0227] X_{611} 은 N 또는 $C-(L_{611})_{xe611}-R_{611}$ 이고, X_{612} 는 N 또는 $C-(L_{612})_{xe612}-R_{612}$ 이고, X_{613} 은 N 또는 $C-(L_{613})_{xe613}-R_{613}$ 이고, X_{611} 내지 X_{613} 중 적어도 하나는 N이고;

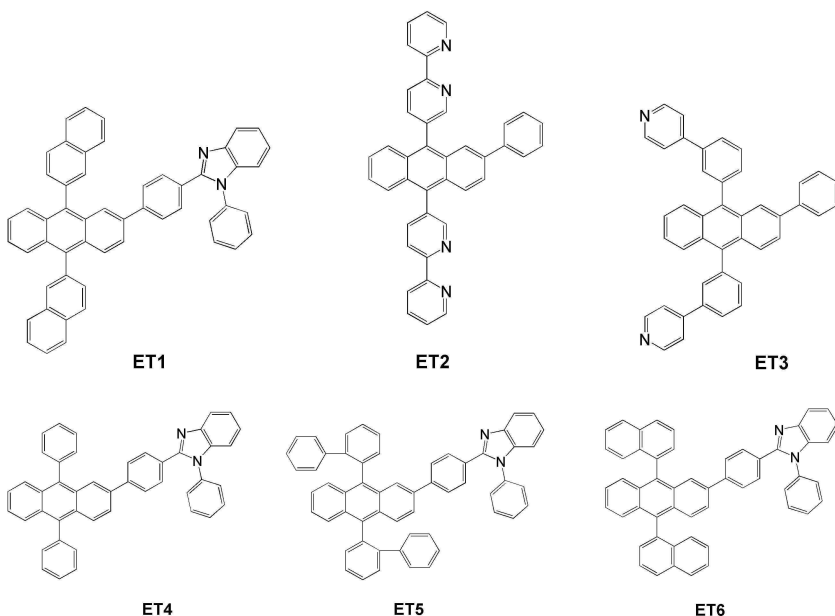
[0228] L_{611} 내지 L_{616} 각각에 대한 설명은 본 명세서 중 L_{201} 에 대한 설명을 참조하고;

[0229] R_{611} 내지 R_{616} 은 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐; 및

[0230] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일 및 트리아지닐기; 중에서 선택되고;

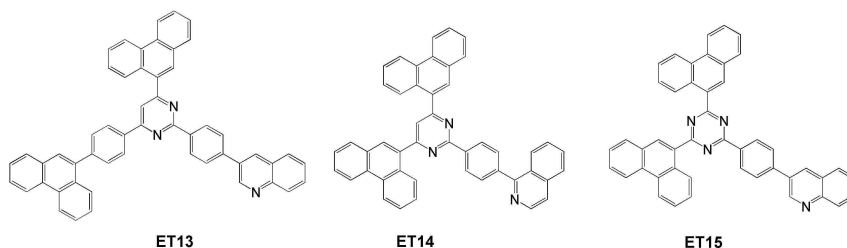
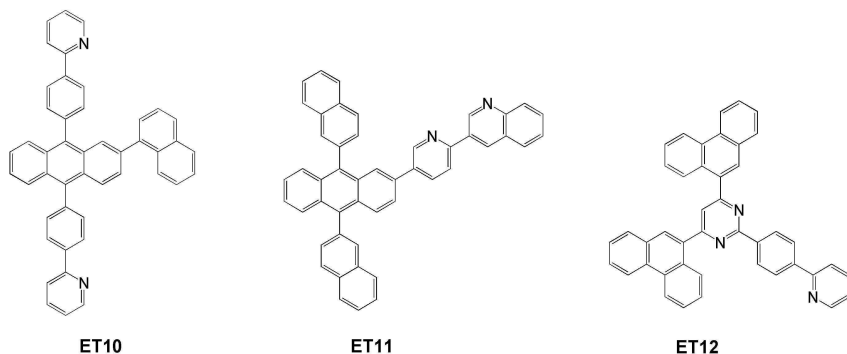
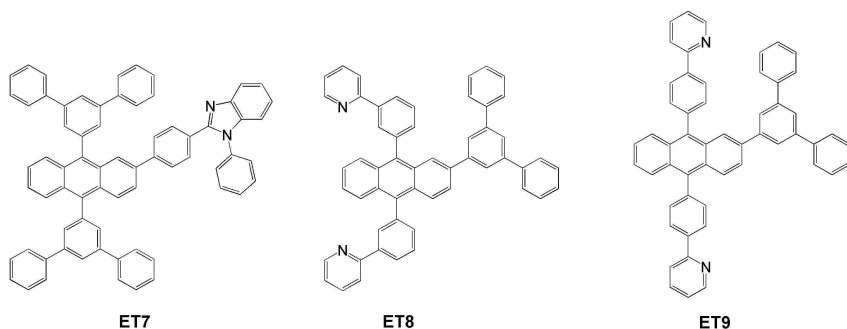
[0231] $xe611$ 내지 $xe616$ 은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택된다.

[0232] 상기 화학식 601로 표시되는 화합물 및 화학식 602로 표시되는 화합물은 서로 독립적으로, 하기 화합물 ET1 내지 ET15 중에서 선택될 수 있다:



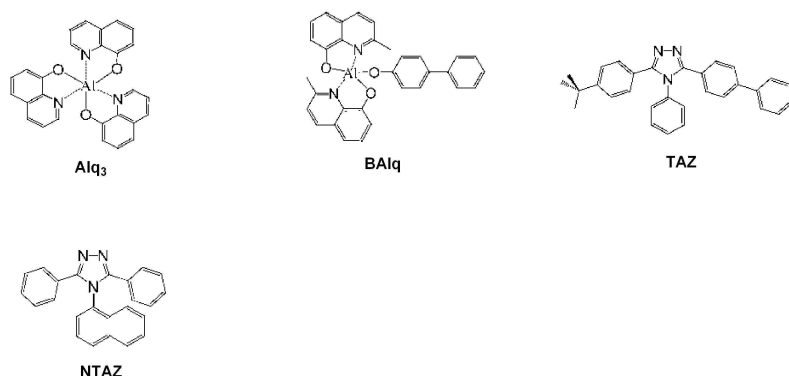
[0233]

[0234]



일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 유기층(150)은 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역을 포함하고, 상기 전자 수송 영역은 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중 적어도 하나가 존재한다.

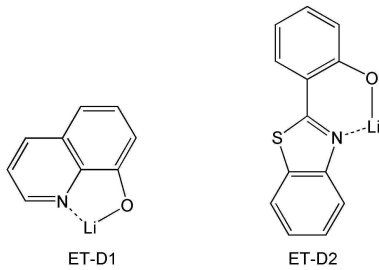
또는, 상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq₃, Balq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.



상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

상기 전자 수송층은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0243] 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다.



[0244]

[0245] 상기 전자 수송 영역은, 제2전극(190)으로부터의 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다.

[0246] 상기 전자 주입층은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 상기 전자 수송층 상부에 형성될 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 전자 주입층을 형성할 경우, 전자 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.

[0247] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 및 LiQ 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0248] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0249] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(190)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 제2전극(190)용 물질의 구체적인 예에는, 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등이 포함될 수 있다. 또는, 상기 제2전극(190)용 물질로서 ITO 또는 IZO 등을 사용할 수 있다. 상기 제2전극(190)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다.

[0250] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0251] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자는 내부 양자 효율(QE_i)이 40% 초과 내지 62.5% 미만일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0252] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자는 외부 양자 효율(QE_o)은 8% 초과 내지 32% 이하이고;

[0253] 상기 외부 양자 효율(QE_o)은 하기 식 4에 의하여 도출될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0254] <식 4>

[0255] 외부 양자 효율(QE_o) = 내부 양자 효율(QE_i) X 아웃 커플링 효율

[0256] 상기 식 4 중,

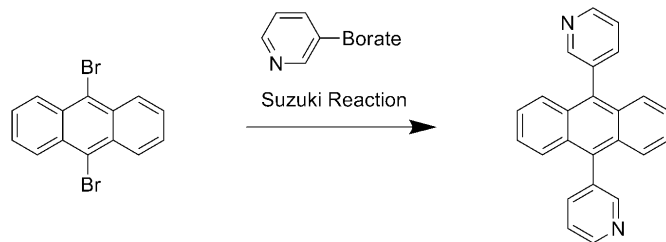
[0257] 아웃 커플링 효율은 20% 내지 50%이다.

[0258] 본 명세서 중 C₁-C₁₀알킬기는, 탄소수 1 내지 10의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다.

[0259] 본 명세서 중 C₆-C₁₅아릴기는 탄소 원자수 6 내지 15개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₁₀아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기 등을 포함한다.

[실시예]

합성에 1: 화합물 5의 합성



9,10-다이브로모안트라센(10g, 0.0298mol)과 3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보란-2-일)피리딘 (13.42 g, 0.0665 mol), 2M K₂CO₃를 톨루엔 (100 mL)에 녹인 후 Pd(pph₃)₄를 소량 넣은 후 90 °C에서 24시간 반응시켰다. 상기 반응물에 물을 첨가하여, 반응을 종결시켰다. 상기 반응물을 에테르로 추출한 다음, 얻어진 유기상에서 에테르를 제거하여 건조된 조생성물을 얻었다. 상기 조생성물을 헥산:EA를 1:10의 부피비로 포함하는 용리액을 사용한 실리카겔컬럼크로마토그래피로 정제하고, 다시 에테르로 재결정하여 화합물 5를 56%의 수율로 얻었다. 얻어진 화합물 5를 NMR로 확인하였다.

¹H-NMR (CDCl₃, 300 Mhz) 9.24 (2H), 8.70 (2H), 7.57 (2H), 8.42 (2H), 8.20 (4H), 7.47 (4H)

평가예 1 : 첫번째 일중항(S1), 첫번째 삼중항(T1) 및 두번째 삼중항(T2) 에너지 레벨 평가

표 3의 방법에 따라 화합물 5 및 ADN의 S1, T1 및 T2 에너지 레벨을 평가하여 그 결과를 표 4에 나타내었다:

표 3

S1 에너지 레벨 평가 방법	톨루엔과 각 화합물의 혼합물(톨루엔 3cc에 각 화합물 1mg을 녹임)을 석영 셀에 넣은 후 상온에서 포토루미네센스 측정기기를 이용하여 포토루미네센스 스펙트럼을 측정하고 1240을 피크 최대파장대로 나눠 나온 값을 S1 에너지로 계산함
T1 에너지 레벨 평가 방법	톨루엔과 각 화합물의 혼합물(톨루엔 3cc에 각 화합물 1mg을 녹임)을 석영 셀에 넣은 후 액체 질소(77K)에 넣고 포토루미네센스 측정기기를 이용하여 포토루미네센스 스펙트럼을 측정하고 이를 일반 상온 포토루미네센스 스펙트럼과 비교하여 저온에서만 관측되는 피크만을 분석하여 T1 에너지 레벨을 계산함
T2 에너지 레벨 평가 방법	정확한 T2 에너지 레벨을 측정할 수 있는 방법이 없어, Gaussian 09'을 이용하여 B3LYP/6-31G base set을 이용하여 계산한 값으로 대체함.

표 4

화합물 No.	S1 에너지 레벨 (eV) - 실측값	T1 에너지 레벨 (eV) - 실측값	T2 에너지 레벨 (eV) - 계산값
5	2.85	1.71	3.43
ADN	2.92	1.73	2.67

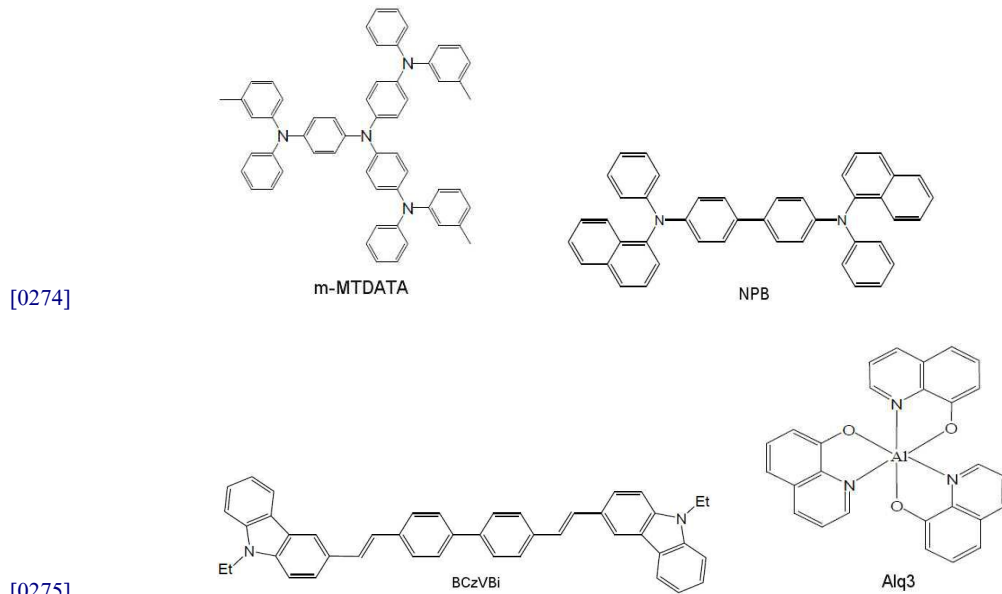
상기 표 4으로부터 상기 화합물 5는 유기 발광 소자용 재료로 사용하기에 적합한 전기적 특성을 가짐을 확인할 수 있다. 또한, 상기 표 4로부터 상기 화합물 5는 상기 식 1을 만족하나, AND은 상기 식 1을 만족하지 못함을 확인할 수 있다.

실시예 1

15Ω/cm² (1200Å) 두께의 ITO층이 형성된 ITO 유리 기판(코닝(corning)사 제품)을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착 장치에 상기 ITO 유리 기판을 설치하였다.

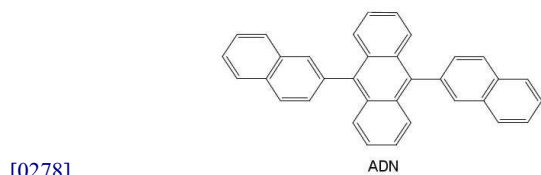
[0272] 상기 ITO 애노드 상부에 m-MTDATA를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성한 다음, 상기 발광층 상부에 화합물 화합물 5(호스트) 및 BCzVBi(도펀트)를 90:10의 중량비로 공증착하여 200Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0273] 상기 발광층 상부에 Alq₃를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하고, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 다음, 상기 전자 주입층 상부에 Al을 증착하여, 1000Å 두께의 캐소드를 형성함으로써, 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0276] **비교예 1**

[0277] 발광층 형성시 화합물 5 대신 ADN을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0279] **평가예 2: 외부 양자 효율 평가**

[0280] 상기 실시예 1 및 비교예 1에서 제작된 유기 발광 소자의 외부 양자 효율을 QS1000-IVLQ 측정기를 이용하여 측정하여, 그 결과를 표 5에 나타내었다.

표 5

[0281]

	외부 양자 효율(%)
실시예 1	9.1%
비교예 1	4.8%
이론상 최대치*	8%

[0282] *: 본 발명의 일 실시예에 따른 조건을 만족하지 않는 경우, 얻어질 수 있는 외부 양자 효율의 이론상 최대치로서, 하기 식 5로 계산된다:

[0283] <식 5>

[0284] 이론상 최대치 = charge balance(100%) x 여기자 생성효율(40%) x 발광 양자 효율(100%) x 광 방출 효율 (20%)
= 8%

[0285] 상기 표 5로부터 실시예 1의 외부 양자 효율은 비교예 1의 유기 발광 소자의 외부 양자 효율에 비하여 우수함을 확인할 수 있다. 또한 이론적으로 가능한 외부 양자 효율을 넘는 고효율을 확인할 수 있다.

[0286] **평가예 3: 지연형광 비율 평가**

[0287] 실시예 1과 비교예 1에 대하여, Transient EL을 측정하였다. 측정에 사용된 전압은 요구 휘도에서의 구동 전압이었으며, 10 Hz의 진동수(frequency)에서 400 μ s의 펄스를 인가한 이후부터의 발광 세기를 측정하여, 도 3에 표시하였다. 상기 도 3의 그래프를 1/(제곱근) 함수를 이용하여 변환하여, 도 4에 표시하였다. 도 4로부터 1/(절편)²을 계산하여, 지연형광 비율을 얻어 그 결과를 하기 표 6에 나타내었다:

표 6

	지연형광 비율(%)
실시예 1	25%
비교예 1	52.5
이론상 최대치**	40%

[0289] **: 본 발명의 일 실시예에 따른 조건을 만족하지 않는 경우, 얻어질 수 있는 여기자 생성효율의 이론상 최대치로서, 40%이다.

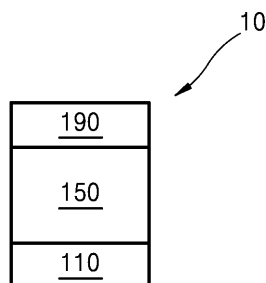
[0290] 표 6을 참조하면, 실시예 1의 지연형광 비율은 비교예 1의 유기 발광 소자의 지연형광 비율에 비하여 우수함을 확인할 수 있다. 또한 이론적으로 가능한 지연형광 비율을 넘는 고효율을 확인할 수 있다.

부호의 설명

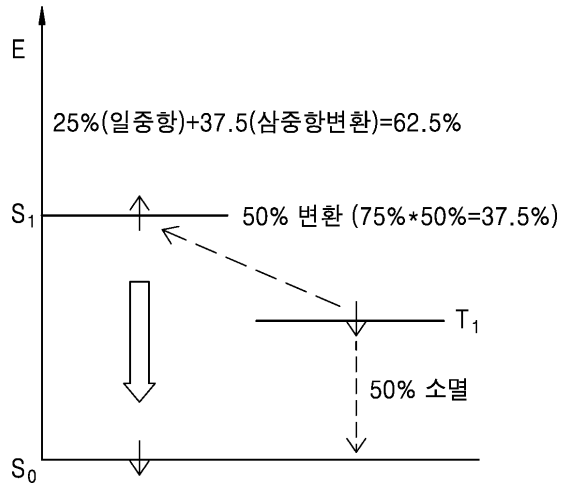
[0291] 10: 유기 발광 소자
110: 제1전극
150: 유기층
190: 제2전극

도면

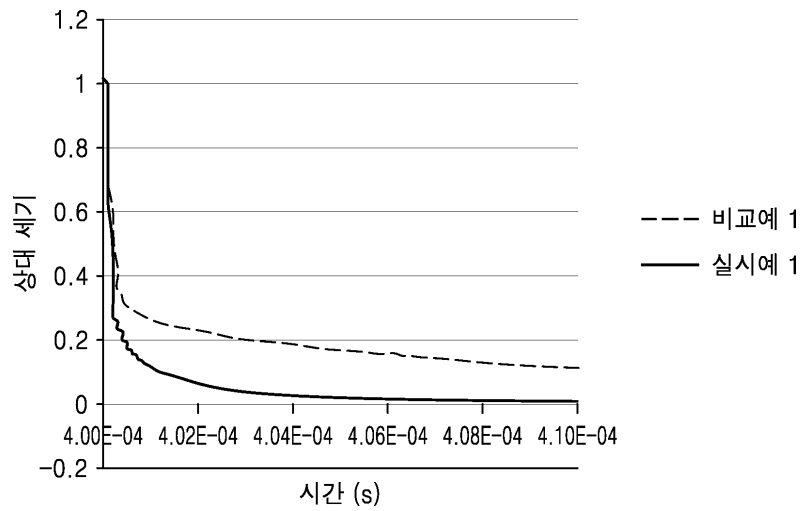
도면1



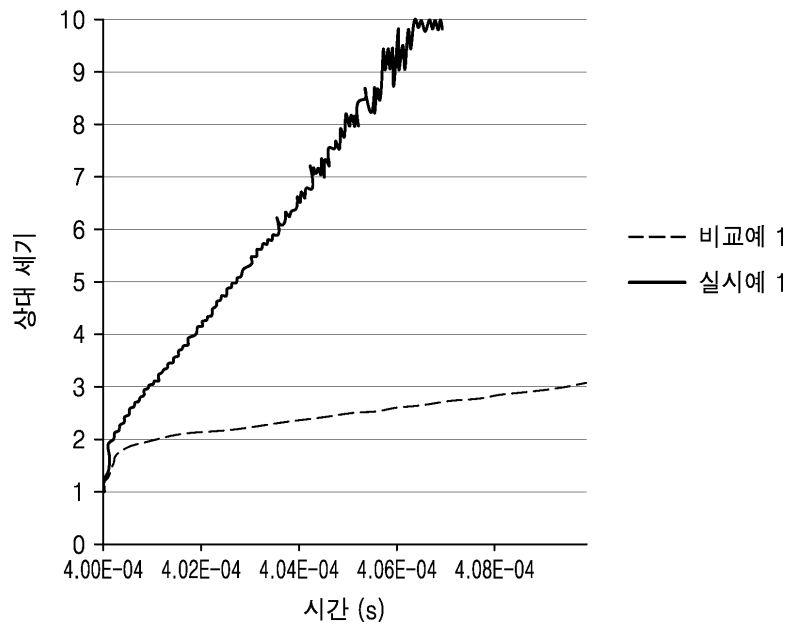
도면2



도면3



도면4



专利名称(译)	标题：用于有机发光器件的化合物和包括其的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020160031651A	公开(公告)日	2016-03-23
申请号	KR1020140121266	申请日	2014-09-12
[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		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	PARK ILL SOO 박일수 KIM SEUL ONG 김슬옹 SHIN HYO SUP 신호섭		
发明人	박일수 김슬옹 신호섭		
IPC分类号	C09K11/06 C07D211/80 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0067 C07D213/53 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1044 H01L51/0052 H01L51/5012 H01L2251/308 H01L2251/552 H05B33/20		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

公开了一种用于有机发光器件的化合物和包含该化合物的有机发光器件。

