



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0040183
(43) 공개일자 2024년03월28일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 405/10 (2006.01) C07D 405/04 (2006.01)
C07D 405/14 (2006.01) C07D 409/04 (2006.01)
C07D 409/10 (2006.01) C07D 409/14 (2006.01)
H10K 50/00 (2023.01) H10K 99/00 (2023.01)

(52) CPC특허분류

C07D 405/10 (2013.01)
C07D 405/04 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2022-0118728

(22) 출원일자 2022년09월20일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

경희대학교 산학협력단

경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732 (서천동, 경희대학교 국제캠퍼스내)

(72) 발명자

권장혁

경기도 성남시 수정구 위례순환로 100, 3306동 203호(창곡동, 위례자이)

채미영

경기도 용인시 수지구 동천로153번길 7, 1104동 1401호

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인 천지

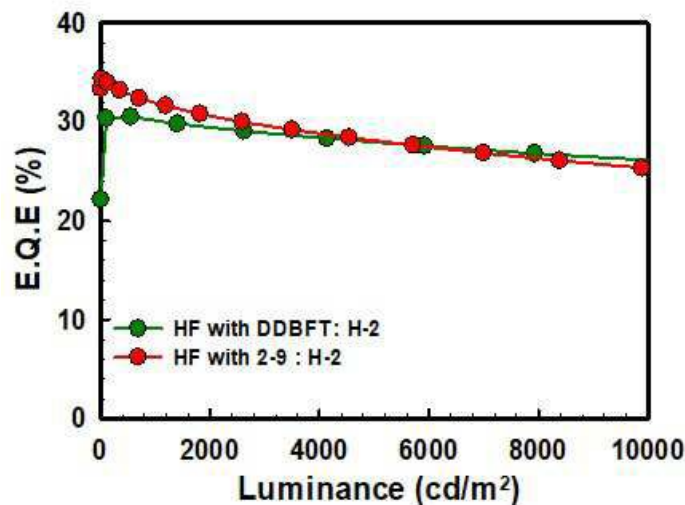
전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 유기 화합물 및 이를 포함한 유기 발광소자

(57) 요약

본 발명은 특정 치환체를 포함하는 구조를 가진 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 LUMO 에너지를 낮춰 도펀트로의 전자 트랩 현상을 억제하여 소자의 색 순도와 발광효율 및 안정성을 향상시킨 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광소자에 관한 것이다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 405/14 (2013.01)
C07D 409/04 (2013.01)
C07D 409/10 (2013.01)
C07D 409/14 (2013.01)
H10K 85/322 (2023.02)
H10K 85/654 (2023.02)
H10K 85/6572 (2023.02)
H10K 85/6574 (2023.02)
H10K 85/6576 (2023.02)

정영훈

서울특별시 동대문구 회기로25가길 28-16, 301호

(72) 발명자

무르가난 서브라마니안

서울특별시 동대문구 회기로25길 99, 105호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711154783
과제번호	2019M3D1A2104019
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	미래소재디스커버리지원 (R&D)
연구과제명	신규 분자 구조 기반의 고효율 장수명 청색 발광 소재 연구
기 여 율	1/2
과제수행기관명	경희대학교 산학협력단
연구기간	2019.09.27 ~ 2022.12.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1415179252
과제번호	20015850
부처명	산업통상자원부
과제관리(전문)기관명	한국산업기술평가관리원
연구사업명	소재부품기술개발
연구과제명	디스플레이용 High T1($\geq 2.9\text{eV}$, Blue)호스트의 AI기반 개발
기 여 율	1/2
과제수행기관명	엘티소재
연구기간	2021.04.01 ~ 2024.12.31

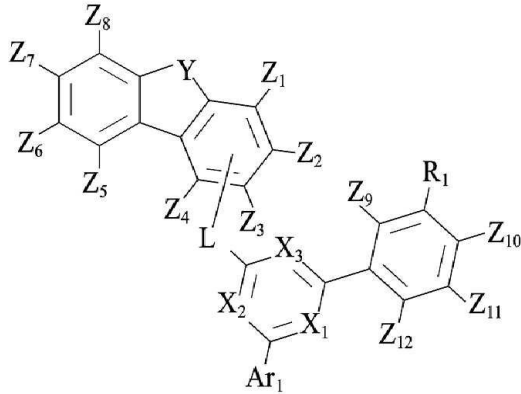
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물;

[화학식 1]



상기 화학식 1은,

시아노기를 1 내지 8개 포함하고;

Z₁ 내지 Z₄ 중 어느 하나가 L이고;

L은 직접 연결되거나 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기이고;

상기 L을 제외한 Z₁내지 Z₁₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, -C(R₂)(R₃)(R₄), 및 -Si(R₂)(R₃)(R₄); 중에서 선택되고;

X₁ 내지 X₃은 서로 독립적으로, 질소, 수소로 치환된 탄소 및 중수소로 치환된 탄소; 중에서 선택되고, 질소는 1 개 또는 2개 존재하고;

Y는 산소 또는 황이고;

Ar₁은 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란 또는 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오펜; 이고;

R₁은 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀헤테로아릴기 또는 -Si(R₂)(R₃)(R₄); 이고;

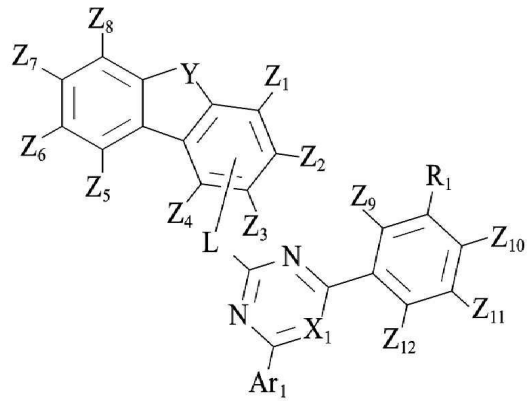
상기 R₂ 내지 R₄는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기 및 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀헤테로아릴기; 중에서 선택된다.

청구항 2

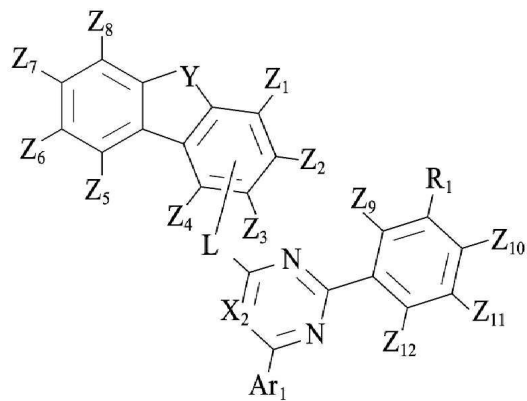
제1항에 있어서,

하기 화학식 1-1, 1-2 및 1-3 중 하나로 표시되는 유기 화합물.

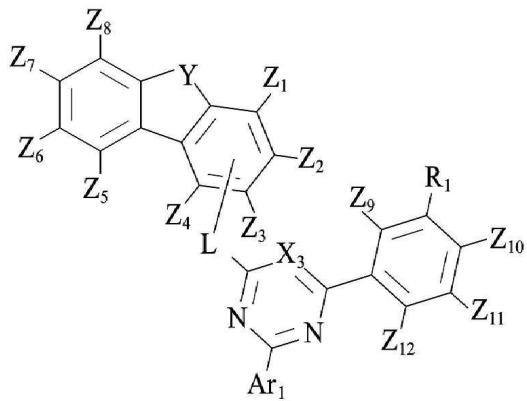
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



[화학식 1-3]

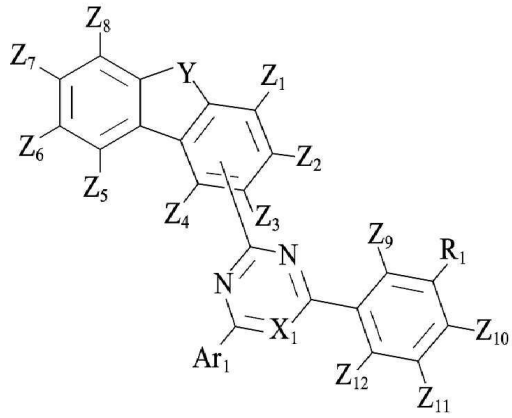


청구항 3

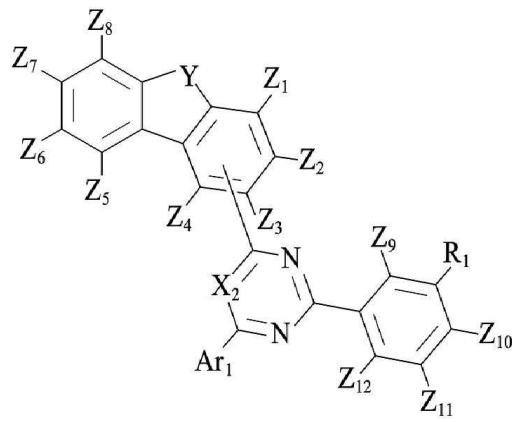
제1항에 있어서,

하기 화학식 1-4, 1-5 및 1-6 중 하나로 표시되는 유기 화합물.

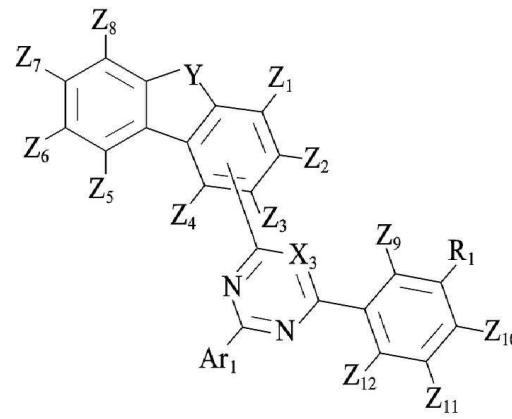
[화학식 1-4]



[화학식 1-5]



[화학식 1-6]

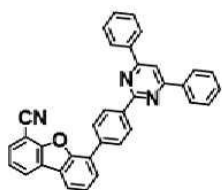


청구항 4

제1항에 있어서,

하기 화합물 1-1 내지 1-105 중 하나로 표시되는 유기 화합물.

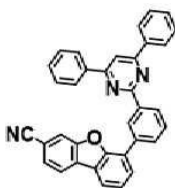
[화합물 1-1]



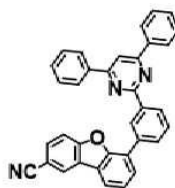
[화합물 1-2]



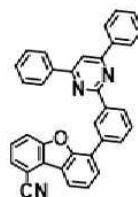
[화합물 1-3]



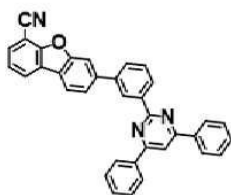
[화합물 1-4]



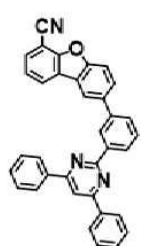
[화합물 1-5]



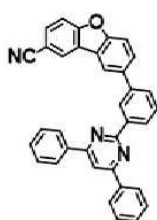
[화합물 1-6]



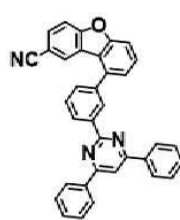
[화합물 1-7]



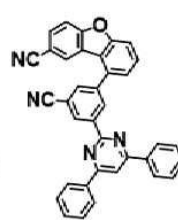
[화합물 1-8]



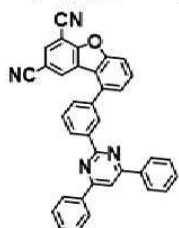
[화합물 1-9]



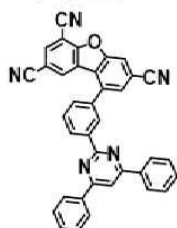
[화합물 1-10]



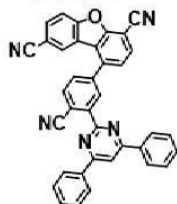
[화합물 1-11]



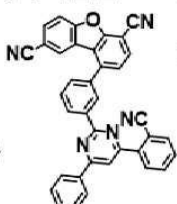
[화합물 1-12]



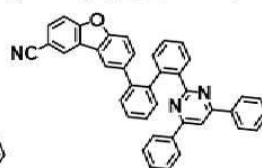
[화합물 1-13]



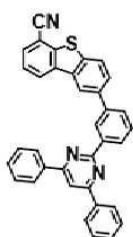
[화합물 1-14]



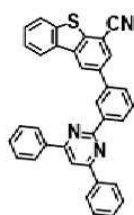
[화합물 1-15]



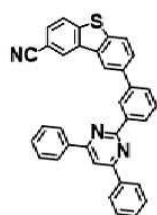
[화합물 1-16]



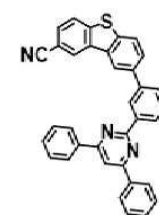
[화합물 1-17]



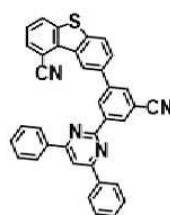
[화합물 1-18]



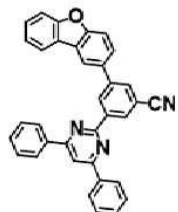
[화합물 1-19]



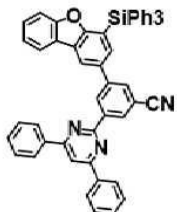
[화합물 1-20]



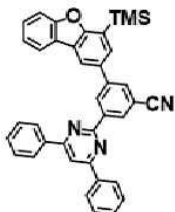
[화합물 1-21]



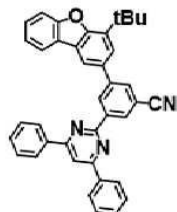
[화합물 1-22]



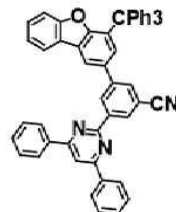
[화합물 1-23]



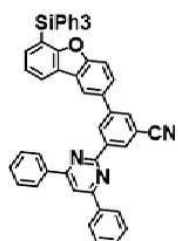
[화합물 1-24]



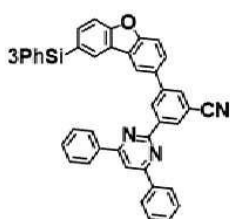
[화합물 1-25]



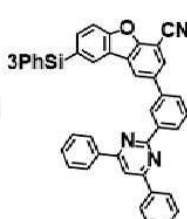
[화합물 1-26]



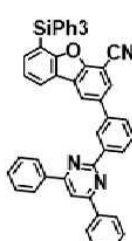
[화합물 1-27]



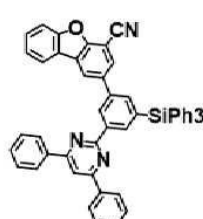
[화합물 1-28]



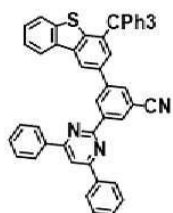
[화합물 1-29]



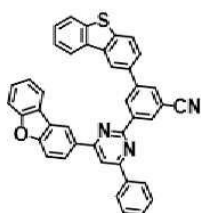
[화합물 1-30]



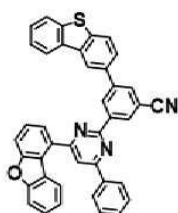
[화합물 1-31]



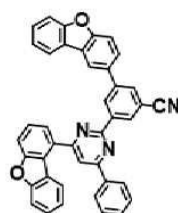
[화합물 1-32]



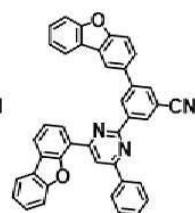
[화합물 1-33]



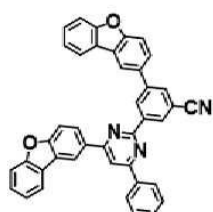
[화합물 1-34]



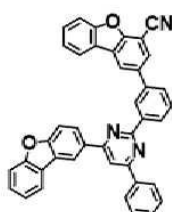
[화합물 1-35]



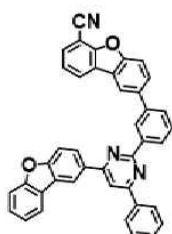
[화합물 1-36]



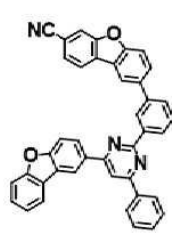
[화합물 1-37]



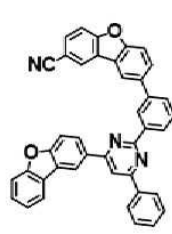
[화합물 1-38]



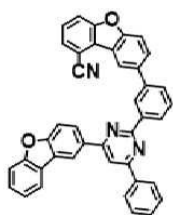
[화합물 1-39]



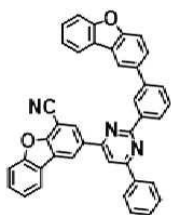
[화합물 1-40]



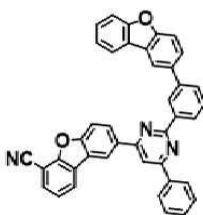
[화합물 1-41]



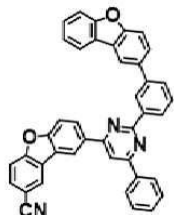
[화합물 1-42]



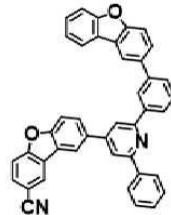
[화합물 1-43]



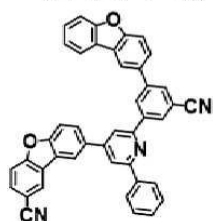
[화합물 1-44]



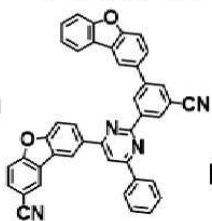
[화합물 1-45]



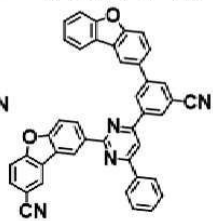
[화합물 1-46]



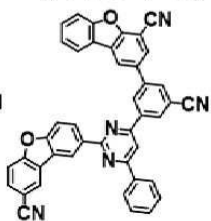
[화합물 1-47]



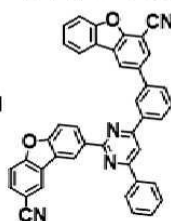
[화합물 1-48]



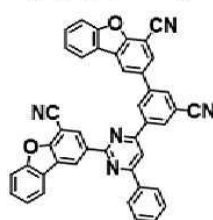
[화합물 1-49]



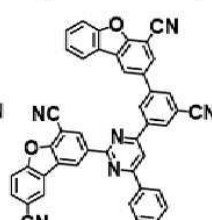
[화합물 1-50]



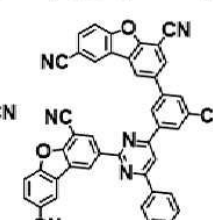
[화합물 1-51]



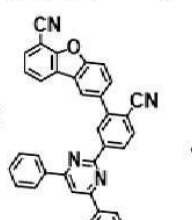
[화합물 1-52]



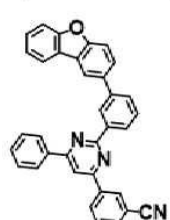
[화합물 1-53]



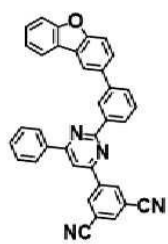
[화합물 1-54]



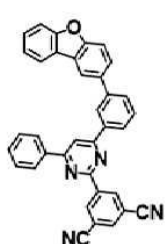
[화합물 1-55]



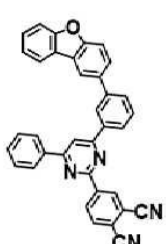
[화합물 1-56]



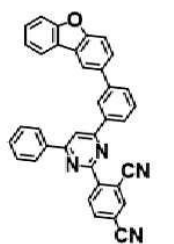
[화합물 1-57]



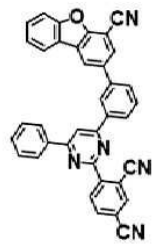
[화합물 1-58]



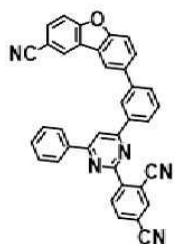
[화합물 1-59]



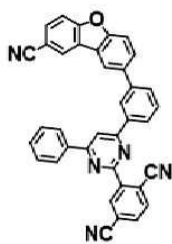
[화합물 1-60]



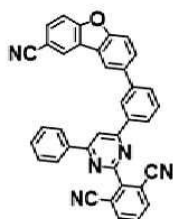
[화합물 1-61]



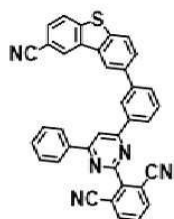
[화합물 1-62]



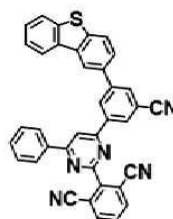
[화합물 1-63]



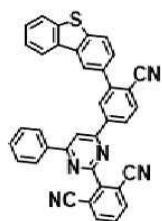
[화합물 1-64]



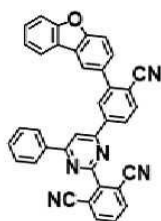
[화합물 1-65]



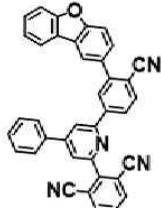
[화합물 1-66]



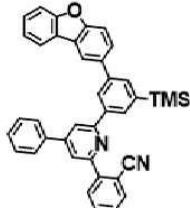
[화합물 1-67]



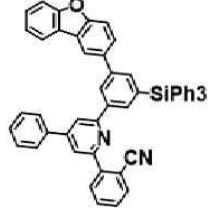
[화합물 1-68]



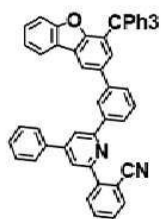
[화합물 1-69]



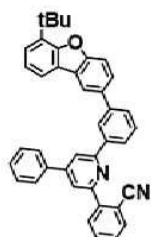
[화합물 1-70]



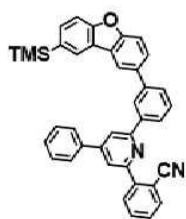
[화합물 1-71]



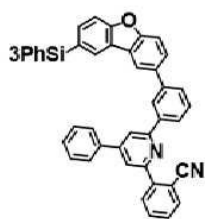
[화합물 1-72]



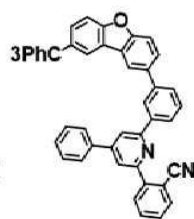
[화합물 1-73]



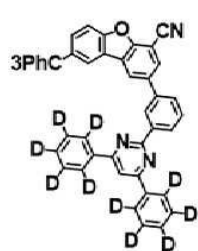
[화합물 1-74]



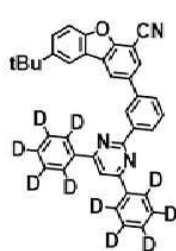
[화합물 1-75]



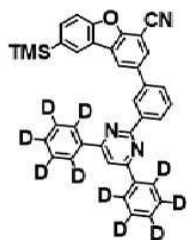
[화합물 1-76]



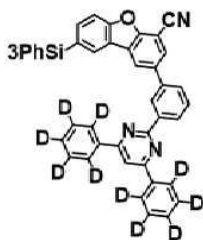
[화합물 1-77]



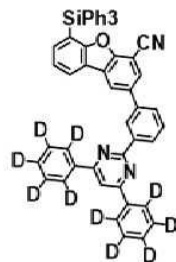
[화합물 1-78]



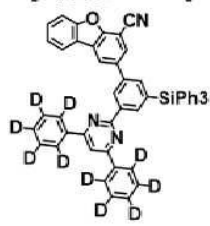
[화합물 1-79]



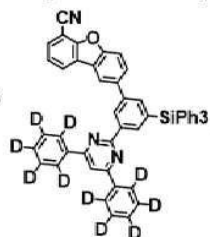
[화합물 1-80]



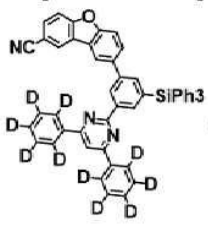
[화합물 1-81]



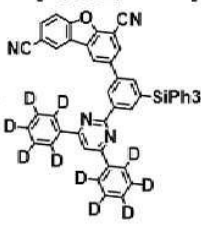
[화합물 1-82]



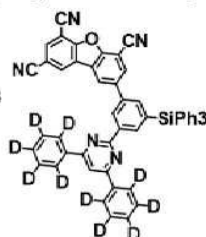
[화합물 1-83]



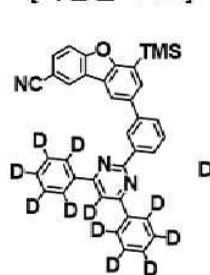
[화합물 1-84]



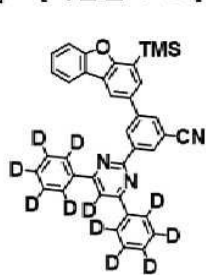
[화합물 1-85]



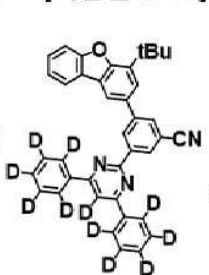
[화합물 1-86]



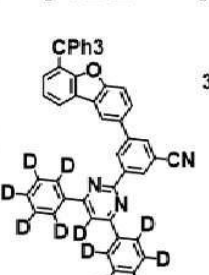
[화합물 1-87]



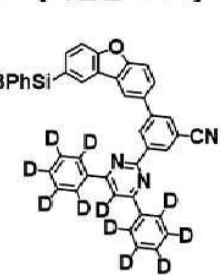
[화합물 1-88]



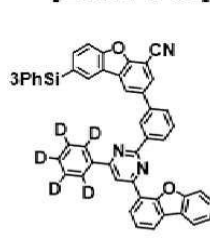
[화합물 1-89]



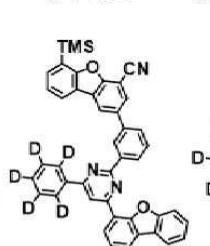
[화합물 1-90]



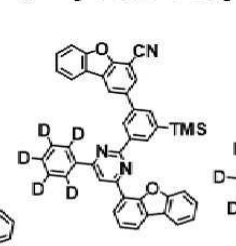
[화합물 1-91]



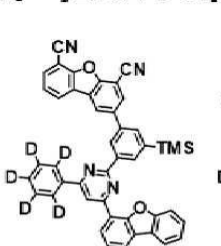
[화합물 1-92]



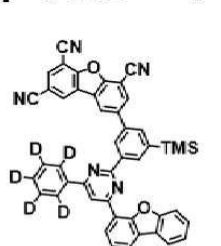
[화합물 1-93]



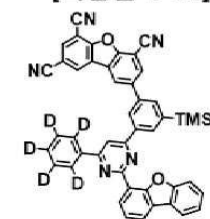
[화합물 1-94]



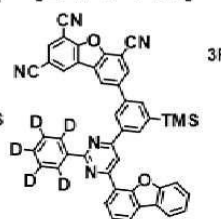
[화합물 1-95]



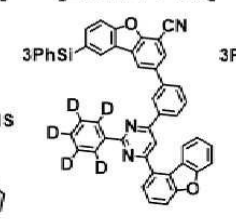
[화합물 1-96]



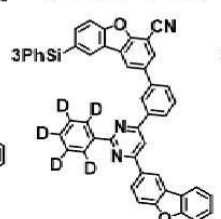
[화합물 1-97]



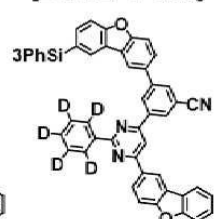
[화합물 1-98]



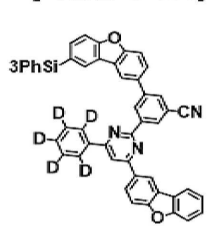
[화합물 1-99]



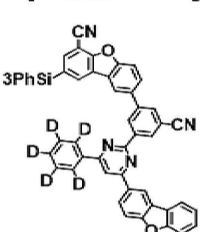
[화합물 1-100]



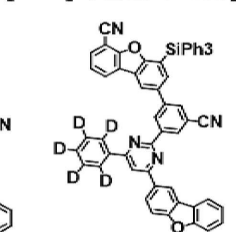
[화합물 1-101]



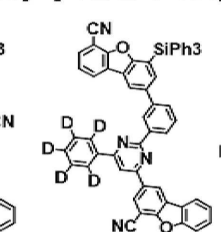
[화합물 1-102]



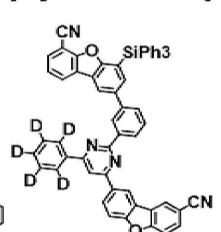
[화합물 1-103]



[화합물 1-104]



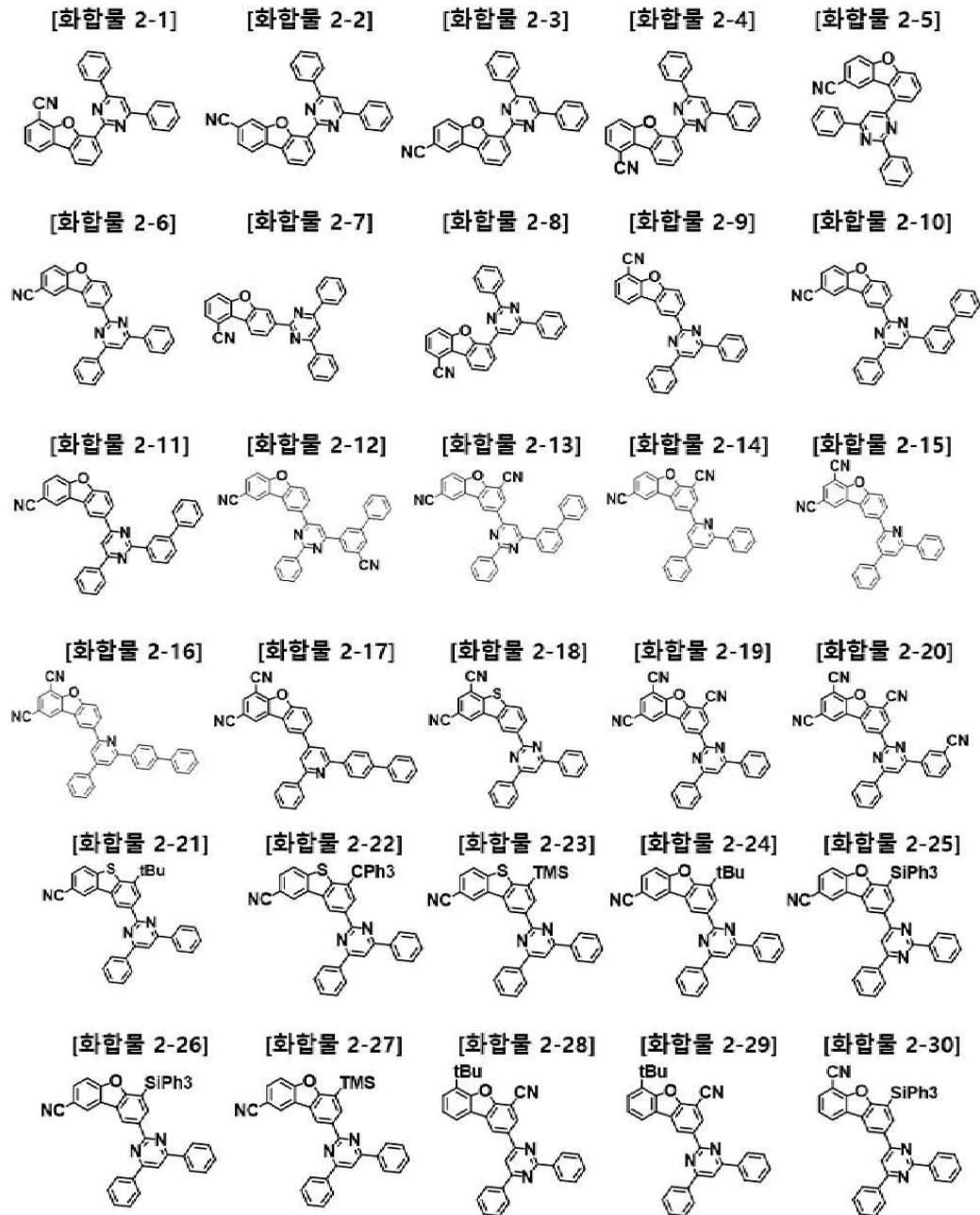
[화합물 1-105]



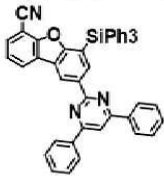
청구항 5

제1항에 있어서,

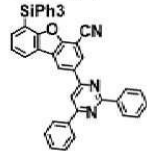
하기 화합물 2-1 내지 2-113 중 하나로 표시되는 유기 화합물.



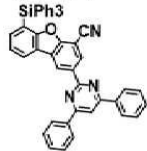
[화합물 2-31]



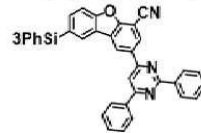
[화합물 2-32]



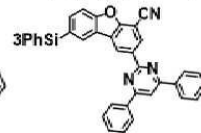
[화합물 2-33]



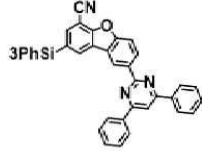
[화합물 2-34]



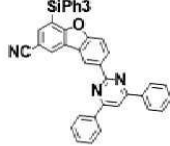
[화합물 2-35]



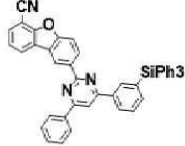
[화합물 2-36]



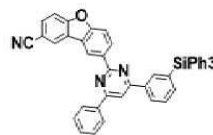
[화합물 2-37]



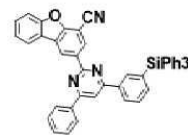
[화합물 2-38]



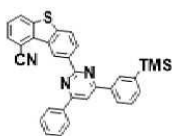
[화합물 2-39]



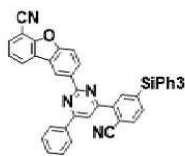
[화합물 2-40]



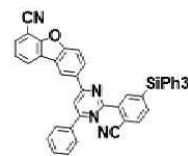
[화합물 2-41]



[화합물 2-42]



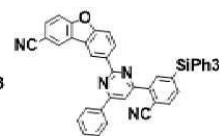
[화합물 2-43]



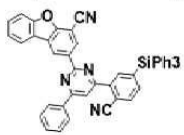
[화합물 2-44]



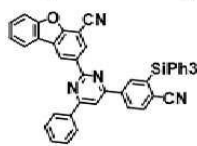
[화합물 2-45]



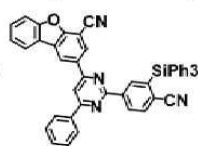
[화합물 2-46]



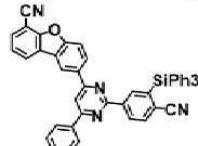
[화합물 2-47]



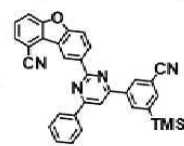
[화합물 2-48]



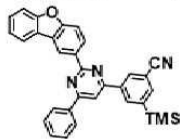
[화합물 2-49]



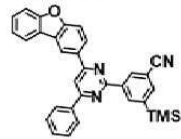
[화합물 2-50]



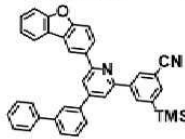
[화합물 2-51]



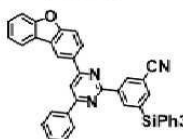
[화합물 2-52]



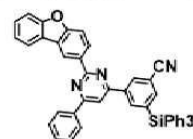
[화합물 2-53]



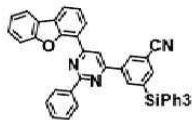
[화합물 2-54]



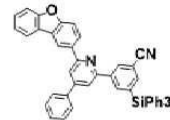
[화합물 2-55]



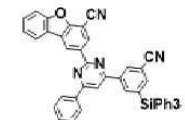
[화합물 2-56]



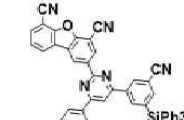
[화합물 2-57]



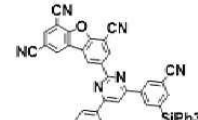
[화합물 2-58]



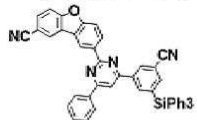
[화합물 2-59]



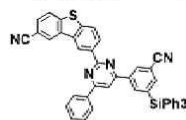
[화합물 2-60]



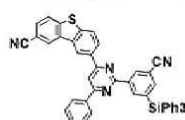
[화합물 2-61]



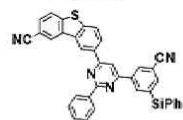
[화합물 2-62]



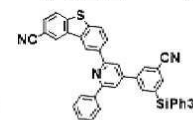
[화합물 2-63]



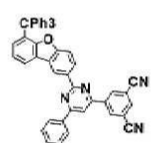
[화합물 2-64]



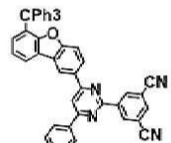
[화합물 2-65]



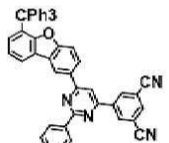
[화합물 2-66]



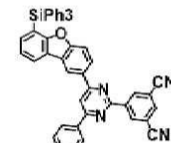
[화합물 2-67]



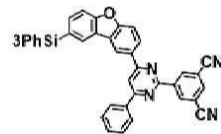
[화합물 2-68]



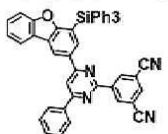
[화합물 2-69]



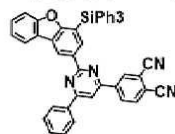
[화합물 2-70]



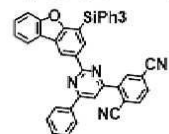
[화합물 2-71]



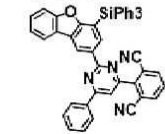
[화합물 2-72]



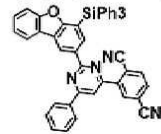
[화합물 2-73]



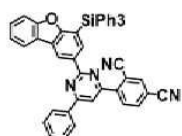
[화합물 2-74]



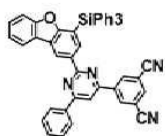
[화합물 2-75]



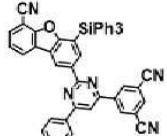
[화합물 2-76]



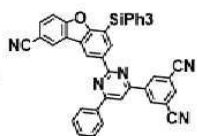
[화합물 2-77]



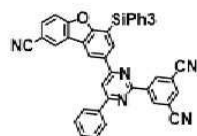
[화합물 2-78]



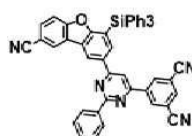
[화합물 2-79]



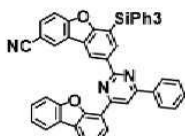
[화합물 2-80]



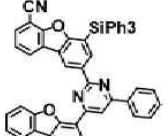
[화합물 2-81]



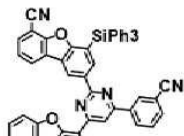
[화합물 2-82]



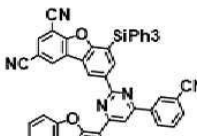
[화합물 2-83]



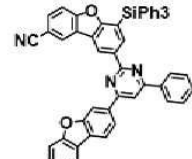
[화합물 2-84]



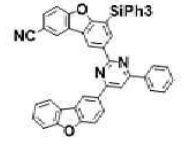
[화합물 2-85]



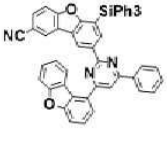
[화합물 2-86]



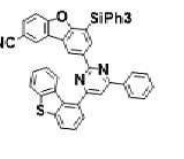
[화합물 2-87]



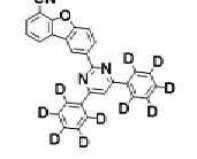
[화합물 2-88]



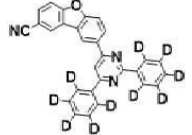
[화합물 2-89]



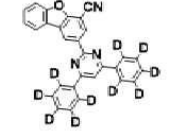
[화합물 2-90]



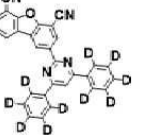
[화합물 2-91]



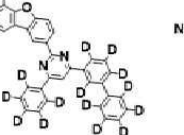
[화합물 2-92]



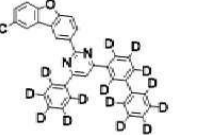
[화합물 2-93]



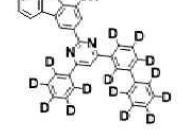
[화합물 2-94]



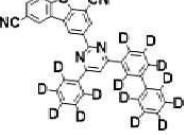
[화합물 2-95]



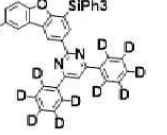
[화합물 2-96]



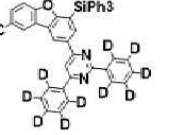
[화합물 2-97]



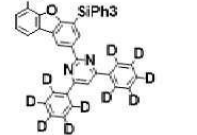
[화합물 2-98]



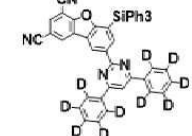
[화합물 2-99]



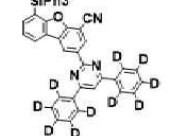
[화합물 2-100]



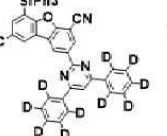
[화합물 2-101]



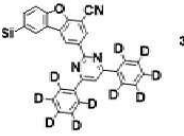
[화합물 2-102]



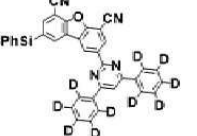
[화합물 2-103]



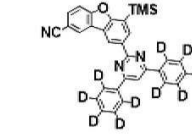
[화합물 2-104]



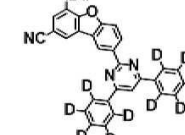
[화합물 2-105]



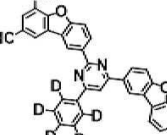
[화합물 2-106]



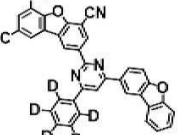
[화합물 2-107]



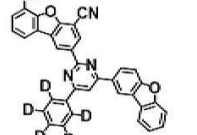
[화합물 2-108]



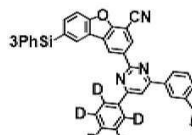
[화합물 2-109]



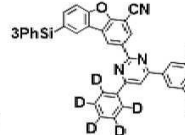
[화합물 2-110]



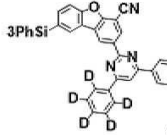
[화합물 2-111]



[화합물 2-112]



[화합물 2-113]



청구항 6

제1전극;

상기 제1전극과 대향하여 구비된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기물층;을 포함하고,

상기 유기물층은 제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 따른 유기 화합물을 1종 이상 포함하는 유기 발광소자.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하고,

전자주입층, 전자수송층, 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층 및 정공저지층으로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 층을 더 포함하는 유기 발광소자.

청구항 8

제7항에 있어서,

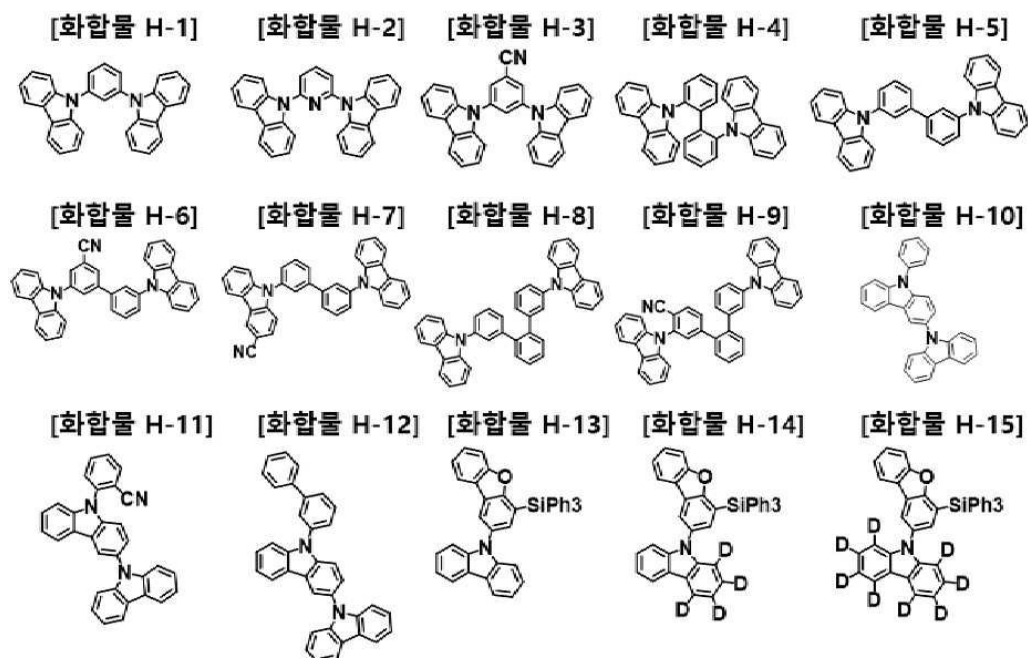
상기 발광층은 호스트 화합물을 포함하고,

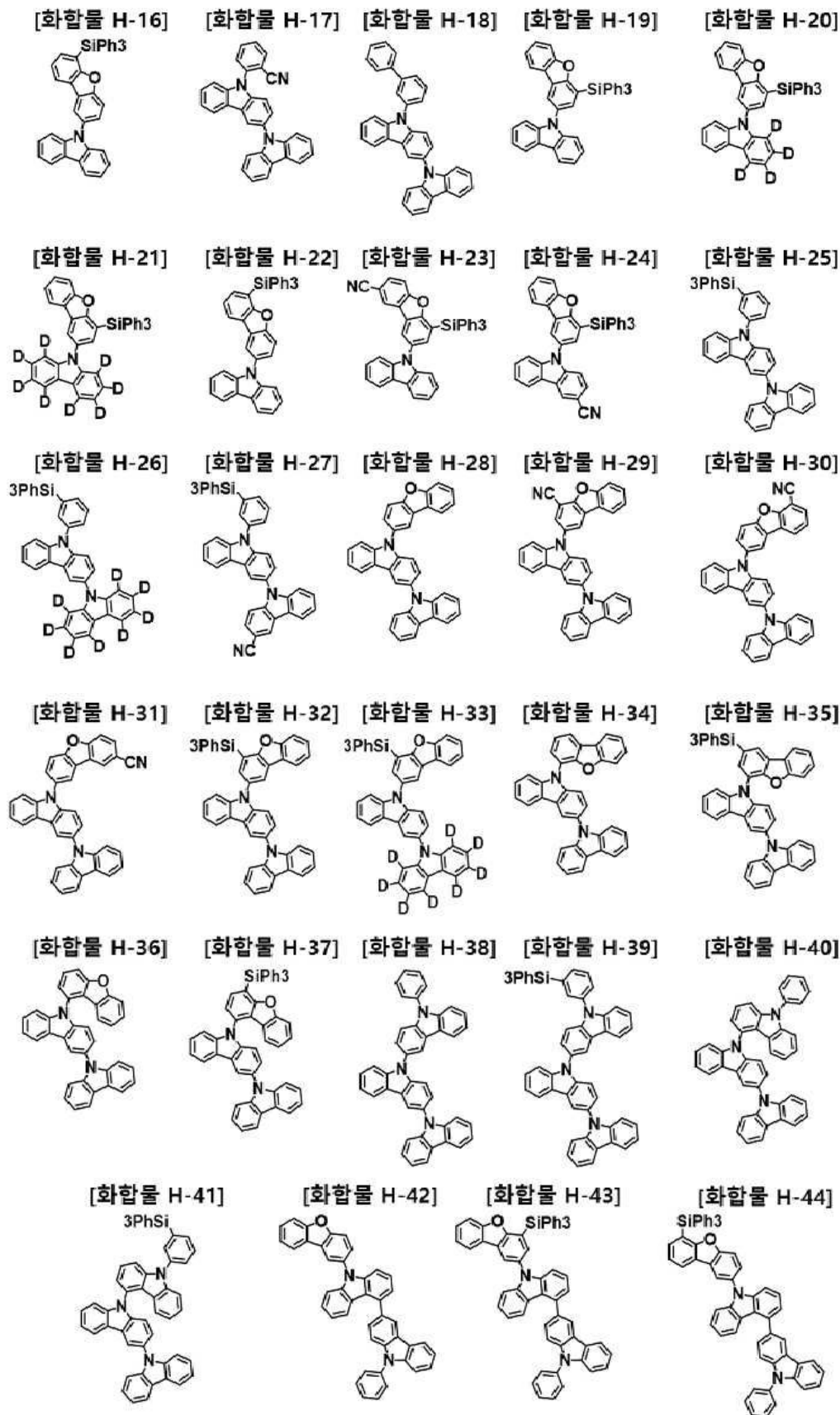
제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 따른 유기 화합물을 전자 수송용 호스트 화합물로 1종 이상 포함하는 유기 발광소자.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 화합물 H-1 내지 H-44로 이루어진 군으로부터 선택되는 정공 수송용 호스트 화합물 중 어느 하나 이상을 더 포함하는 유기 발광소자.





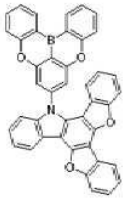
청구항 10

제7항에 있어서,

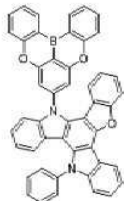
상기 발광층은 하기 화합물 T-1 내지 T-157로 이루어진 군으로부터 선택되는 지연형광 화합물 중 어느 하나 이

상을 포함하는 유기 발광소자.

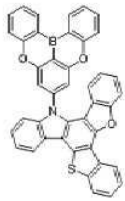
[화합물 T-1]



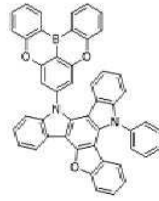
[화합물 T-2]



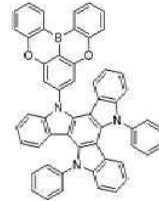
[화합물 T-3]



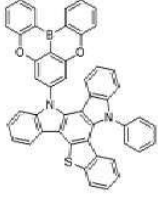
[화합물 T-4]



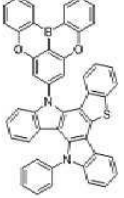
[화합물 T-5]



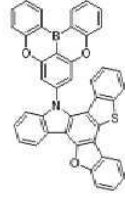
[화합물 T-6]



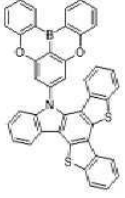
[화합물 T-7]



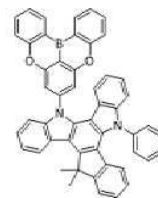
[화합물 T-8]



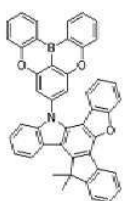
[화합물 T-9]



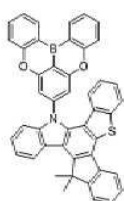
[화합물 T-10]



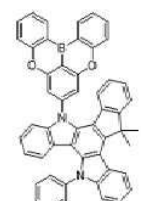
[화합물 T-11]



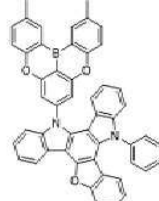
[화합물 T-12]



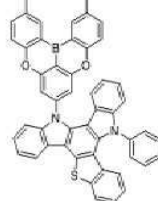
[화합물 T-13]



[화합물 T-14]



[화합물 T-15]



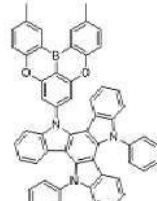
[화합물 T-16]



[화합물 T-17]



[화합물 T-18]



[화합물 T-19]



[화합물 T-20]



[화합물 T-21]



[화합물 T-22]



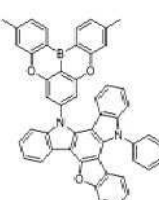
[화합물 T-23]



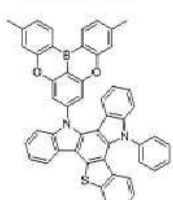
[화합물 T-24]



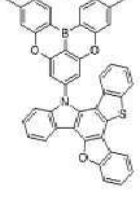
[화합물 T-25]



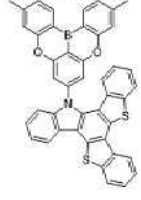
[화합물 T-26]



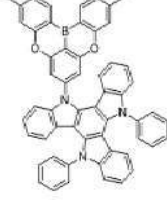
[화합물 T-27]



[화합물 T-28]

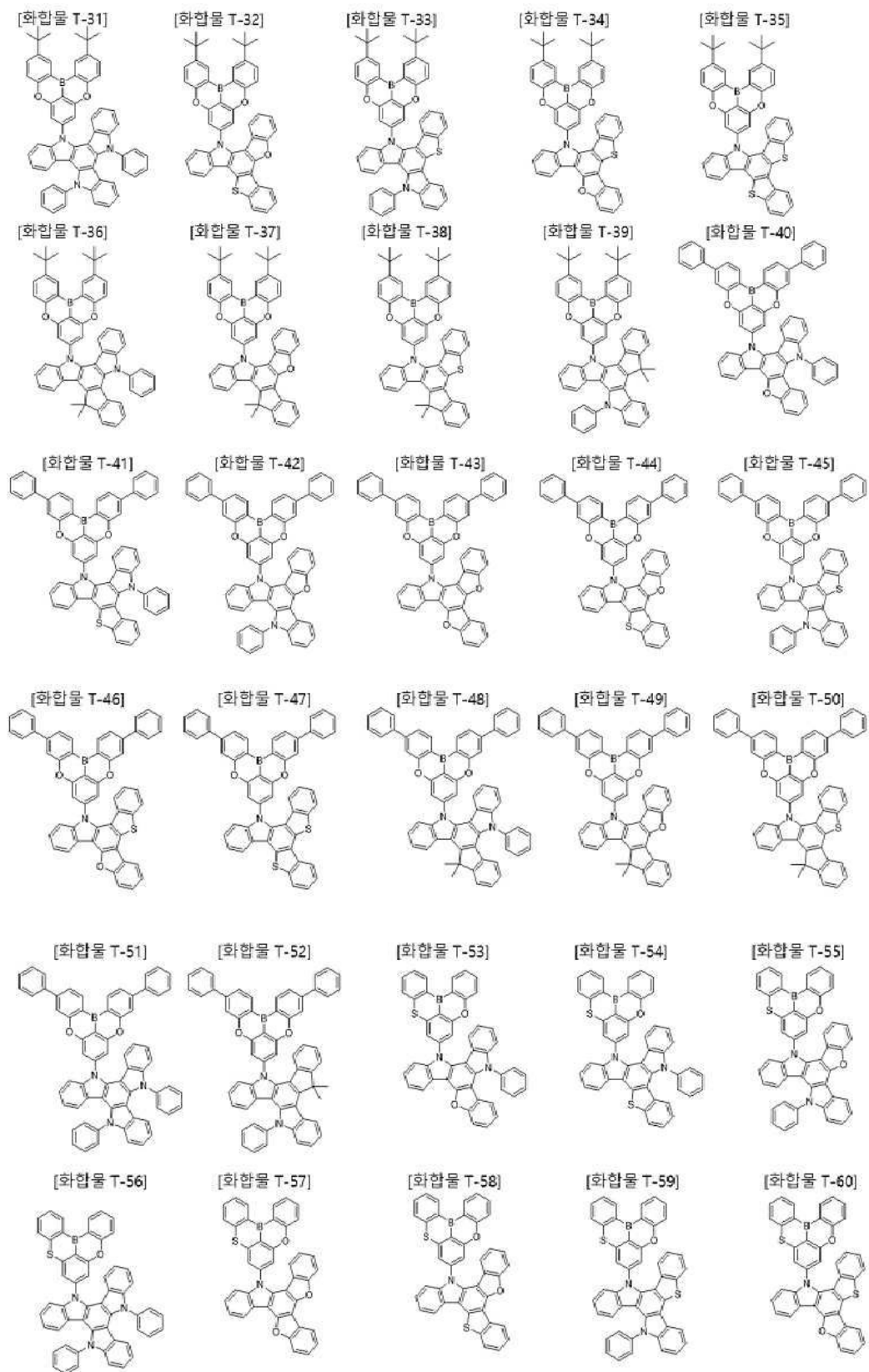


[화합물 T-29]

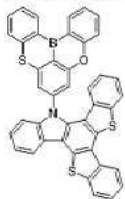


[화합물 T-30]





[화합물 T-61]



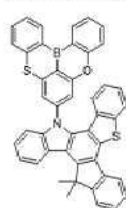
[화합물 T-62]



[화합물 T-63]



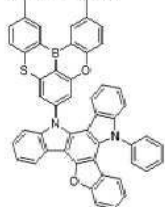
[화합물 T-64]



[화합물 T-65]



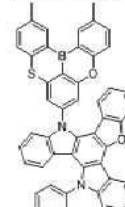
[화합물 T-66]



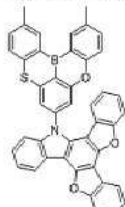
[화합물 T-67]



[화합물 T-68]



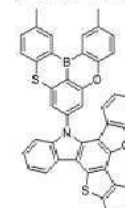
[화합물 T-69]



[화합물 T-70]



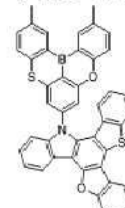
[화합물 T-71]



[화합물 T-72]



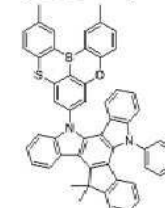
[화합물 T-73]



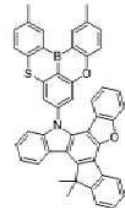
[화합물 T-74]



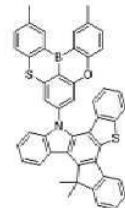
[화합물 T-75]



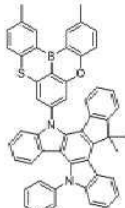
[화합물 T-76]



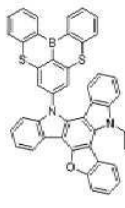
[화합물 T-77]



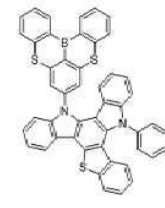
[화합물 T-78]



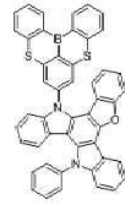
[화합물 T-79]



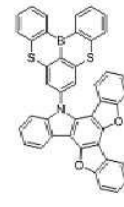
[화합물 T-80]



[화합물 T-81]



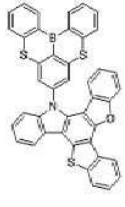
[화합물 T-82]



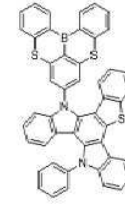
[화합물 T-83]



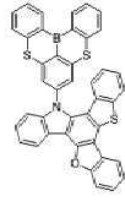
[화합물 T-84]



[화합물 T-85]



[화합물 T-86]



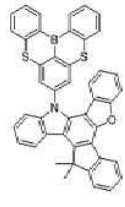
[화합물 T-87]



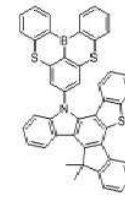
[화합물 T-88]



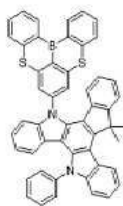
[화합물 T-89]



[화합물 T-90]



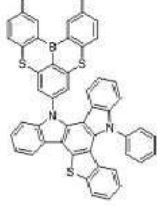
[화합물 T-91]



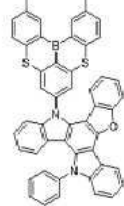
[화합물 T-92]



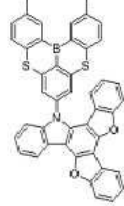
[화합물 T-93]



[화합물 T-94]



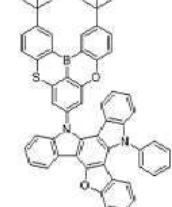
[화합물 T-95]



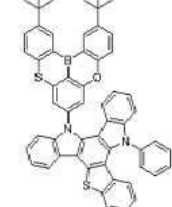
[화합물 T-96]



[화합물 T-97]



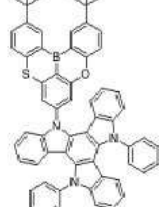
[화합물 T-98]



[화합물 T-99]



[화합물 T-100]



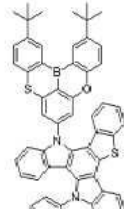
[화합물 T-101]



[화합물 T-102]



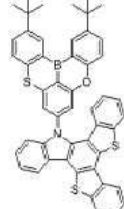
[화합물 T-103]



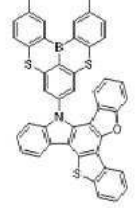
[화합물 T-104]



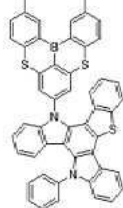
[화합물 T-105]



[화합물 T-106]



[화합물 T-107]



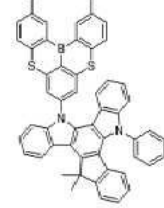
[화합물 T-108]



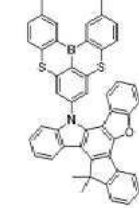
[화합물 T-109]



[화합물 T-110]



[화합물 T-111]



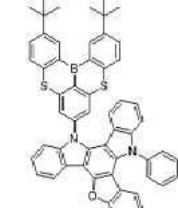
[화합물 T-112]



[화합물 T-113]



[화합물 T-114]



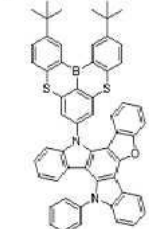
[화합물 T-115]



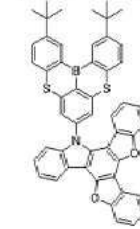
[화합물 T-116]



[화합물 T-117]



[화합물 T-118]

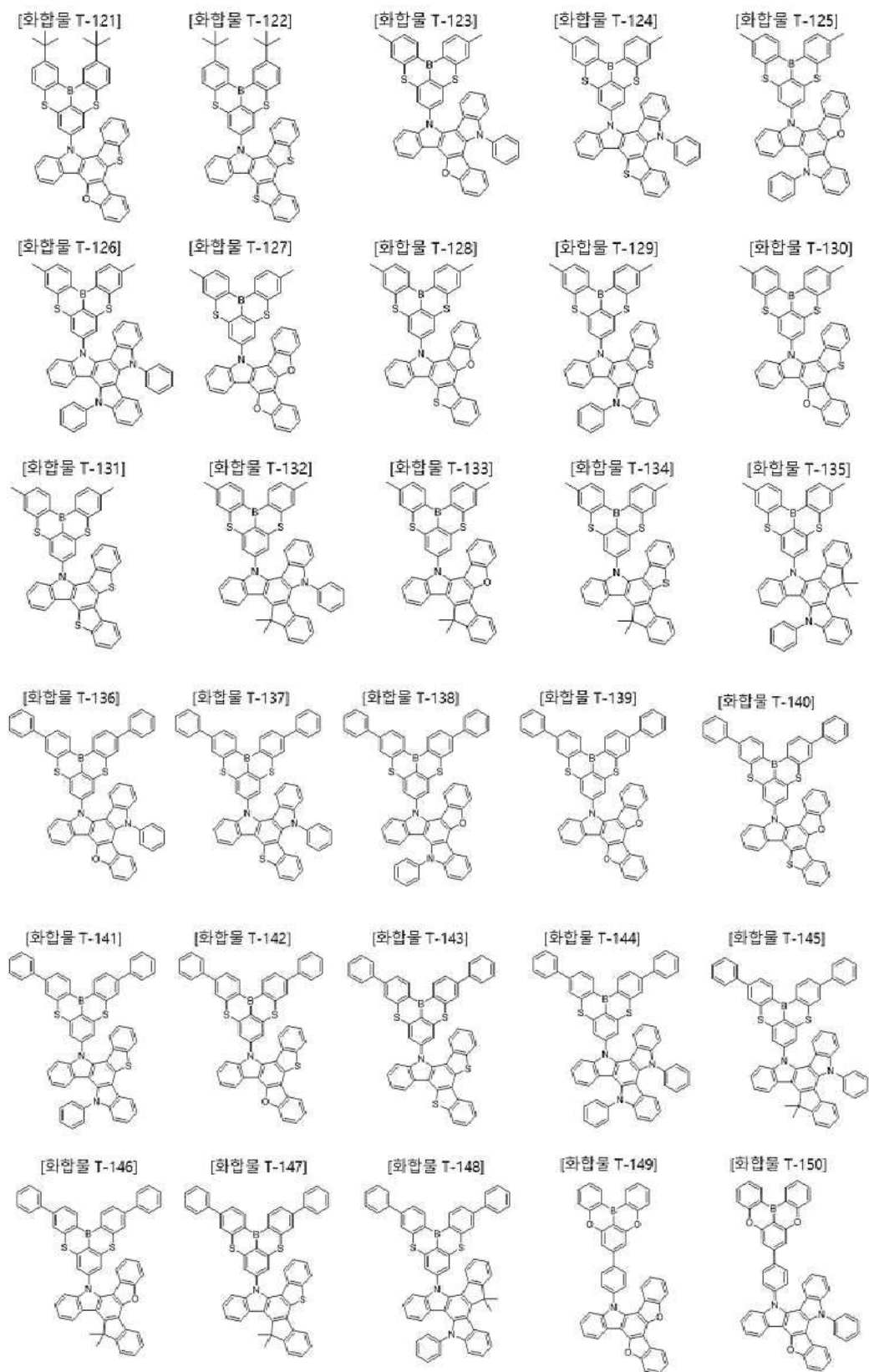


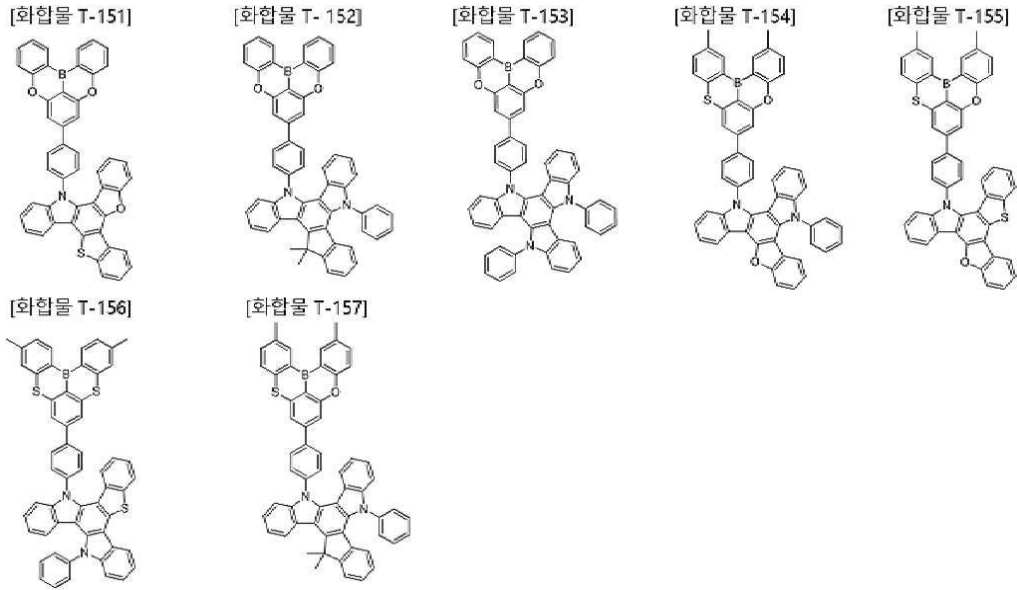
[화합물 T-119]



[화합물 T-120]







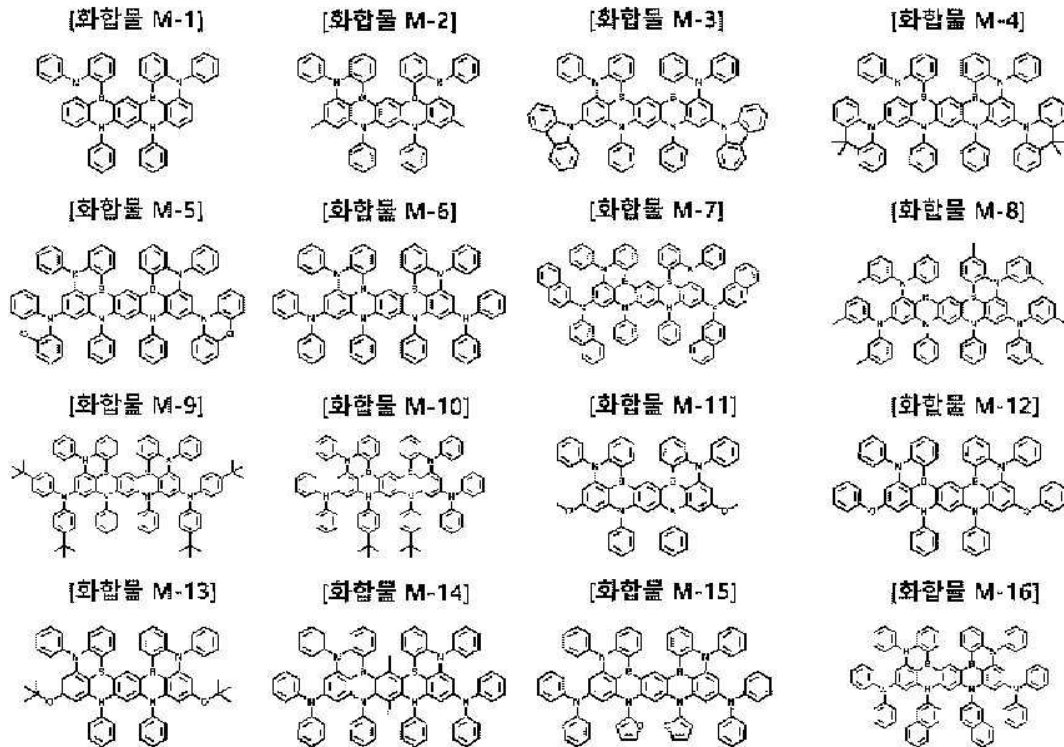
청구항 11

제 7항에 있어서,

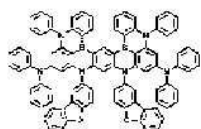
상기 발광층은 제1도펀트 화합물 및 제2도펀트 화합물을 포함하며,

상기 제2도펀트 화합물은 중금속의 인광물질을 포함하고,

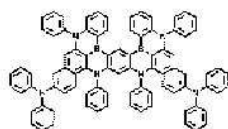
상기 제1 도펀트 화합물은 하기 화합물M-1 내지 M-94로 이루어진 군으로부터 선택되는 다중공명효과를 이용한 지연형광(MR-TADF) 화합물 또는 형광 화합물 중 어느 하나 이상을 포함하는 유기 발광소자.



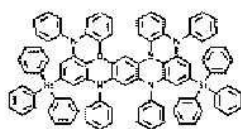
[화합물 M-17]



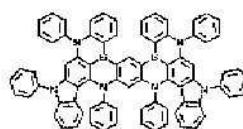
[화합물 M-18]



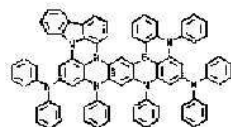
[화합물 M-19]



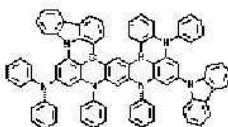
[화합물 M-20]



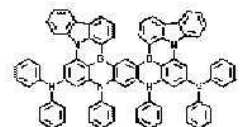
[화합물 M-21]



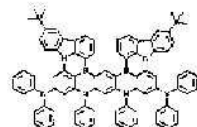
[화합물 M-22]



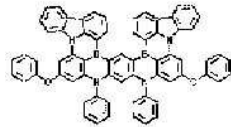
[화합물 M-23]



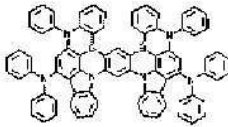
[화합물 M-24]



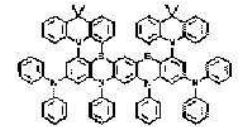
[화합물 M-25]



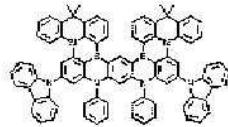
[화합물 M-26]



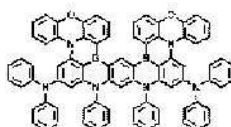
[화합물 M-27]



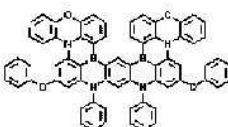
[화합물 M-28]



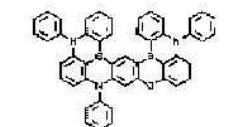
[화합물 M-29]



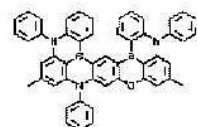
[화합물 M-30]



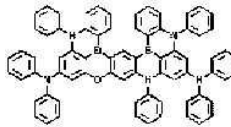
[화합물 M-31]



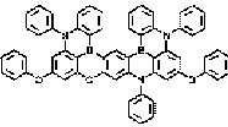
[화합물 M-32]



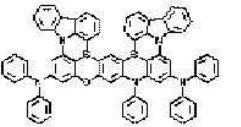
[화합물 M-33]



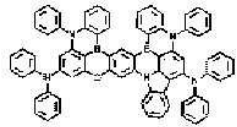
[화합물 M-34]



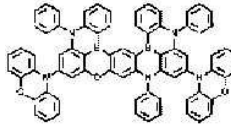
[화합물 M-35]



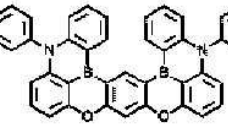
[화합물 M-36]



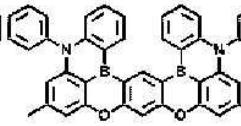
[화합물 M-37]



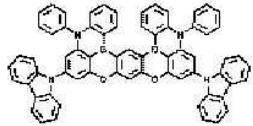
[화합물 M-38]



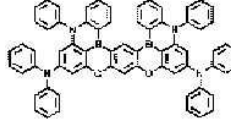
[화합물 M-39]



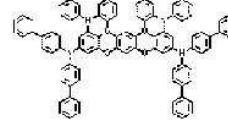
[화합물 M-40]



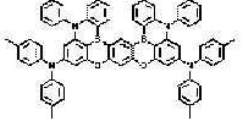
[화합물 M-41]



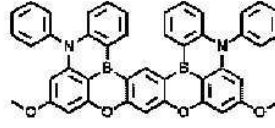
[화합물 M-42]



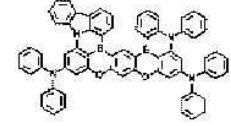
[화합물 M-43]



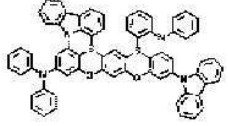
[화합물 M-44]



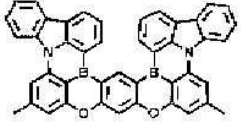
[화합물 M-45]



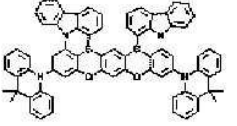
[화합물 M-46]

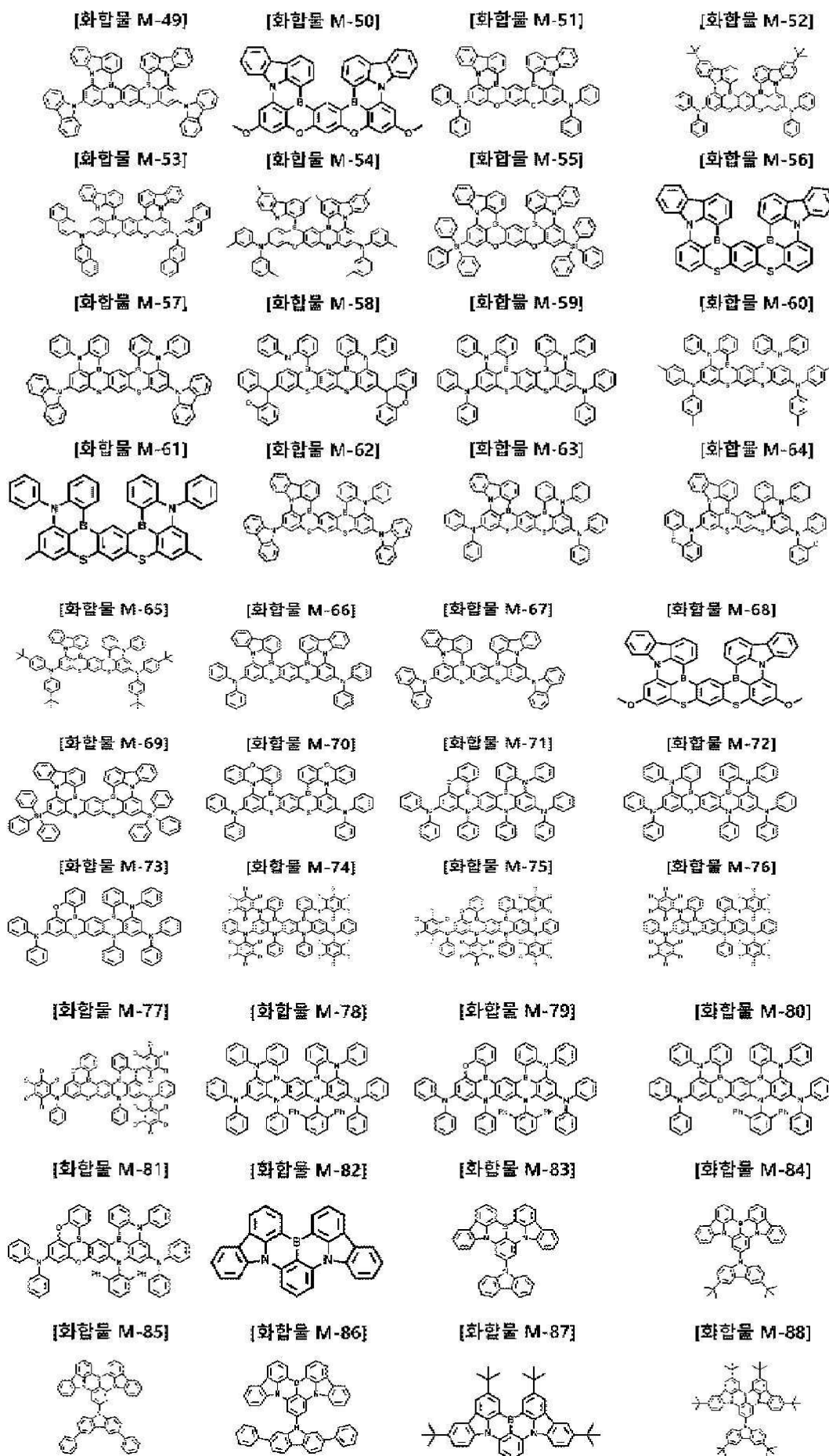


[화합물 M-47]

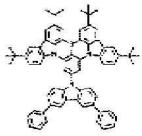


[화합물 M-48]

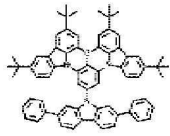




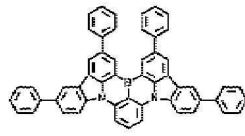
[화합물 M-89]



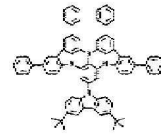
[화합물 M-90]



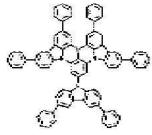
[화합물 M-91]



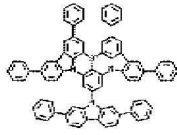
[화합물 M-92]



[화합물 M-93]



[화합물 M-94]



청구항 12

제 10항에 있어서,

상기 발광층은 제1도펀트 화합물 및 제2도펀트 화합물을 포함하며,

상기 제2도펀트 화합물은 화합물 T-1 내지 T-157로 이루어진 군으로부터 선택되는 지연형광 화합물 중 어느 하나 이상을 포함하고,

상기 제1도펀트 화합물은 다중공명효과를 이용한 지연형광(MR-TADF) 화합물 또는 형광 화합물을 포함하는 유기 발광소자.

청구항 13

제6항에 있어서,

상기 유기물층은 증착공정 또는 용액공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기 발광소자.

청구항 14

제6항의 유기 발광소자를 포함하는 표시장치.

청구항 15

제6항의 유기 발광소자를 포함하는 조명 장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 발광소자에 관한 것으로, 보다 자세하게는, 유기 발광소자의 색 순도, 효율 및 소자수명을 향상시킬 수 있는 유기 화합물과 이를 포함하는 유기 발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 발광이란 유기 물질을 이용하여 전기 에너지를 빛 에너지로 변환시키는 현상을 말한다. 이때 유기 발광 소자는 애노드와 캐소드 사이에 유기 물질을 다층으로 구성하여 전기 에너지를 가하면 빛을 발광한다. 유기 발광 소자는 효율과 안정성을 위해 다층의 유기층으로 구성되며, 기본적으로 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0003] 유기층으로 사용되는 재료는 기능에 따라 발광 재료 및 전하 수송재료로 나누어질 수 있다. 발광 재료는 발광 메커니즘에 따라 전자의 단일항 여기상태로 유래되는 형광만 이용하는 형광 재료와 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광을 이용하는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광 색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 나누어질 수 있으며, 청색을 제외한 나머지 색은 인광 재료가 산업계에 적용되어 사용 중이다. 청색 재료의 경우 수명 특성의 한계로 인해 단일항만 사용하는 형광 재료가 사용되는 중이다.

[0004] 전계 발광시 25%의 단일항과 75%의 삼중항이 발생하게 되는데, 일반 형광의 경우 75%의 삼중항은 발광하지 못하고 소멸되어 효율이 낮지만, 지연형광과 인광은 삼중항을 활용하여 외부 전계로부터 발생하는 여기자를 100% 활

용이 가능하다. 인광은 중금속을 활용하여 강한 스핀-궤도 결합(spin-orbit coupling)을 통하여 빠른 계간전이(Intersystem Crossing)를 유도하고, 이 과정은 25%의 단일항을 삼중항으로 전환시키며 전환된 삼중항과 기존 75%의 삼중항 여기자는 기저상태로 되면서 인광을 방출한다.

[0005] 지연형광의 경우는 이와 반대로 단일항과 삼중항 사이에 에너지 차이를 감소시켜 발생된 삼중항을 상온 열에너지를 이용하여 역계간전이(Reverse Intersystem Crossing)를 통해 단일항으로 전환시켜 형광이 방출된다. 이와 같은 지연형광은 인광과 달리 값비싼 중금속을 사용하지 않고 삼중항을 활용할 수 있다는 장점이 있고, 중금속으로 인한 환경 오염 문제, 채굴 시 발생하는 사회적 문제를 일으키지 않을 수 있다는 장점이 있다.

[0006] 적색, 녹색 고효율 인광 도펀트는 현재 상용화되어 있지만, 그보다 상대적으로 높은 삼중항 에너지를 갖는 청색 인광 또는 지연형광은 소자의 수명이 짧아 상용화되지 못하고 있다. 이에 대한 원인으로는 상대적으로 높은 에너지를 갖는 여기자의 소멸 현상에 의해 고에너지를 갖는 여기자 및 폴라론 형성, 전자 및 정공에 대한 안정성 문제 등을 들 수 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

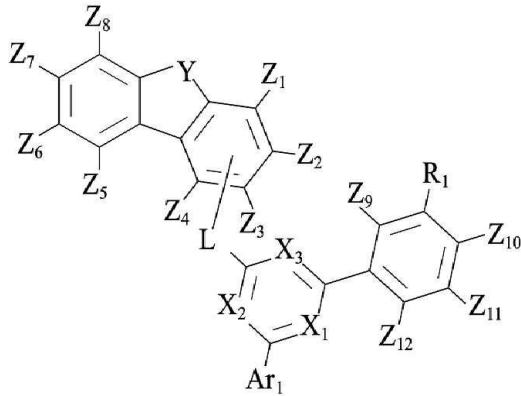
[0007] 본 발명은 종래 호스트 물질의 강한 전자 반개 특성으로 소자의 색 순도와 발광효율이 떨어지는 문제를 개선하기 위한 피리미딘 및 피리딘 계열의 유기 화합물을 제공하는 것이다.

[0008] 본 발명의 또 다른 목적은 소자의 색 순도, 발광효율 및 소자수명이 개선된 유기 발광소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009] 하기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물;

[0010] [화학식 1]



[0011]

[0012] 상기 화학식 1은,

[0013] 시아노기를 1 내지 8개 포함하고;

[0014] Z₁ 내지 Z₄ 중 어느 하나가 L이고;

[0015] L은 직접 연결되거나 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기이고;

[0016] 상기 L을 제외한 Z₁내지 Z₁₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, -C(R₂)(R₃)(R₄), 및 -Si(R₂)(R₃)(R₄); 중에서 선택되고;

[0017] X₁ 내지 X₃은 서로 독립적으로, 질소, 수소로 치환된 탄소 및 중수소로 치환된 탄소; 중에서 선택되고, 질소는 1개 또는 2개 존재하고;

[0018] Y는 산소 또는 황이고;

- [0019] Ar_1 은 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란 또는 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오펜; 이고;
- [0020] R_1 은 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 헤테로아릴기 또는 $-Si(R_2)(R_3)(R_4)$; 이고;
- [0021] 상기 R_2 내지 R_4 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 헤테로아릴기; 중에서 선택된다.

발명의 효과

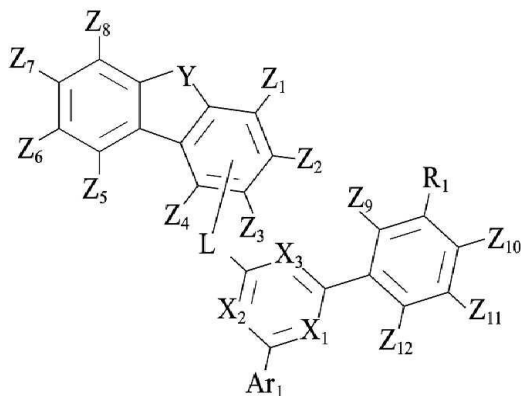
- [0022] 본 발명의 유기 화합물은 소자에서 도펀트와의 엑시플렉스(exiplex) 형성을 억제하고 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital) 에너지를 낮추어 도펀트로의 전자트랩을 억제하는 효과가 있다.
- [0023] 또한 본 발명의 유기 발광소자는 상기와 같은 효과를 통해 소자의 색 순도, 발광효율 및 수명특성이 개선되는 효과가 있다.

도면의 간단한 설명

- [0024] 도1은 공지된 트리아진 화합물, 비교예1과 본 발명의 실시예1을 호스트로 사용하였을 때, 초형광 소자의 효율을 나타낸 것이다.
- 도2는 공지된 트리아진 화합물, 비교예1과 본 발명의 실시예1을 호스트로 사용하였을 때, 초형광 소자의 전기발광 스펙트럼을 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0025] 이하, 도면을 참고하여 본 발명을 상세하게 설명한다.
- [0026] 이에 앞서, 본 명세서 및 청구범위에 사용된 용어나 단어는 통상적이거나 사전적인 의미로 한정해서 해석되어서는 아니 되며, 발명자는 그 자신의 발명을 가장 최선의 방법으로 설명하기 위해 용어의 개념을 적절하게 정의할 수 있다는 원칙에 입각하여 본 발명의 기술적 사상에 부합하는 의미와 개념으로 해석되어야 한다.
- [0027] 따라서, 본 명세서에 기재된 실시예와 도면에 도시된 구성은 본 발명의 가장 바람직한 일 실시예에 불과할 뿐이고, 본 발명의 기술적 사상을 모두 대변하는 것은 아니므로, 본 출원시점에 있어서 이들은 대체할 수 있는 다양한 균등물과 변형예들이 있을 수 있음을 이해하여야 한다.
- [0028] 본 발명의 일 측면에 따른 유기 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.
- [0029] [화학식 1]



- [0030]
- [0031] 상기 화학식 1에서, 시아노기가 1 내지 8개 포함되고;
- [0032] Z_1 내지 Z_4 중 어느 하나가 L이고;

[0033] L은 직접 연결되거나 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기이고;

[0034] 상기 L을 제외한 Z₁내지 Z₁₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, -C(R₂)(R₃)(R₄), 및 -Si(R₂)(R₃)(R₄); 중에서 선택되고,

[0035] X₁ 내지 X₃은 서로 독립적으로, 질소, 수소로 치환된 탄소 및 중수소로 치환된 탄소; 중에서 선택되고, 질소는 1 개 또는 2개 존재하고;

[0036] Y는 산소 또는 황이고;

[0037] Ar₁은 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오펜; 이고;

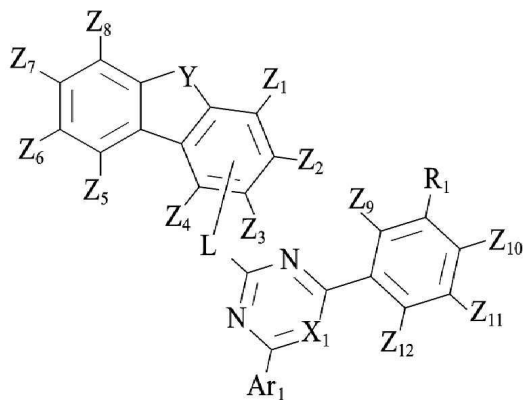
[0038] R₁은 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀헤테로아릴기 또는 -Si(R₂)(R₃)(R₄); 이고;

[0039] 상기 R₂ 내지 R₄는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기 및 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀헤테로아릴기; 중에서 선택된다.

[0040] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물은 (피리미딘 또는 피리딘), 시아노기 및 (디벤조퓨란 또는 디벤조싸이오펜)의 조합을 강한 탄소-탄소 결합을 통해 연결하여 전자 및 삼중항 상태에서 강한 결합 해리 에너지를 유도하고, 낮은 LUMO 에너지 준위를 갖는다.

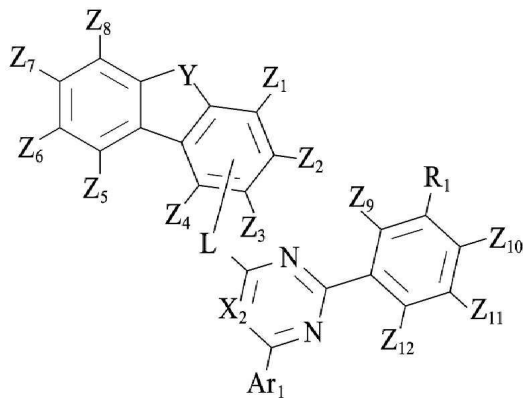
[0041] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물의 중심 분자가 피리미딘일 수 있고, 다음과 같이 화학식 1-1, 1-2 및 1-3 중 하나로 표시될 수 있다.

[0042] [화학식 1-1]



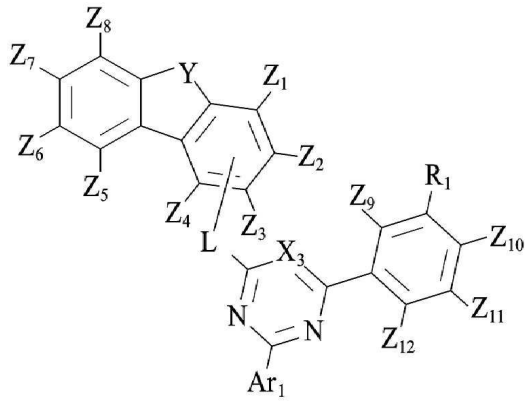
[0043]

[0044] [화학식 1-2]



[0045]

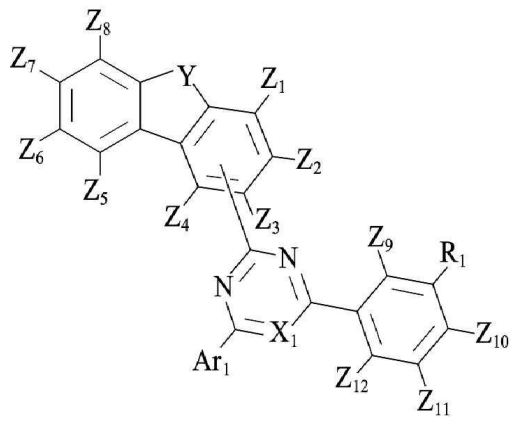
[0046] [화학식 1-3]



[0047]

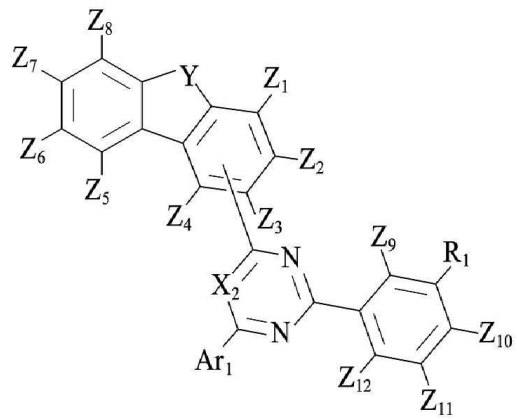
[0048] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물의 중심 분자가 피리미딘이고, 상기 피리미딘이 디벤조퓨란 또는 디벤조싸이오펜에 직접 연결되어 있을 수 있고, 다음과 같이 화학식 1-4, 1-5 및 1-6 중 하나로 표시될 수 있다.

[0049] [화학식 1-4]



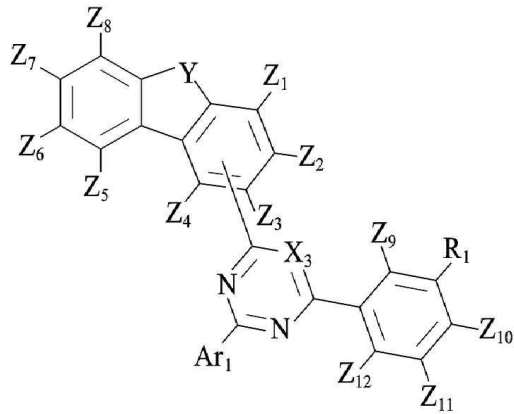
[0050]

[0051] [화학식 1-5]



[0052]

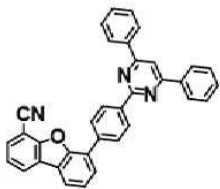
[0053] [화학식 1-6]



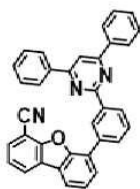
[0054]

[0055] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물은 구체적인 예로, 하기 화합물 1-1 내지 1-105 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있다.

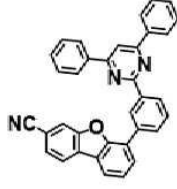
[화합물 1-1]



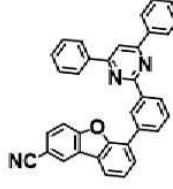
[화합물 1-2]



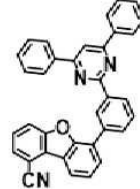
[화합물 1-3]



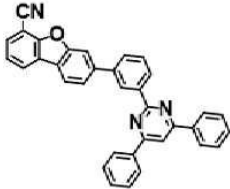
[화합물 1-4]



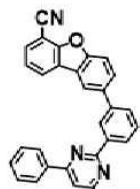
[화합물 1-5]



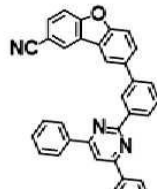
[화합물 1-6]



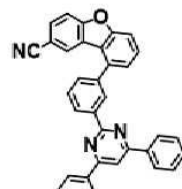
[화합물 1-7]



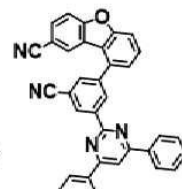
[화합물 1-8]



[화합물 1-9]

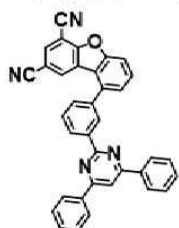


[화합물 1-10]

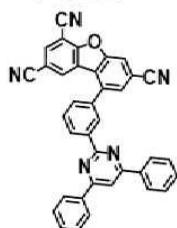


[0056]

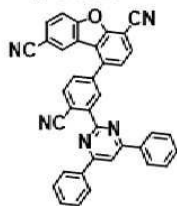
[화합물 1-11]



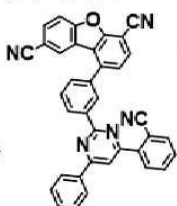
[화합물 1-12]



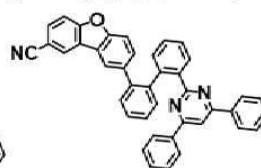
[화합물 1-13]



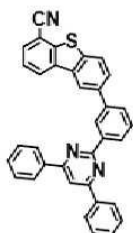
[화합물 1-14]



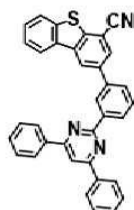
[화합물 1-15]



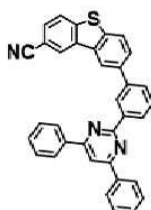
[화합물 1-16]



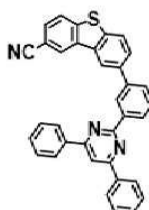
[화합물 1-17]



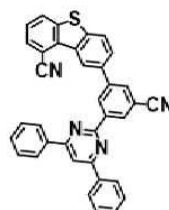
[화합물 1-18]



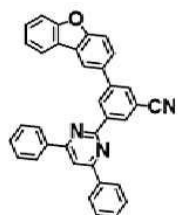
[화합물 1-19]



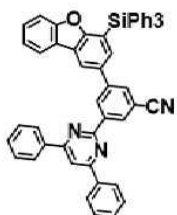
[화합물 1-20]



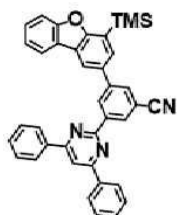
[화합물 1-21]



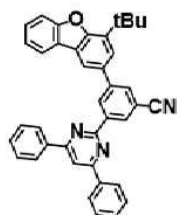
[화합물 1-22]



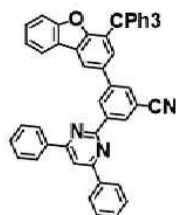
[화합물 1-23]



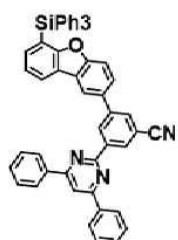
[화합물 1-24]



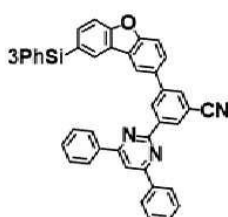
[화합물 1-25]



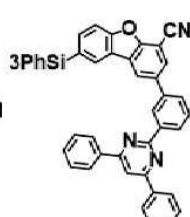
[화합물 1-26]



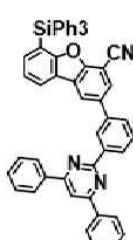
[화합물 1-27]



[화합물 1-28]



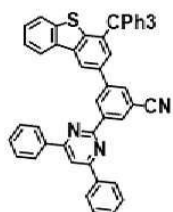
[화합물 1-29]



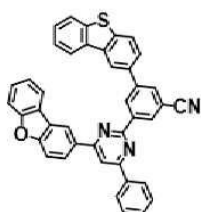
[화합물 1-30]



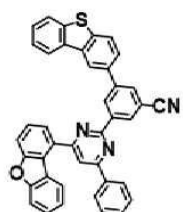
[화합물 1-31]



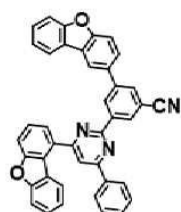
[화합물 1-32]



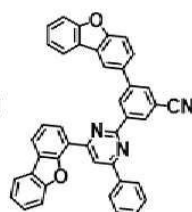
[화합물 1-33]



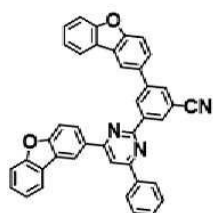
[화합물 1-34]



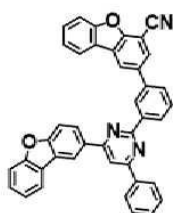
[화합물 1-35]



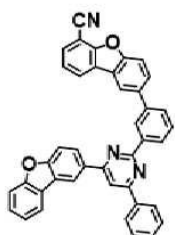
[화합물 1-36]



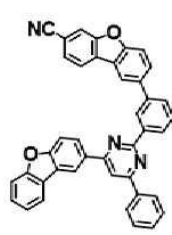
[화합물 1-37]



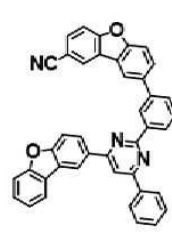
[화합물 1-38]



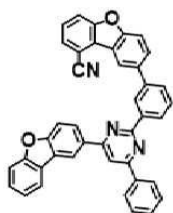
[화합물 1-39]



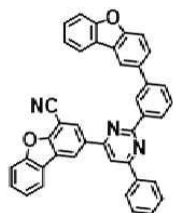
[화합물 1-40]



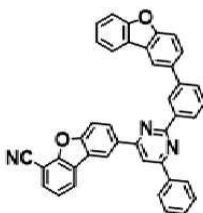
[화합물 1-41]



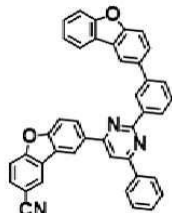
[화합물 1-42]



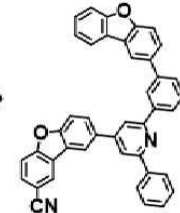
[화합물 1-43]



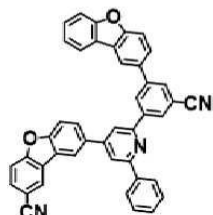
[화합물 1-44]



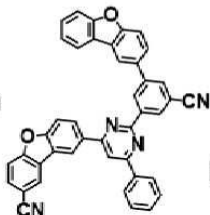
[화합물 1-45]



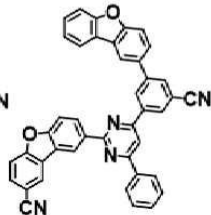
[화합물 1-46]



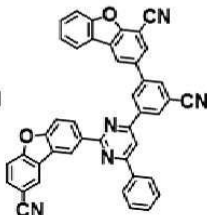
[화합물 1-47]



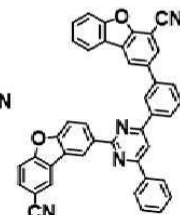
[화합물 1-48]



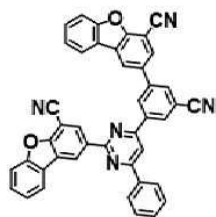
[화합물 1-49]



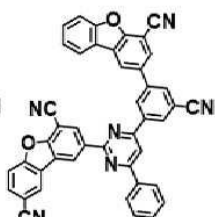
[화합물 1-50]



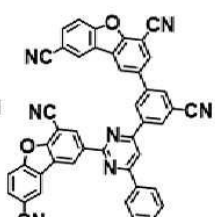
[화합물 1-51]



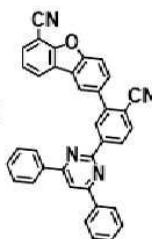
[화합물 1-52]



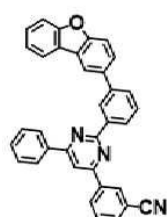
[화합물 1-53]



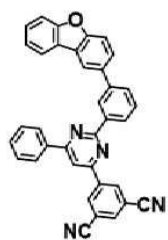
[화합물 1-54]



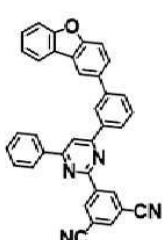
[화합물 1-55]



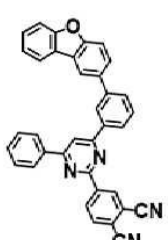
[화합물 1-56]



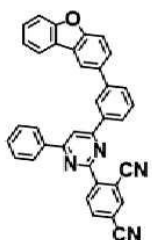
[화합물 1-57]



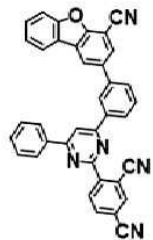
[화합물 1-58]



[화합물 1-59]

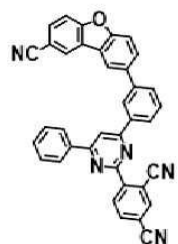


[화합물 1-60]

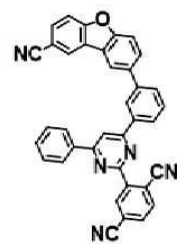


[0061]

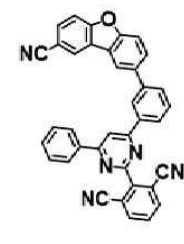
[화합물 1-61]



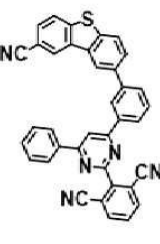
[화합물 1-62]



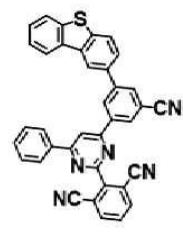
[화합물 1-63]



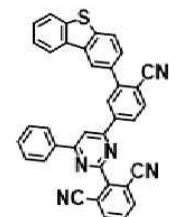
[화합물 1-64]



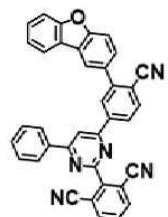
[화합물 1-65]



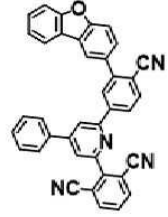
[화합물 1-66]



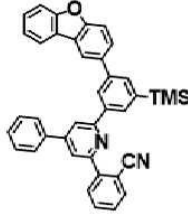
[화합물 1-67]



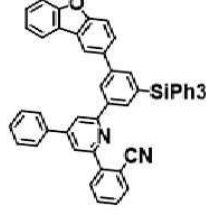
[화합물 1-68]



[화합물 1-69]

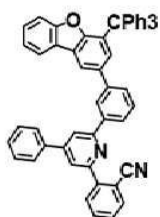


[화합물 1-70]

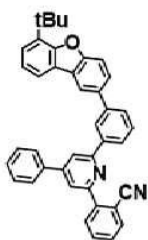


[0062]

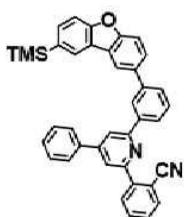
[화합물 1-71]



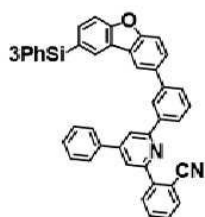
[화합물 1-72]



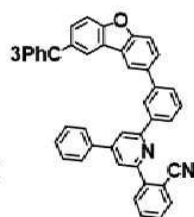
[화합물 1-73]



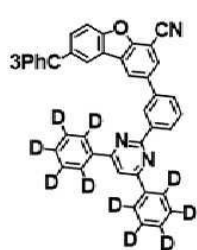
[화합물 1-74]



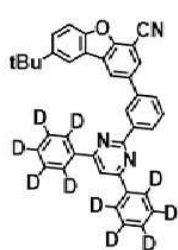
[화합물 1-75]



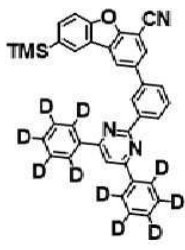
[화합물 1-76]



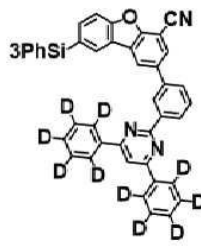
[화합물 1-77]



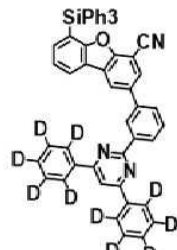
[화합물 1-78]



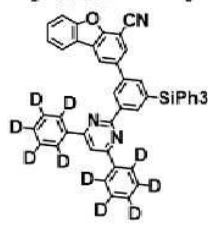
[화합물 1-79]



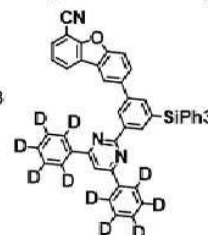
[화합물 1-80]



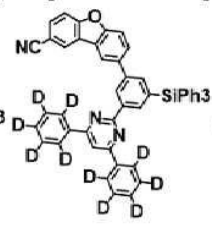
[화합물 1-81]



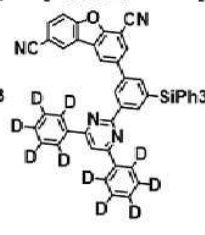
[화합물 1-82]



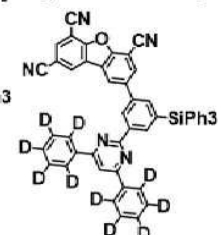
[화합물 1-83]



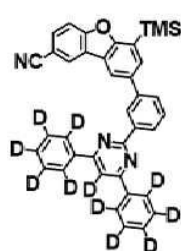
[화합물 1-84]



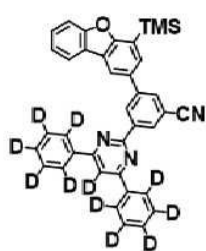
[화합물 1-85]



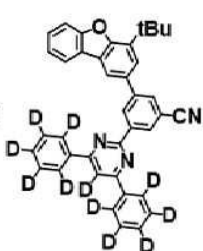
[화합물 1-86]



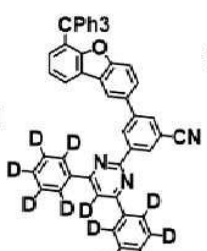
[화합물 1-87]



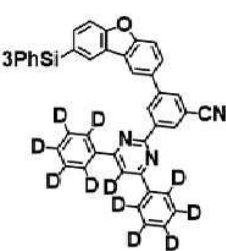
[화합물 1-88]



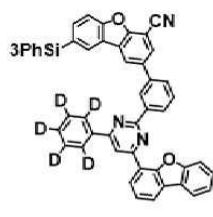
[화합물 1-89]



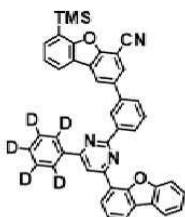
[화합물 1-90]



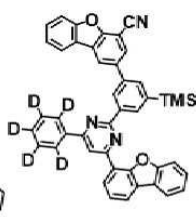
[화합물 1-91]



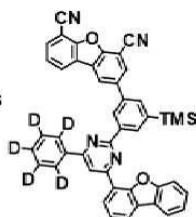
[화합물 1-92]



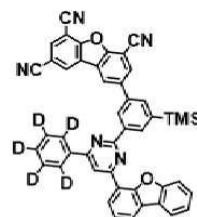
[화합물 1-93]



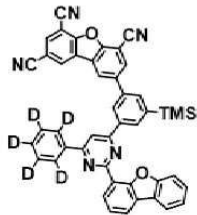
[화합물 1-94]



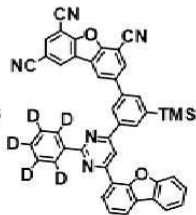
[화합물 1-95]



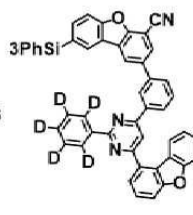
[화합물 1-96]



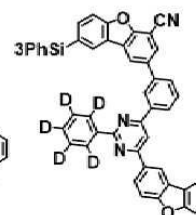
[화합물 1-97]



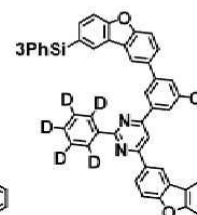
[화합물 1-98]



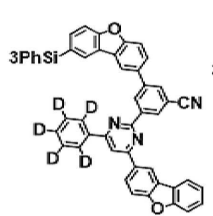
[화합물 1-99]



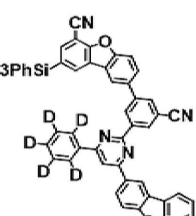
[화합물 1-100]



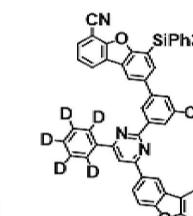
[화합물 1-101]



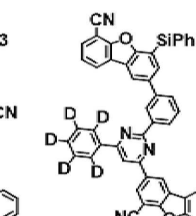
[화합물 1-102]



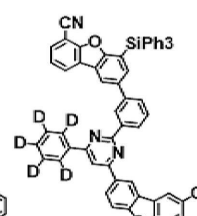
[화합물 1-103]



[화합물 1-104]

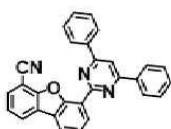


[화합물 1-105]

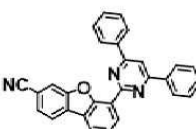


상기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물은 구체적인 예로, 하기 화합물 2-1 내지 2-113 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있다.

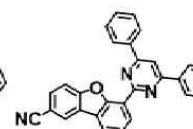
[화합물 2-1]



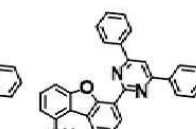
[화합물 2-2]



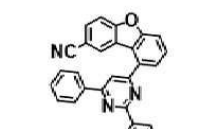
[화합물 2-3]



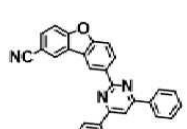
[화합물 2-4]



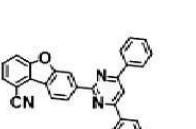
[화합물 2-5]



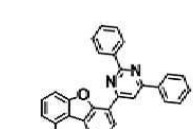
[화합물 2-6]



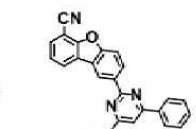
[화합물 2-7]



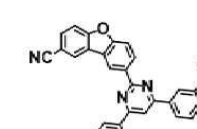
[화합물 2-8]



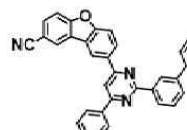
[화합물 2-9]



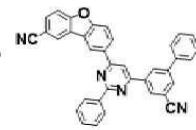
[화합물 2-10]



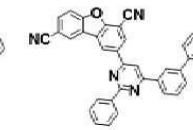
[화합물 2-11]



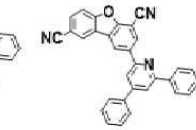
[화합물 2-12]



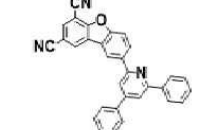
[화합물 2-13]

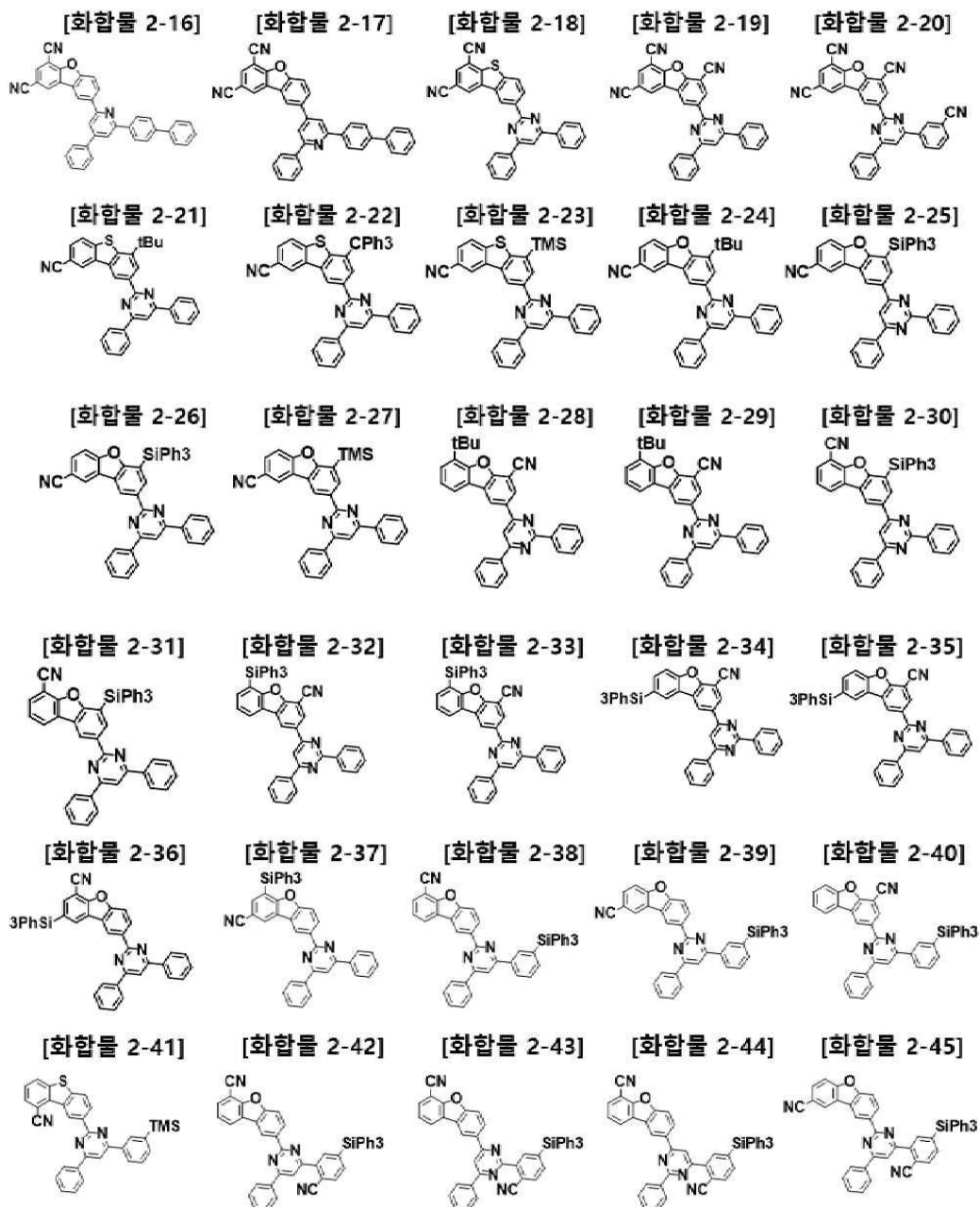


[화합물 2-14]



[화합물 2-15]

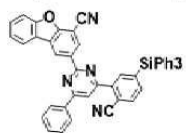




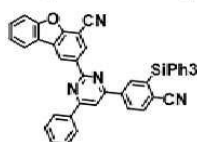
[0069]

[0070]

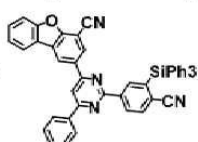
[화합물 2-46]



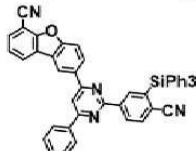
[화합물 2-47]



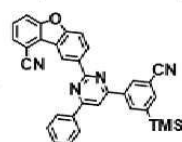
[화합물 2-48]



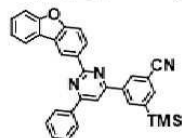
[화합물 2-49]



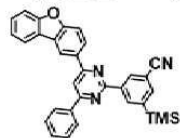
[화합물 2-50]



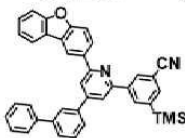
[화합물 2-51]



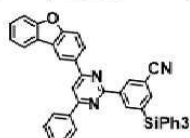
[화합물 2-52]



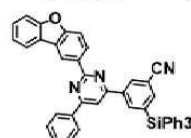
[화합물 2-53]



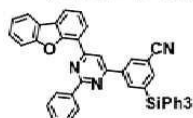
[화합물 2-54]



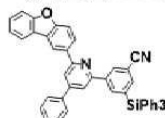
[화합물 2-55]



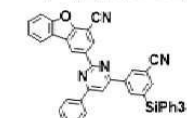
[화합물 2-56]



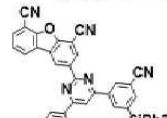
[화합물 2-57]



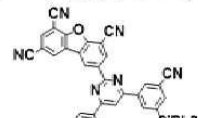
[화합물 2-58]



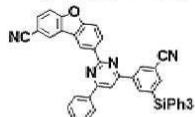
[화합물 2-59]



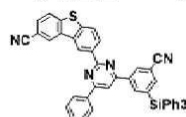
[화합물 2-60]



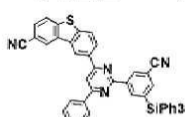
[화합물 2-61]



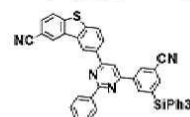
[화합물 2-62]



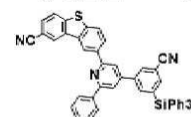
[화합물 2-63]



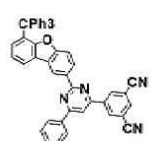
[화합물 2-64]



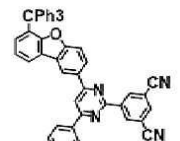
[화합물 2-65]



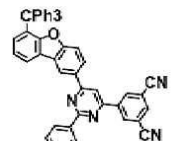
[화합물 2-66]



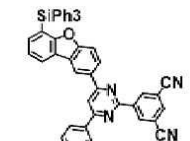
[화합물 2-67]



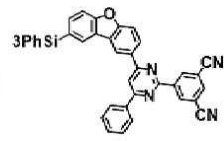
[화합물 2-68]



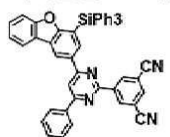
[화합물 2-69]



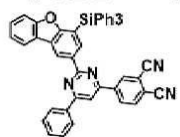
[화합물 2-70]



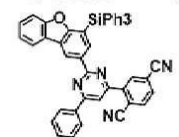
[화합물 2-71]



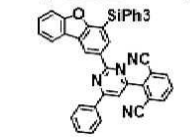
[화합물 2-72]



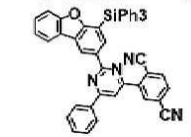
[화합물 2-73]



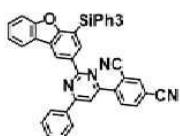
[화합물 2-74]



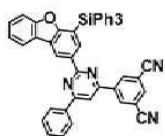
[화합물 2-75]



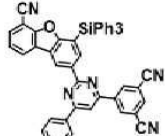
[화합물 2-76]



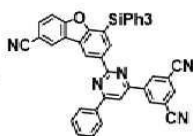
[화합물 2-77]



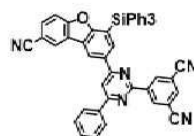
[화합물 2-78]



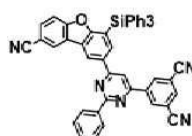
[화합물 2-79]



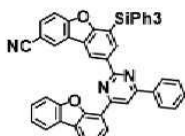
[화합물 2-80]



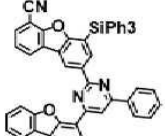
[화합물 2-81]



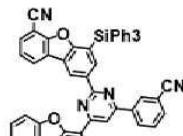
[화합물 2-82]



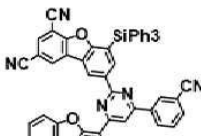
[화합물 2-83]



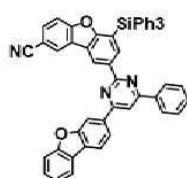
[화합물 2-84]



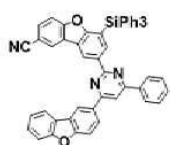
[화합물 2-85]



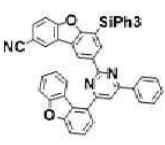
[화합물 2-86]



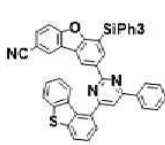
[화합물 2-87]



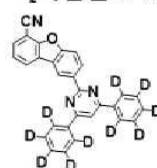
[화합물 2-88]



[화합물 2-89]

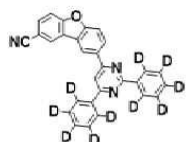


[화합물 2-90]

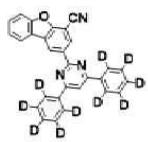


[0073]

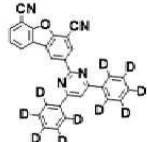
[화합물 2-91]



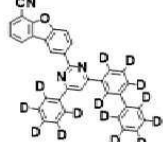
[화합물 2-92]



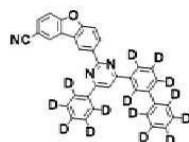
[화합물 2-93]



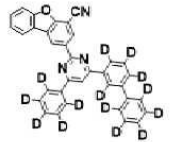
[화합물 2-94]



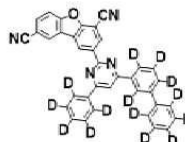
[화합물 2-95]



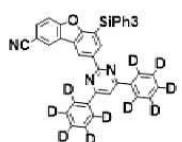
[화합물 2-96]



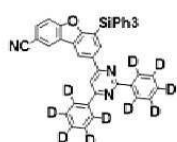
[화합물 2-97]



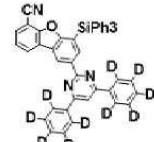
[화합물 2-98]



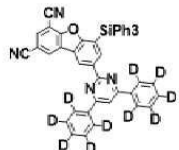
[화합물 2-99]



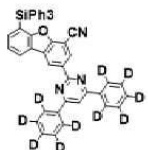
[화합물 2-100]



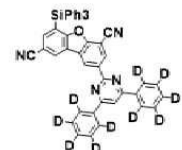
[화합물 2-101]



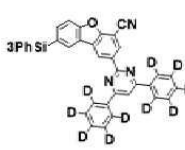
[화합물 2-102]



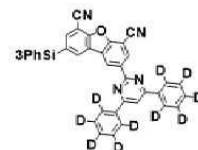
[화합물 2-103]



[화합물 2-104]

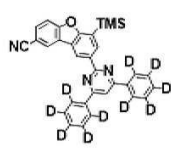


[화합물 2-105]

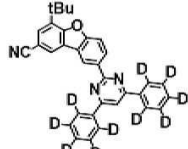


[0074]

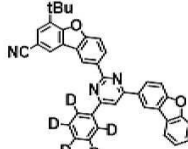
[화합물 2-106]



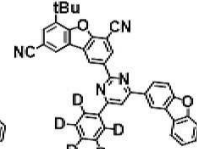
[화합물 2-107]



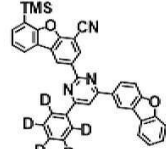
[화합물 2-108]



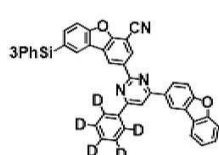
[화합물 2-109]



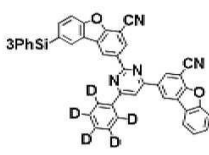
[화합물 2-110]



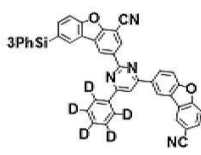
[화합물 2-111]



[화합물 2-112]

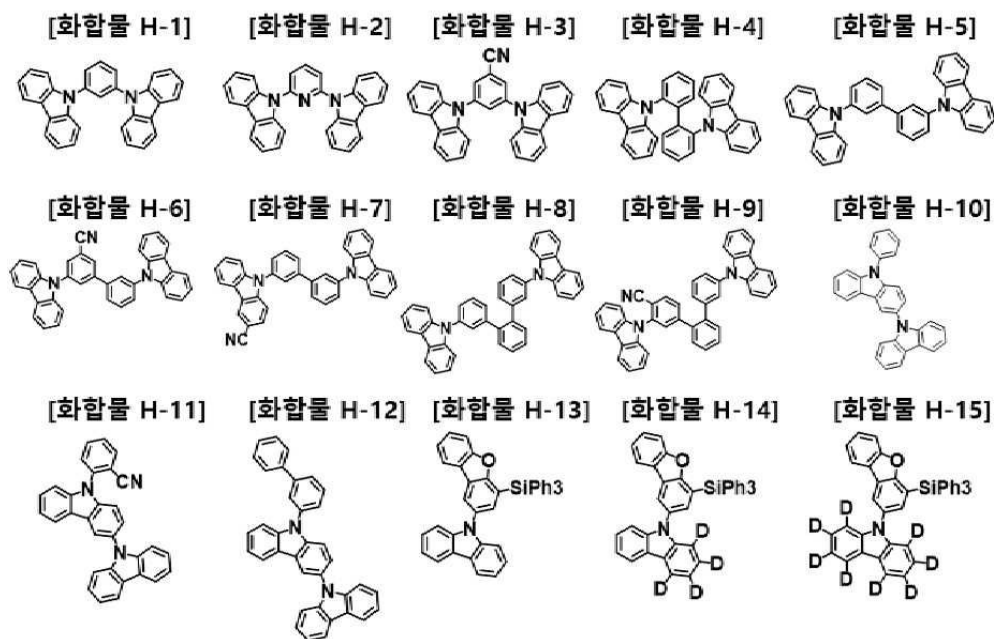


[화합물 2-113]



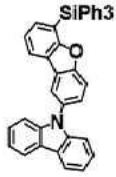
[0075]

- [0077] 본 발명의 다른 일 측면에 따른 유기 발광소자는 제1전극; 상기 제1전극과 대향하여 구비된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기물층;을 포함하고, 상기 유기물층은 상기 본 발명에 따른 유기 화합물을 1종 이상 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0078] 상기 유기물층은 증착공정 또는 용액공정에 의해 형성될 수 있다.
- [0079] 상기 유기물층은 단층구조일 수 있으나, 바람직하게는 다층구조일 수 있고, 구체적으로 유기물층은 전자주입층(EIL), 전자수송층(ETL), 정공주입층(HIL), 정공수송층(HTL), 전자저지층(EBL), 정공저지층(HBL) 및 발광층(EML)을 포함할 수 있으며, 바람직하게는 상기 유기 화합물이 상기 발광층(EML)의 호스트(HOST)일 수 있으며, 더욱 바람직하게는 전자수송용(ET, Electron Transporting) 호스트일 수 있다.
- [0080] 소자의 효율과 안정성을 위해 호스트 자체의 안정성이 필요한데, 이를 위해 호스트의 전자 및 삼중항에 대한 안정성이 중요하다. 가장 약한 결합 에너지를 갖는 C-N 단일결합을 갖는다면, 해당 결합의 낮은 결합해리 에너지가 문제될 수 있고, 종래 LUMO 에너지를 낮추기 위해 사용되었던 트리아진은, 강한 전자 받개 특성이 있어 도펀트와의 엑시플렉스(exiplex, excited state charge transfer complex)를 형성하여 소자의 색 순도와 발광효율을 낮추는 현상을 야기하였다.
- [0081] 따라서 호스트의 C-N 단일결합 및 트리아진의 활용을 시아노기, (피리미딘 또는 피리딘) 및 (디벤조퓨란 또는 디벤조싸이오펜)의 조합을 통해, 강한 탄소-탄소 결합으로 연결하고, 전자 및 삼중항 상태에서 강한 결합 해리 에너지를 유도하며, 호스트는 낮은 LUMO 에너지 준위를 갖고 높은 삼중항 에너지를 갖게 되어 청색 고효율 소자의 안정성과 발광효율이 향상될 수 있다.
- [0082] 종래 청색 인광 또는 지연형광 소자는 소자의 수명이 짧아 상용화되지 못하고 있는데, 가장 문제가 되는 것은 도펀트로의 전자트랩 현상이다. 상기 유기 화합물이 전자수송용 호스트로 사용될 경우, LUMO 에너지 준위가 도펀트보다 낮아 도펀트 대신 전자를 운송 시켜줄 수 있어, 도펀트로의 전자 트랩 현상을 감소시켜 열화 가능성을 낮춰 줄 수 있으며, 동시에 삼중항 에너지가 높아 도펀트의 삼중항 에너지가 호스트로 이동할 수 없게 하여 효율 감소를 방지할 수 있다.
- [0083] 상기 발광층은 정공수송용(HT, Hole Transporting) 호스트 화합물을 더 포함할 수 있으며, 이때 정공수송용 호스트 화합물은 구체적인 예로 하기 화합물 H-1 내지 H-44중 어느 하나 이상을 포함할 수 있다.

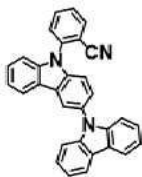


[0084]

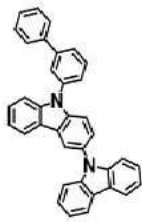
[화합물 H-16]



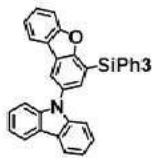
[화합물 H-17]



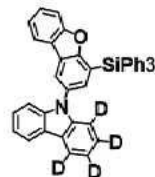
[화합물 H-18]



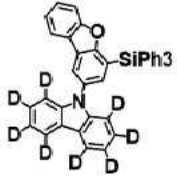
[화합물 H-19]



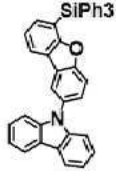
[화합물 H-20]



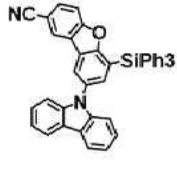
[화합물 H-21]



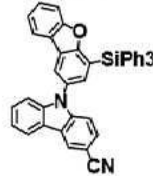
[화합물 H-22]



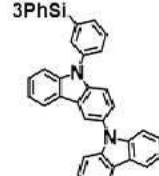
[화합물 H-23]



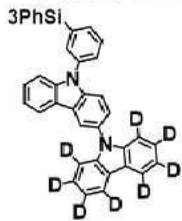
[화합물 H-24]



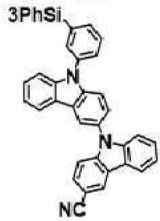
[화합물 H-25]



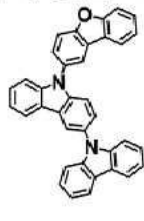
[화합물 H-26]



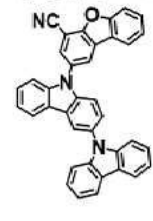
[화합물 H-27]



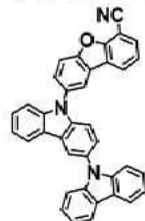
[화합물 H-28]



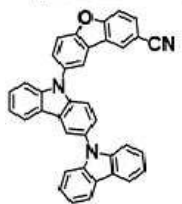
[화합물 H-29]



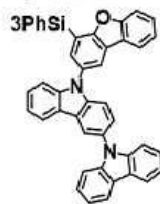
[화합물 H-30]



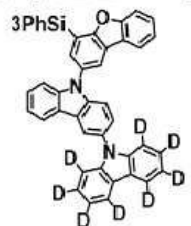
[화합물 H-31]



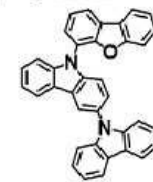
[화합물 H-32]



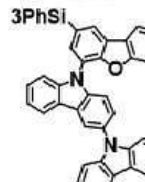
[화합물 H-33]



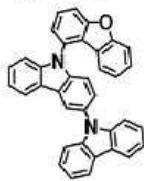
[화합물 H-34]



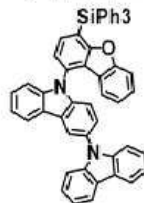
[화합물 H-35]



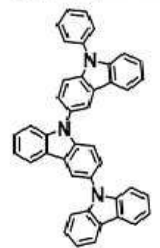
[화합물 H-36]



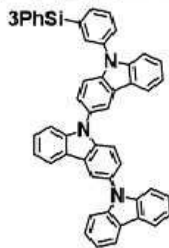
[화합물 H-37]



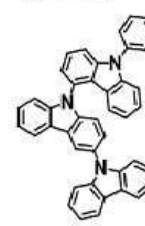
[화합물 H-38]



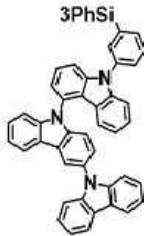
[화합물 H-39]



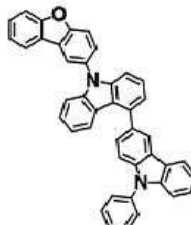
[화합물 H-40]



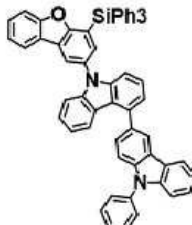
[화합물 H-41]



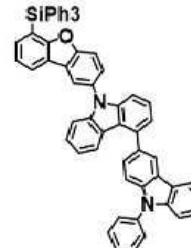
[화합물 H-42]



[화합물 H-43]



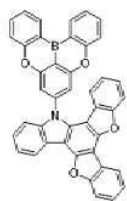
[화합물 H-44]



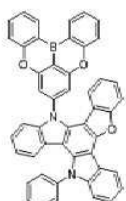
상기 정공수송용 호스트는 소자 내 전하 균형을 위해 상기 전자수송용 호스트와 함께 사용될 수 있고, 상기 두 가지 호스트의 동시 사용을 통해 소자의 효율, 수명특성 및 안정성을 개선할 수 있다.

상기 발광층은 지연현광(TADF) 화합물을 포함할 수 있으며, 이때 지연현광 화합물의 구체적인 예로 하기 화합물 T-1 내지 T-157 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있다.

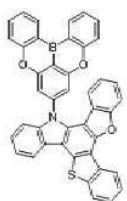
[화합물 T-1]



[화합물 T-2]



[화합물 T-3]



[화합물 T-4]



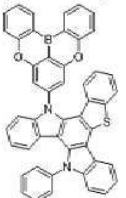
[화합물 T-5]



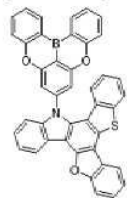
[화합물 T-6]



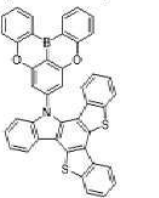
[화합물 T-7]



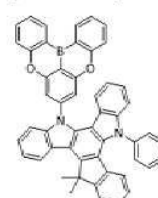
[화합물 T-8]



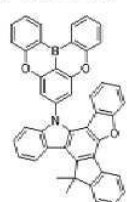
[화합물 T-9]



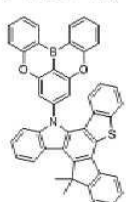
[화합물 T-10]



[화합물 T-11]



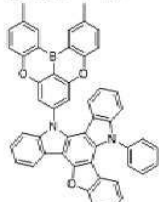
[화합물 T-12]



[화합물 T-13]



[화합물 T-14]



[화합물 T-15]



[0089]

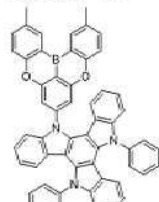
[화합물 T-16]



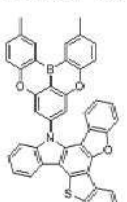
[화합물 T-17]



[화합물 T-18]



[화합물 T-19]



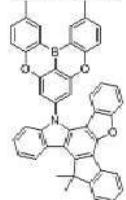
[화합물 T-20]



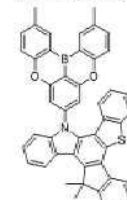
[화합물 T-21]



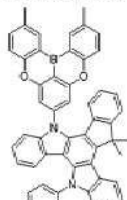
[화합물 T-22]



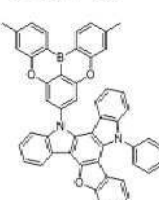
[화합물 T-23]



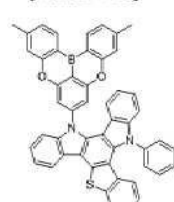
[화합물 T-24]



[화합물 T-25]



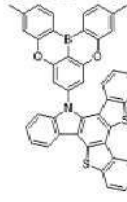
[화합물 T-26]



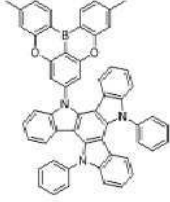
[화합물 T-27]



[화합물 T-28]



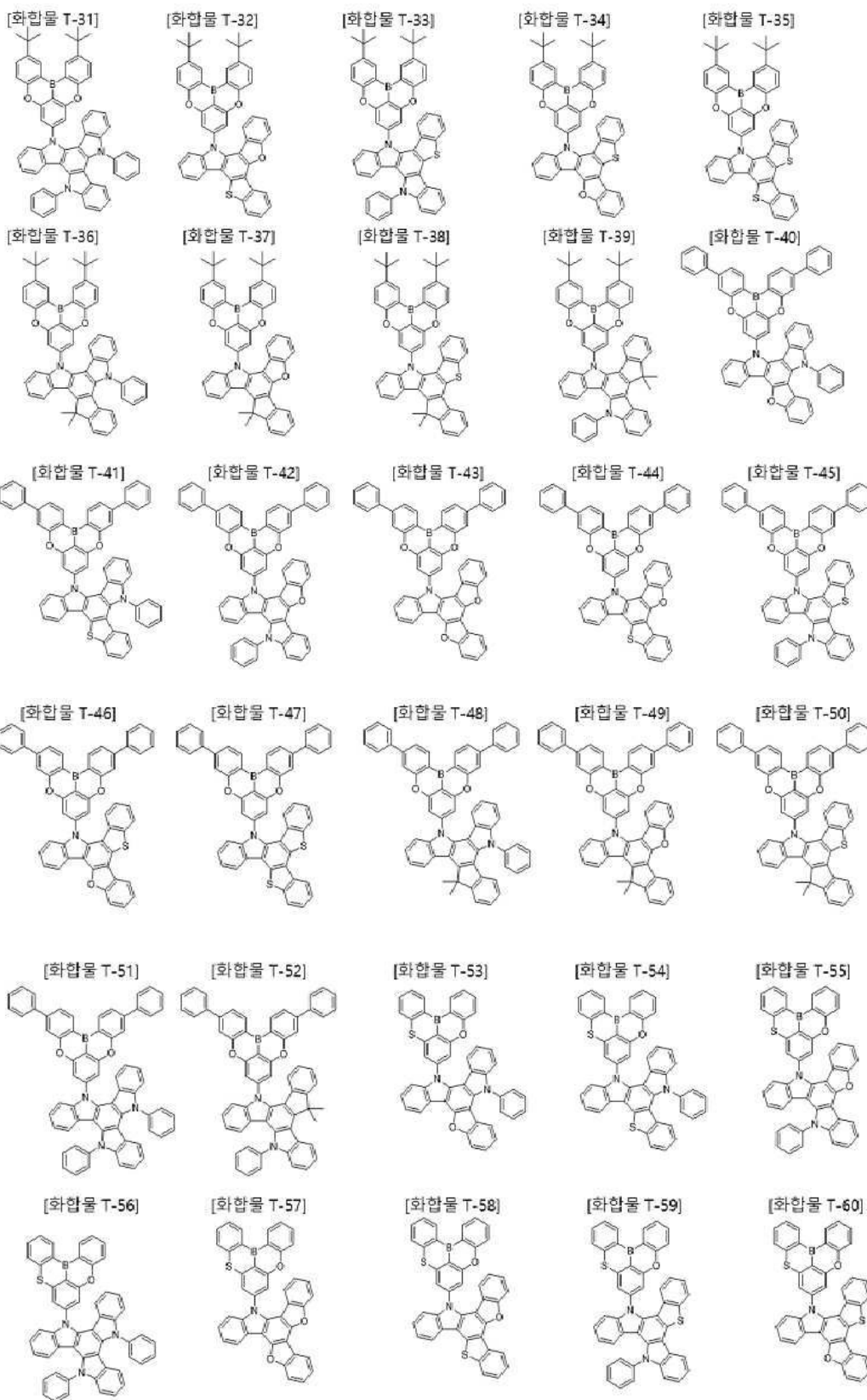
[화합물 T-29]



[화합물 T-30]



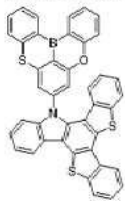
[0090]



[0091]

[0092]

[화합물 T-61]



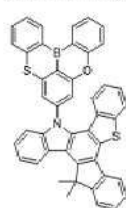
[화합물 T-62]



[화합물 T-63]



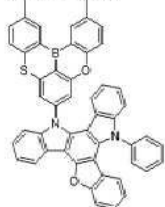
[화합물 T-64]



[화합물 T-65]



[화합물 T-66]



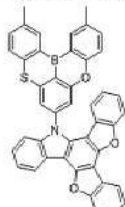
[화합물 T-67]



[화합물 T-68]



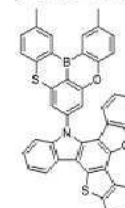
[화합물 T-69]



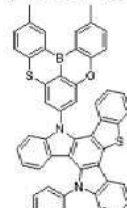
[화합물 T-70]



[화합물 T-71]



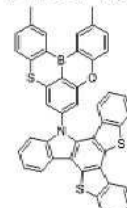
[화합물 T-72]



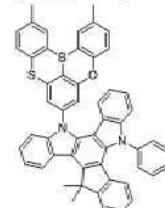
[화합물 T-73]



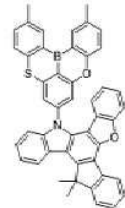
[화합물 T-74]



[화합물 T-75]



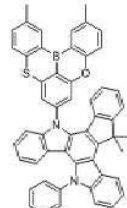
[화합물 T-76]



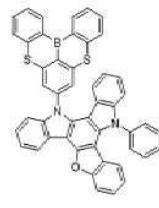
[화합물 T-77]



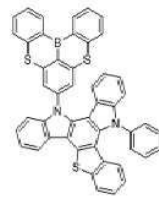
[화합물 T-78]



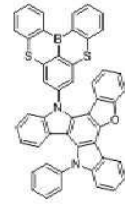
[화합물 T-79]



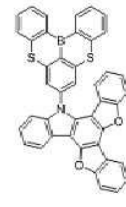
[화합물 T-80]



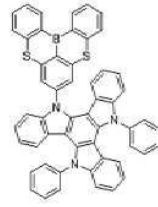
[화합물 T-81]



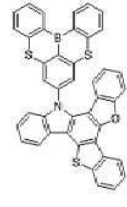
[화합물 T-82]



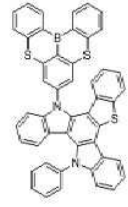
[화합물 T-83]



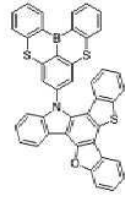
[화합물 T-84]



[화합물 T-85]



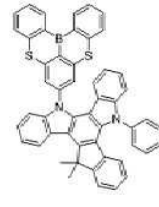
[화합물 T-86]



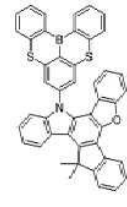
[화합물 T-87]



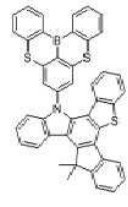
[화합물 T-88]



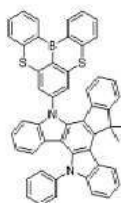
[화합물 T-89]



[화합물 T-90]



[화합물 T-91]



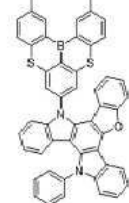
[화합물 T-92]



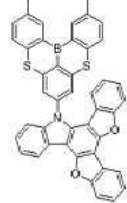
[화합물 T-93]



[화합물 T-94]



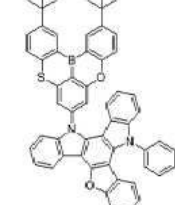
[화합물 T-95]



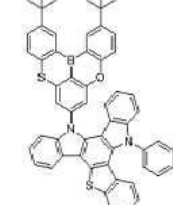
[화합물 T-96]



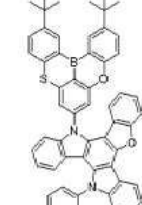
[화합물 T-97]



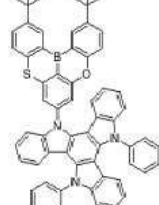
[화합물 T-98]



[화합물 T-99]



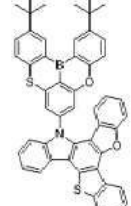
[화합물 T-100]



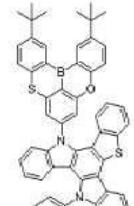
[화합물 T-101]



[화합물 T-102]



[화합물 T-103]



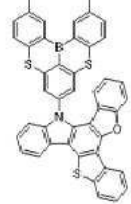
[화합물 T-104]



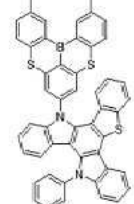
[화합물 T-105]



[화합물 T-106]



[화합물 T-107]



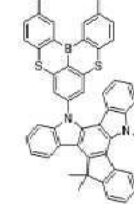
[화합물 T-108]



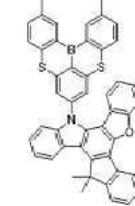
[화합물 T-109]



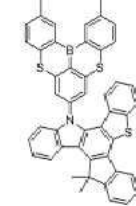
[화합물 T-110]



[화합물 T-111]



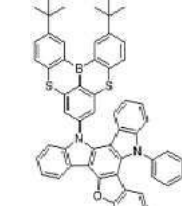
[화합물 T-112]



[화합물 T-113]



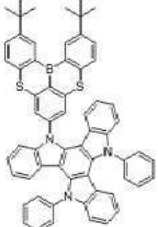
[화합물 T-114]



[화합물 T-115]



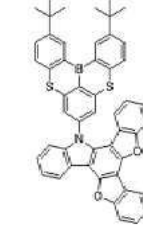
[화합물 T-116]



[화합물 T-117]



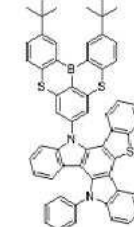
[화합물 T-118]

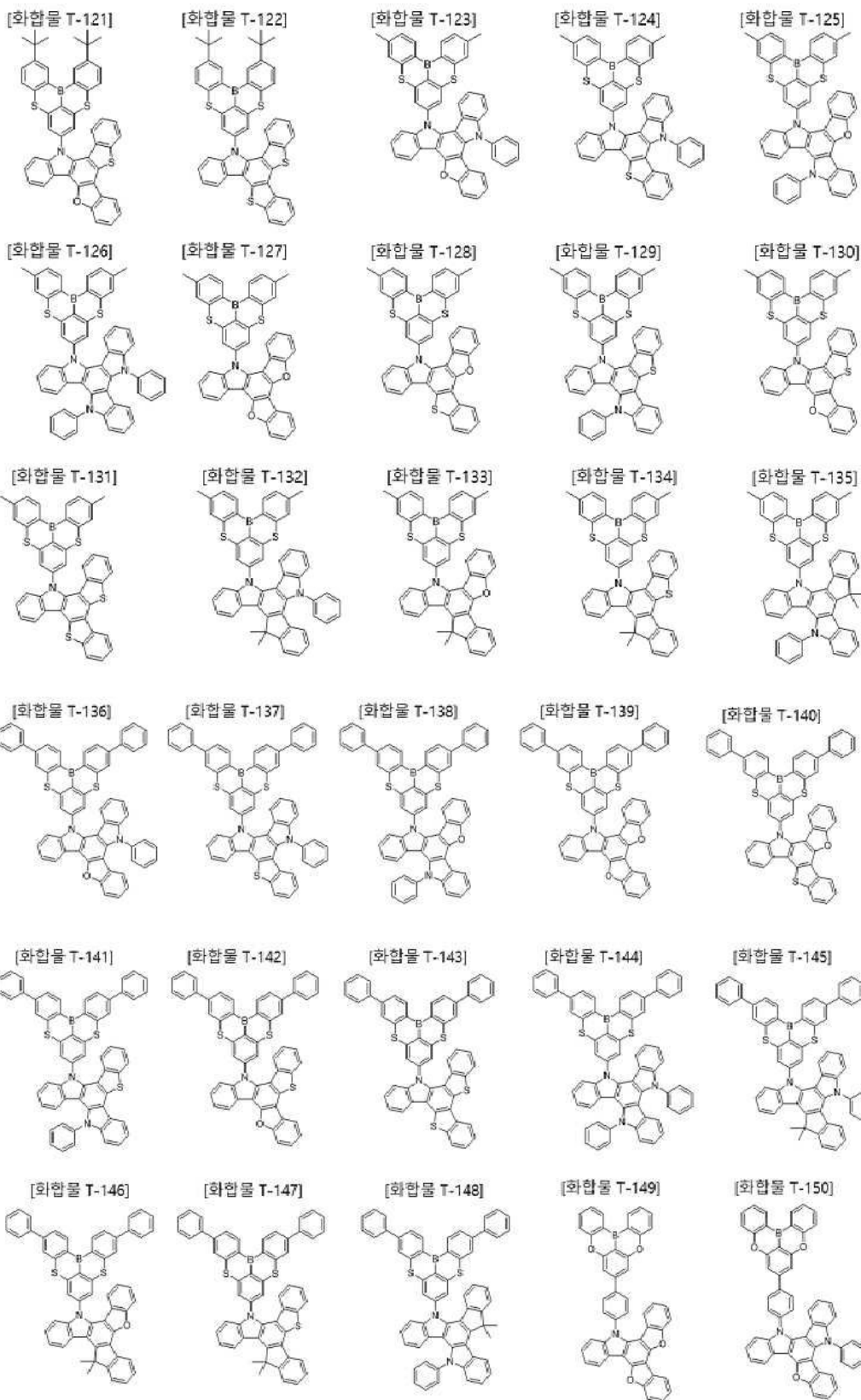


[화합물 T-119]



[화합물 T-120]

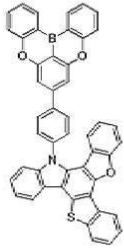




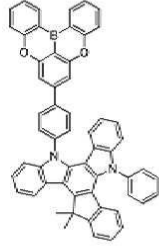
[0097]

[0098]

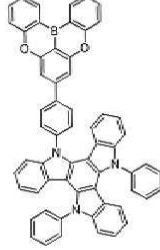
[화합물 T-151]



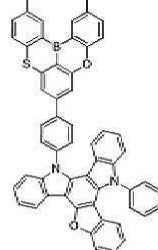
[화합물 T-152]



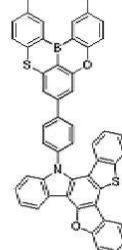
[화합물 T-153]



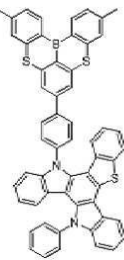
[화합물 T-154]



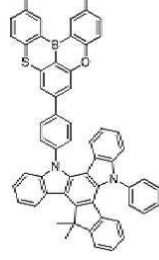
[화합물 T-155]



[화합물 T-156]



[화합물 T-157]



[0099]

상기 지연형광 화합물의 합성법은 공개번호 10-2022-0073537 및 10-2019-0119701에 상세히 제시되어 있다.

[0100]

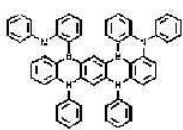
상기 유기물층의 발광층은 호스트 화합물, 증감제(sensitizer)인 제2 도펀트 화합물, 에미터(emitter)인 제1도펀트 화합물을 포함할 수 있고, 상기 지연형광 화합물은 제1 또는 제2도펀트 화합물로 모두 사용될 수 있다.

[0101]

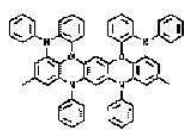
[0102]

상기 발광층은 다중공명구조를 갖는 지연형광(TADF) 화합물 및 파이렌 계열 형광 도펀트를 포함할 수 있으며, 이때 다중공명구조를 갖는 지연형광(TADF) 화합물은 구체적인 예로 하기 화합물 M-1 내지 M-94 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있다.

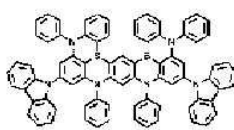
[화합물 M-1]



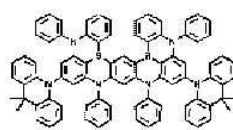
[화합물 M-2]



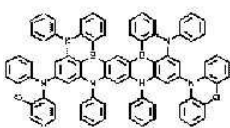
[화합물 M-3]



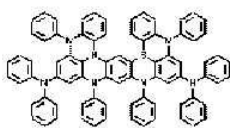
[화합물 M-4]



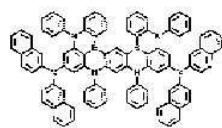
[화합물 M-5]



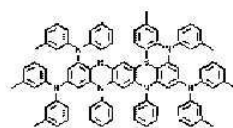
[화합물 M-6]



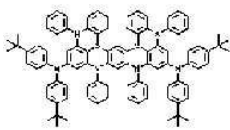
[화합물 M-7]



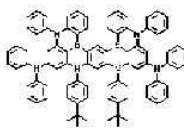
[화합물 M-8]



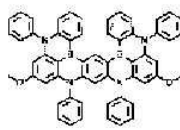
[화합물 M-9]



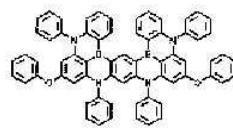
[화합물 M-10]



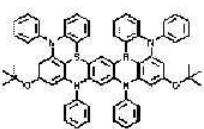
[화합물 M-11]



[화합물 M-12]



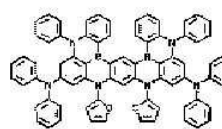
[화합물 M-13]



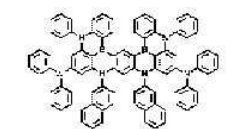
[화합물 M-14]



[화합물 M-15]

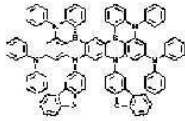


[화합물 M-16]

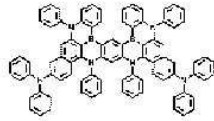


[0103]

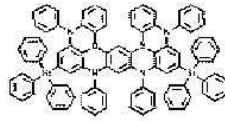
[화합물 M-17]



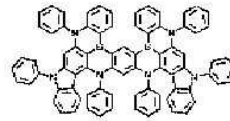
[화합물 M-18]



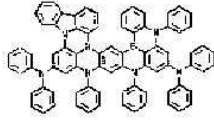
[화합물 M-19]



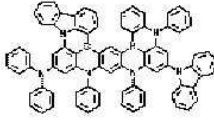
[화합물 M-20]



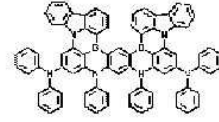
[화합물 M-21]



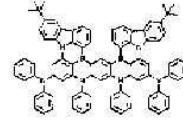
[화합물 M-22]



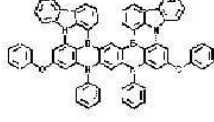
[화합물 M-23]



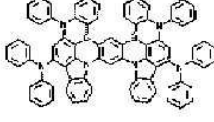
[화합물 M-24]



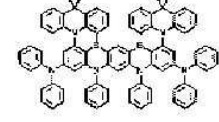
[화합물 M-25]



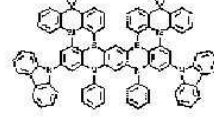
[화합물 M-26]



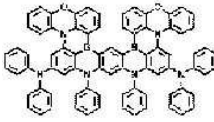
[화합물 M-27]



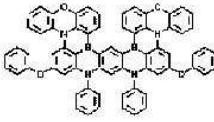
[화합물 M-28]



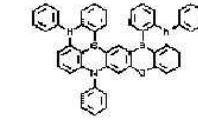
[화합물 M-29]



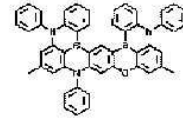
[화합물 M-30]



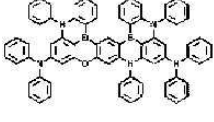
[화합물 M-31]



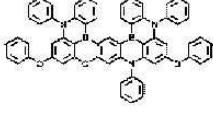
[화합물 M-32]



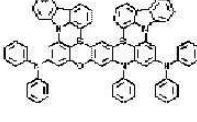
[화합물 M-33]



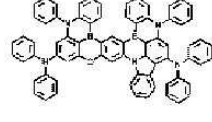
[화합물 M-34]



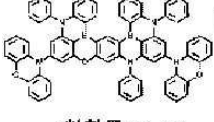
[화합물 M-35]



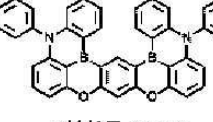
[화합물 M-36]



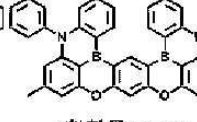
[화합물 M-37]



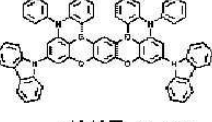
[화합물 M-38]



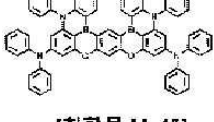
[화합물 M-39]



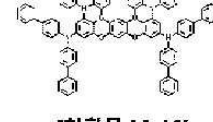
[화합물 M-40]



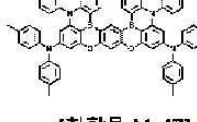
[화합물 M-41]



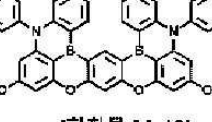
[화합물 M-42]



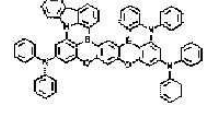
[화합물 M-43]



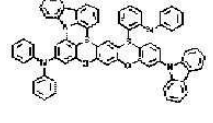
[화합물 M-44]



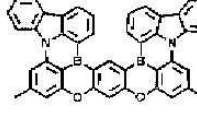
[화합물 M-45]



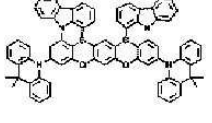
[화합물 M-46]



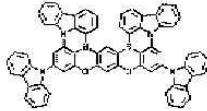
[화합물 M-47]



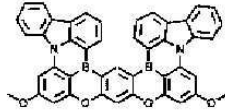
[화합물 M-48]



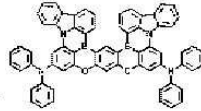
[화합물 M-49]



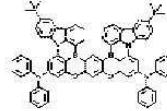
[화합물 M-50]



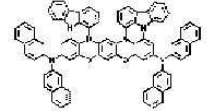
[화합물 M-51]



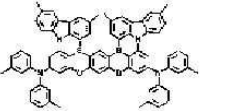
[화합물 M-52]



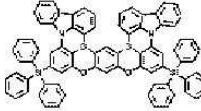
[화합물 M-53]



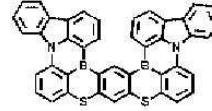
[화합물 M-54]



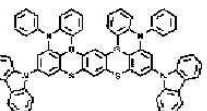
[화합물 M-55]



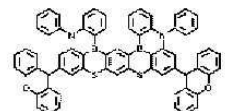
[화합물 M-56]



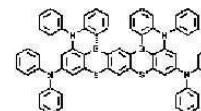
[화합물 M-57]



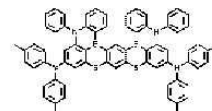
[화합물 M-58]



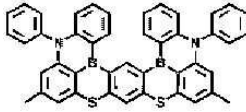
[화합물 M-59]



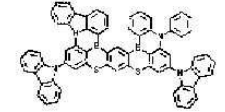
[화합물 M-60]



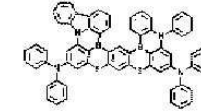
[화합물 M-61]



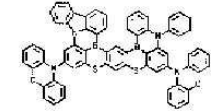
[화합물 M-62]



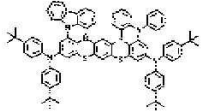
[화합물 M-63]



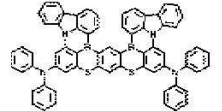
[화합물 M-64]



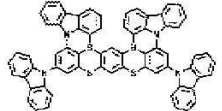
[화합물 M-65]



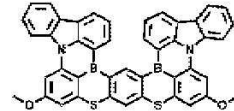
[화합물 M-66]



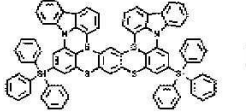
[화합물 M-67]



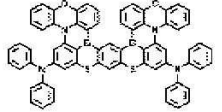
[화합물 M-68]



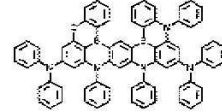
[화합물 M-69]



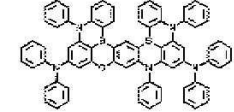
[화합물 M-70]



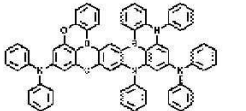
[화합물 M-71]



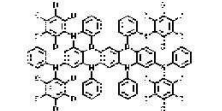
[화합물 M-72]



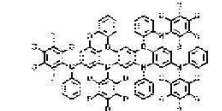
[화합물 M-73]



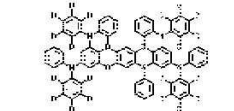
[화합물 M-74]



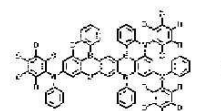
[화합물 M-75]



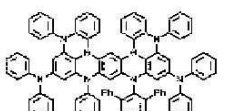
[화합물 M-76]



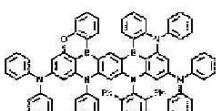
[화합물 M-77]



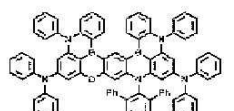
[화합물 M-78]



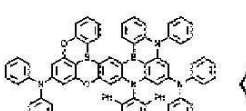
[화합물 M-79]



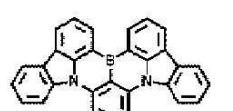
[화합물 M-80]



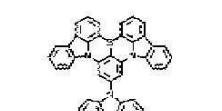
[화합물 M-81]



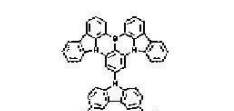
[화합물 M-82]



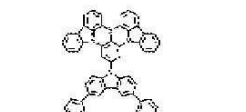
[화합물 M-83]



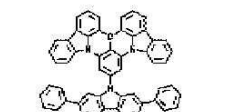
[화합물 M-84]



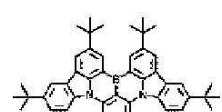
[화합물 M-85]



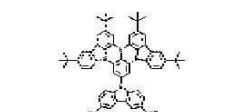
[화합물 M-86]



[화합물 M-87]



[화합물 M-88]

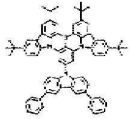


[0106]

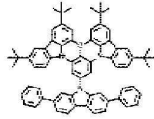
[0107]

[0108]

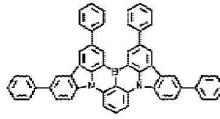
[화합물 M-89]



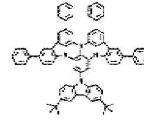
[화합물 M-90]



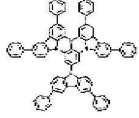
[화합물 M-91]



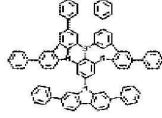
[화합물 M-92]



[화합물 M-93]



[화합물 M-94]



[0109]

[0110]

이때, 제1도펀트 화합물의 반치폭은 상기 제2도펀트 화합물의 반치폭보다 좁은 것이 바람직하다. 반치폭이 좁을수록 색순도가 높아지며, 최종 발광체인 제1도펀트 화합물의 반치폭이 제2도펀트 화합물의 반치폭보다 좁은 경우, 기존의 지연형광 소자에 비해 고색순도의 소자 특성을 얻을 수 있는 효과가 있다.

[0111]

상기 발광층에서 호스트 화합물 및 상기 제2도펀트 화합물은 각각 상기 제1도펀트 화합물보다 높은 단일항 에너지 및 삼중항 에너지를 갖는 것이 바람직하다. 또한, 제2도펀트의 발광 스펙트럼은 제1도펀트의 흡수 스펙트럼과 겹침의 정도를 크게 하여 에너지 전달을 빠르게 일어날 수 있도록 한다. 즉, 제2도펀트 화합물은 호스트 화합물로부터 에너지를 받아 제1도펀트 화합물로 에너지를 전달하는 역할을 하며, 전기 발광 소자에서 외부 양자 효율이 높은 전자 주개-전자 받개 구조의 지연형광 물질이거나, 중금속의 인광물질을 사용하는 것이 바람직하다.

[0112]

상기 중금속의 인광물질은 구체적인 예로서 Ir, Pt 및 Pd 중 1종 이상의 중금속을 포함할 수 있으나, 상기 예시에 한정되는 것은 아니다.

[0113]

각 도펀트 화합물의 삼중항과 단일항의 에너지 관계에 의해 제2도펀트 화합물의 에너지가 제1도펀트 화합물로 전달되며, 에너지를 전달받는 제1도펀트 화합물의 비율이 에너지를 전달하는 제2도펀트 화합물에 비하여 작을수록 최종 발광체인 제1도펀트 화합물의 발광효율이 높아질 수 있다.

[0114]

상기 유기물층의 발광층은 상기 전자 주개-전자 받개 구조의 지연형광 화합물 또는 중금속의 인광물질이 제2도펀트 화합물로 사용되고, 다중공명효과를 이용한 지연형광(MR-TADF) 화합물 또는 형광 화합물이 제1도펀트 화합물로 사용될 수 있다.

[0115]

상기 다중공명효과를 이용한 지연형광(MR-TADF) 화합물은 전자-진동 결합(Vibronic coupling)이 약하여 좁은 반치폭을 가져 색순도가 높은 특성을 가진다. 또한, HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)와 LUMO가 원자 단위로 분리되어 있어 단일항과 삼중항 사이에 에너지 차이가 작아 지연형광 특성 또한 지니고 있을 수 있다.

[0116]

상기 형광 화합물을 상기 지연형광 제 2 도펀트를 포함한 발광층에 미량을 섞어 초형광 유기 발광소자를 제조할 수 있고, 이러한 소자는 역계간전이를 통해 얻은 높은 효율의 에너지를 형광 물질에 전달할 수 있으며, 최종적인 발광은 형광 도펀트 화합물에서 일어나기 때문에, 지연 형광으로부터 얻은 높은 효율과 동시에 고색순도를 구현할 수 있다.

[0117]

본 발명의 유기발광소자는 높은 색순도와 효율이 우수하여, 각종 표시 장치의 발광소자로 적용될 수 있으며, 예를 들어 TV, 스마트폰, 컴퓨터, 자동차 등의 표시 장치에 적용될 수 있다.

[0118]

본 발명의 유기 발광소자는 높은 효율로 인하여 조명 장치에 적용될 수 있다.

[0119]

이하, 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 본 발명의 실시예에 대하여 상세히 설명한다. 그러나 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 제조예 및 실시예에 한정되지 않는다.

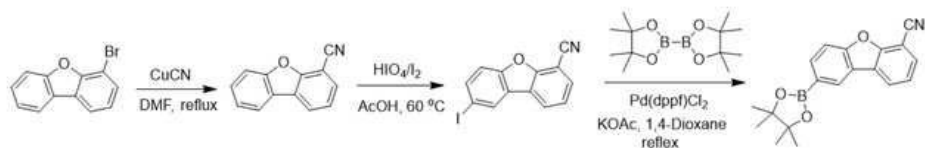
[0121]

[제조예 : 유기 화합물의 합성]

[0122]

실시예 1 : 화합물 2-9로 표시되는 유기 화합물의 합성

[0123] [반응식 1-1]



중간체 화합물 1

[0124]

[0125] 4-Bromodibenzo[b,d]furan (10.00g, 40.47 mmol)과 코퍼 시아나이드 (CuCN, 7.24g, 80.94 mmol)을 N,N-디메틸포름아마이드 (N,N-dimethylformamide) 400mL에 섞고, 아르곤 분위기에서 12시간 동안 리플렉스를 진행하여 반응을 종료 시킨다. 식힌 후 메탄올 (methanol) 300mL를 반응 혼합물에 넣어주고 여과한 후 감압상태에서 용매를 제거한다. 잔여물은 디클로로메테인과 물에 녹이고, 유기층을 암모니아 (ammonia) 용액에 씻고 무수황산마그네슘으로 건조 후 용매를 제거한다. 얻어진 고체를 디클로로메테인과 헥세인으로 재결정하여 dibenzo[b,d]furan-4-carbonitrile 7.6g (수율 97.3%)를 얻었다.

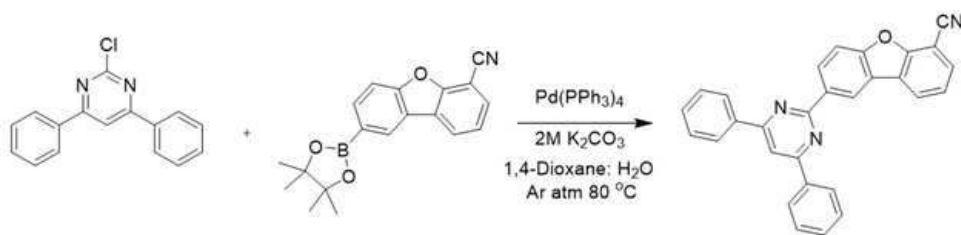
[0126]

Dibenzo[b,d]furan-4-carbonitrile (7.6g, 39.33 mmol), 과요오드 산 (periodic acid, 8.30g, 43.26 mmol)과 아이오딘 (iodine, 10.98g, 43.26 mmol)을 차가운 아세트 산 (acetic acid) 150mL에 섞고, 아르곤 분위기에서 60°C로 2시간 동안 리플렉스를 진행하여 반응을 종결시킨다. 상온으로 식힌 후, 500mL의 물을 넣고 디클로로메테인으로 추출한다. 유기층을 포화된 싸이오황산 나트륨 (Sodium thiosulphate) 용액으로 씻고, 무수황산마그네슘으로 건조 후 감압 상태에서 용매를 제거한다. 얻어진 고체를 디클로로메테인과 헥세인에 재결정하여 흰색 8-iododibenzo[b,d]furan-4-carbonitrile 9.10g (수율 72%)을 얻는다.

[0127]

8-iododibenzo[b,d]furan-4-carbonitrile (9.10g, 28.51 mmol)과 bis(pinacolato)diboron (8.70 g, 34.22 mmol), 포타슘 아세테이트 (KOAc, 8.40 g, 85.55 mmol) 및 [1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium (II) (0.62g, 0.85mmol)을 1,4-디옥세인 180mL에 섞고 아르곤 분위기에서 12시간동안 리플렉스를 진행하여 반응을 종결시킨다. 상온으로 식힌 후 셀라이트 패드 (celite pad)와 무수 황산 마그네슘에 여과시키고, 감압상태에서 용매를 제거한다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 중간체 화합물 1, 8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)dibenzo[b,d]furan-4-carbonitrile 7.21g (수율 79.23%)을 얻는다.

[0128] [반응식 1-2]



중간체 화합물 1

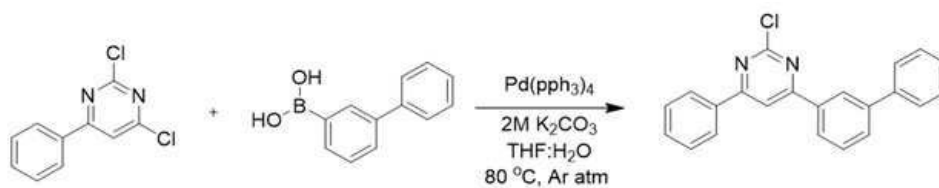
화합물 2-9

[0129]

[0130] 2-Chloro-4,6-diphenylpyrimidine (5.0g, 18.74 mmol)과 중간체 화합물 1, 8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)dibenzo[b,d]furan-4-carbonitrile (7.17g, 22.50 mmol), potassium carbonate (5.2g, 37.49 mmol) 및 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) (7.17g, 0.38 mmol)을 1,4-Dioxane (70mL)와 물 (35mL)에 녹인다. 아르곤 분위기에서 반응 혼합물을 12시간 동안 80°C로 가열하여 반응을 종결시킨다. 반응 혼합물을 식힌 후 디클로로메테인(dichloromethane) 용액으로 추출하고, 소듐클로라이드(NaCl)로 포화시킨 용액 (brine solution)으로 씻어낸다. 이후, 무수황산마그네슘 (MgSO₄)으로 건조시키고 감압하에 용매를 제거한다. 잔류물은 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2-9, 5.1g (수율 63.68%)을 얻었다.

[0132] 실시예 2 : 화합물 2-10으로 표시되는 유기 화합물의 합성

[0133] [반응식 2-1]

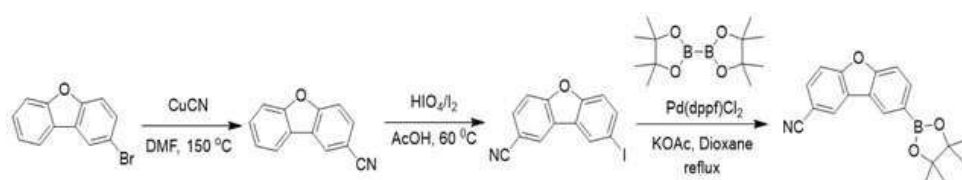


중간체 화합물 2

[0134]

[0135] 2,4-Dichloro-6-phenylpyrimidine (5.0 g, 22.21 mmol), 3-biphenylboronic acid (4.4 g, 22.21mmol), 포타슘 카보네이트 (potassium carbonate, 9.7g, 2M) 및 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) (1.28 g, 1.11 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 70mL와 물 35mL에 녹인다. Argon 분위기에서, 반응 혼합물을 80°C로 5시간 동안 가열하여 반응을 종결시킨다. 반응 혼합물을 식힌 후 디클로메테인 용액으로 추출하고, 소듐 클로라이드로 포화된 용액으로 씻는다. 무수 황산마그네슘으로 건조시키고, 감압하에 용매를 제거한다. 잔류물은 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 화합물 2, 4-([1,1'-biphenyl]-3-yl)-2-chloro-6-phenylpyrimidine 4.60 g (수율 60.44%)을 얻었다.

[0136] [반응식 2-2]

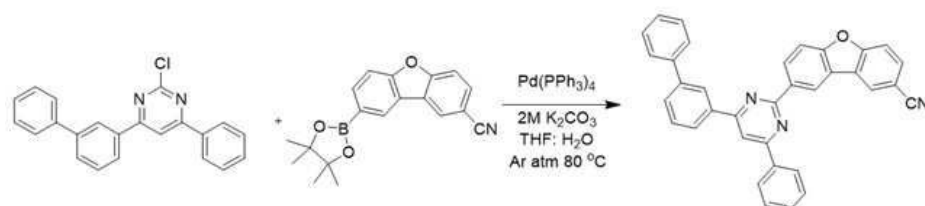


중간체 화합물 3

[0137]

[0138] 실시예 1의 [반응식 1-1]에서 4-Bromodibenzo[b,d]furan 대신 2-Bromodibenzo[b,d]furan (10.00 g, 40.47 mmol)를 사용하는 것 외에는 동일한 방법으로 반응을 진행하여 중간체 화합물 3, 8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)dibenzo[b,d]furan-2-carbonitrile 7.21 g (수율 79.23 %)을 얻는다.

[0139] [반응식 2-3]



중간체 화합물 2

중간체 화합물 3

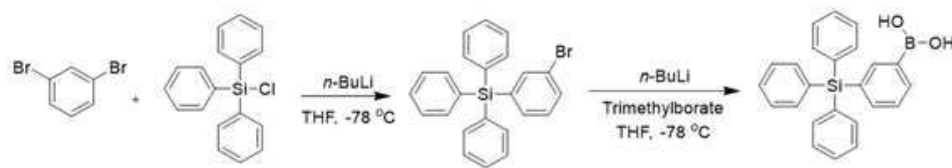
화합물 2-10

[0140]

[0141] [반응식 2-1] 과 [반응식 2-2]를 통해 얻어진 중간체 화합물 2 (3.0 g, 8.75 mmol), 중간체 화합물 3 (3.35 g, 10.52mmol), 포타슘 카보네이트 (6.93 g, 2M) 및 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) (0.50g, 0.43 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 50mL과 물 25mL에 섞는다. 아르곤 분위기에서 반응 혼합물을 80°C에서 12시간 동안 리플럭스하여 반응을 종결시킨다. 반응 혼합물을 여과시키고, 소듐 클로라이드가 포화된 용액으로 씻는다. 생성물을 뜨거운 모노클로로벤젠 (monochlorobenzene)에 녹여 셀라이트 패드로 여과하고 용매를 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 2-10, 2.72g (수율 62.2%)을 얻었다.

[0143] 실시예 3 : 화합물 2-39로 표시되는 유기 화합물의 합성

[0144] [반응식 3-1]



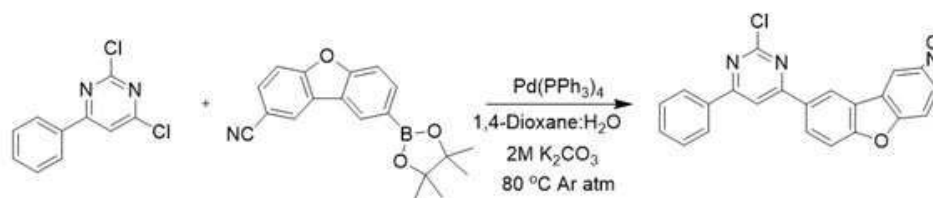
중간체 화합물 4

[0145]

[0146] 1,3-dibromobenzene (10 g, 42.40 mmol)을 영하 78°C로 냉각된 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran) 150mL에 현탁시킨다. 헥세인에 2.5 몰농도의 n-butyllithium (2.71 g, 42.40 mmol)을 영하 78°C에서 30분 동안 떨어뜨린 후 0°C에서 1시간 동안 섞어준다. Chloro(triphenyl)silane (15 g, 46.62 mmol)을 동일 온도, 불활성 분위기에 넣어주고 10분간 섞어준 후 상온으로 온도를 올려준다. 상온에서 2시간동안 섞은 후, 혼합물을 물 100mL에 붓고 에틸 아세테이트 (ethyl acetate) 150mL로 추출한다. 유기층을 200mL의 물과 포화된 소금물로 씻고, 무수 황산마그네슘으로 건조하고 셀라이트 패드에 여과시킨 후 감압하에 용매를 제거해준다. 생성물을 컬럼 크로마토그래피를 이용해 정제하여 (3-bromophenyl)triphenylsilane 8.3g (수율 47.15%)를 얻었다.

[0147] (3-Bromophenyl)triphenylsilane (5 g, 12.03 mmol)을 영하 78°C 100mL 테트라하이드로퓨란에 현탁시킨다. 헥세인에 2.5 몰농도의 n-butyllithium (1.15 g, 18.05 mmol)을 넣어주고 용액을 10분간 섞어준 후 0°C로 온도를 올려 용액을 1시간 동안 섞어준다. 트라이메틸 보레이트 (trimethyl borate, 1.87g, 18.05mmol)를 불활성 분위기에서 넣어주고 용액을 1시간 동안 섞고 상온에서 5시간 반응시킨다. 반응 혼합물을 물 100mL에 붓고 디클로로메테인 100mL로 추출한다. 유기층은 200mL의 물과 포화된 소듐클로라이드 용액으로 씻어내고, 무수 황산마그네슘으로 건조하고 셀라이트 패드를 통해 여과시킨 후 감압 상태에서 용매를 제거해준다. 생성물은 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 화합물 4, (3-(triphenylsilyl)phenyl)boronic acid 3.51g (수율 76.80%)을 얻는다.

[0148] [반응식 3-2]



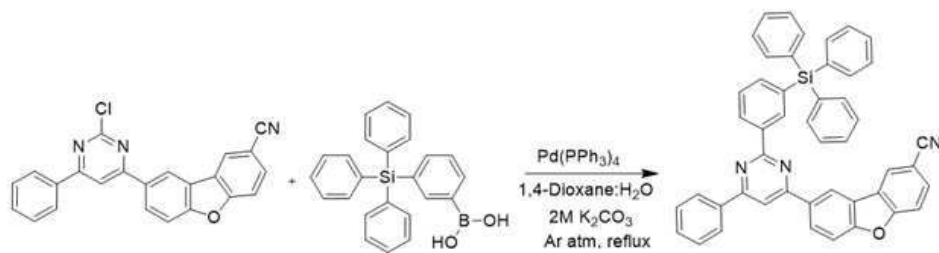
중간체 화합물 3

중간체 화합물 5

[0149]

[0150] 2,4-Dichloro-6-phenylpyrimidine (1.0 g, 4.44 mmol), 중간체 화합물 3, (4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)dibenzo[b,d]furan-2-carbonitrile (1.41 g, 4.44 mmol), 포타슘카보네이트(4.15 g, 2M) 및 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) (0.25 g, 0.22 mmol)을 1,4-다이옥세인 30mL와 물 15mL에 넣어준다. 불활성 분위기에서, 반응물을 12시간 리플러스를 진행하여 반응을 종결시킨다. 반응물 고체를 여과 후 포화 용액으로 씻어준다. 생성물을 모노클로로벤젠에 녹여 셀라이트 패드에 여과시키고, 용매를 제거한 다음 메탄올로 재결정하여 중간체 화합물 5, 8-(2-chloro-6-phenylpyrimidin-4-yl)dibenzo[b,d]furan-2-carbonitrile 0.76g (수율 44.97%)을 얻는다.

[0151] [반응식 3-3]



중간체 화합물5

중간체 화합물4

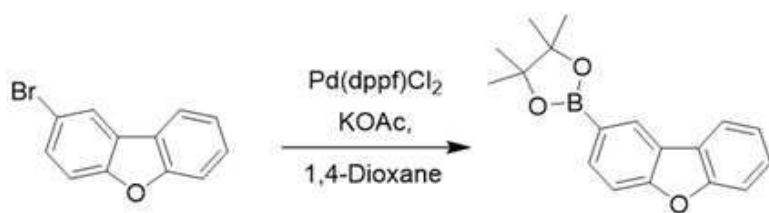
화합물 2-39

[0152]

[0153] 중간체 화합물 5, 8-(2-chloro-6-phenylpyrimidin-4-yl)dibenzo[b,d]furan-2-carbonitrile (0.7g, 1.83 mmol), 중간체 화합물 4, (3-(triphenylsilyl)phenyl)boronic acid (0.83 g, 2.20 mmol), 포타슘 카보네이트 (1.48 g, 2M) 및 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) (0.10g, 0.09 mmol)을 1,4-다이옥세인 15mL와 물 7mL에 넣는다. 불활성 분위기에서, 반응혼합물을 5 시간동안 리플렉스 시켜 반응을 종결시킨다. 반응 혼합물을 여과 후 소듐 클로라이드 포화용액으로 씻어준다. 생성물을 모노클로로벤젠에 녹이고, 셀라이트 패드에 여과시키고 용매를 제거한 후 메탄올로 재결정하여 화합물 2-39 0.62g (수율 49.6%)을 얻었다 .

[0155] 실시예 4 : 화합물 2-54으로 표시되는 유기 화합물의 합성

[0156] [반응식 4-1]

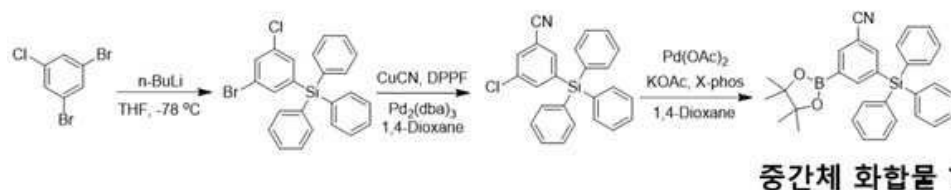


중간체 화합물 6

[0157]

[0158] 2-Bromodibenzo[b,d]furan (3g, 12.14 mmol)에 potassium acetate (2.38 g, 24.28 mmol)과 (1,1'-Bis(diphenylphosphino)palladium(II) dichloride (0.26g, 0.36mmol)을 1,4-다이옥세인 40mL에 녹이고 90°C에서 아르곤 분위기에서 12시간 동안 리플렉스를 진행한다. 반응완료 후, 상온에서 식히고 디클로로메테인과 증류수로 추출한다. 무수 황산 마그네슘을 사용하여 건조하고 감압 상태에서 용매를 제거한다. 생성물은 디클로로메테인과 헥세인 1:1로 사용하여 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 이용해 정제되었으며, 중간체 화합물 6, 2-(dibenzofuran-2-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 2.86g (수율 80.1%)를 얻어낸다.

[0159] [반응식 4-2]



중간체 화합물 7

[0160]

[0161] 1,3-Dibromo-5-chlorobenzene(5g, 18.49 mmol)을 750mL의 테트라하이드로퓨란(THF)에 녹이고 영하 78°C에서 1 시간 동안 교반시킨다. 이후 n-Butyllithium (11.09 ml, 27.74 mmol, 헥세인에서 2.5 M)를 아르곤 분위기에서 넣어준 후 2시간 동안 교반시킨다. Chlorotriphenylsilane (6.54 g, 22.19 mmol)을 디에틸에터 30mL에 녹여 넣어주고 상온에서 12시간 동안 교반시킨다. 이후, 반응 혼합물은 디클로로메테인과 증류수로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켜 여과시킨다. 물질은 디클로로메테인과 헥세인 1:2 비율을 이용하여 실리카겔 컬럼 크로

마토그래피를 통해 정제하여 (3-bromo-5-chlorophenyl)triphenylsilane 4.76 g (수율57.2%)를 얻는다.

[0162]

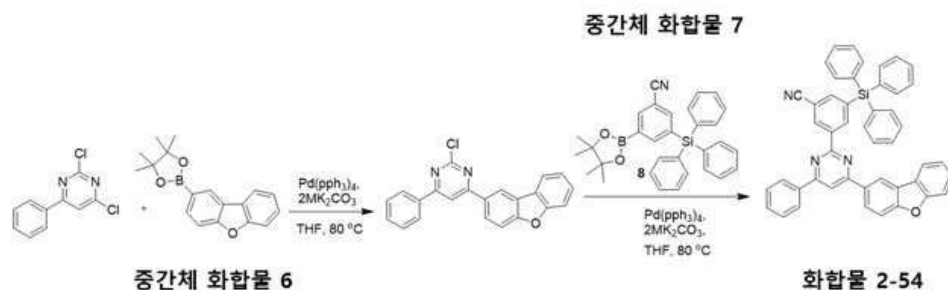
(3-Bromo-5-chlorophenyl)triphenylsilane (4g, 8.80 mmol), 코퍼 시아나이드 (1.99 g, 22.20 mmol), 1,1'-Ferrocenediyl-bis(diphenylphosphine) (0.6g, 1.00 mmol)과 tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0) (0.20 g, 0.22mmol)을 1,4-디옥세인 50mL에 녹이고 아르곤 분위기, 200°C에서 리플렉스를 진행한다. 반응 혼합물은 디클로로메틸과 증류수를 통해 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켜 여과한다. 고체는 디클로로메틸:헥세인 1:4 용액으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통해 정제한다. 3-Chloro-5-(triphenylsilyl)benzonitrile을 1.66g (수율47.1%)를 얻는다.

[0163]

3-Chloro-5-(triphenylsilyl)benzonitrile (3g, 7.57 mmol), bis(pinacolato)diboron (7.7g, 30.30 mmol), 포타슘 아세테이트 (2.23g, 22.72 mmol), 팔라듐 아세테이트 (palladium acetate) (0.51g, 2.20 mmol)과 X-phos (0.90 g, 1.8 mmol)을 1,4-디옥세인 25mL에 녹이고 질소 분위기, 190°C에서 12시간 동안 리플렉스를 진행한다. 반응 혼합물은 디클로로메틸과 증류수를 이용해 추출하고, 무수 황산 마그네슘으로 건조시켜 여과한다. 중간체 화합물 7, (3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5-(triphenylsilyl)benzonitrile 2.66g (수율 75.1%)을 얻는다.

[0164]

[반응식 4-3]



[0165]

[0166]

2,4-Dichloro-6-phenylpyrimidine (2g, 8.80 mmol), 중간체 화합물 6 (2.74g, 9.30 mmol)과 포타슘 카보네이트 (1.38g, 2M)를 테트라하이드로퓨란(THF) 50mL에 녹이고 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (0) (0.30g, 0.26 mmol)을 50°C에서 아르곤 분위기에 넣어준 후 15분간 교반시킨다. 반응물은 80°C에서 12시간 동안 리플렉스한다. 반응 혼합물은 디클로로메틸과 증류수로 추출하고 황산 마그네슘으로 건조시켜 여과시킨다. 생성물은 클로로메틸:헥세인 1:1 비율로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통해 정제하여 2-Chloro-4-(dibenzo[b,d]furan-2-yl)-6-phenylpyrimidine 1.75g (수율55%)를 얻는다.

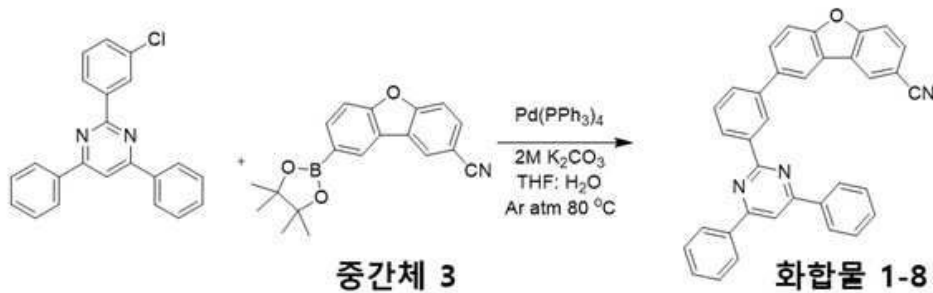
[0167]

2-Chloro-4-(dibenzo[b,d]furan-2-yl)-6-phenylpyrimidine (1.5g, 4.20 mmol), 중간체 화합물 7 (2.45g, 5.00 mmol)과 2M K₂CO₃ (1.08g, 8ml)를 테트라하이드로퓨란 45mL에 녹이고 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) (0.24g, 0.21mmol)을 아르곤 분위기에서 넣어주면서 15분간 교반시킨다. 반응 혼합물은 80°C에서 12시간 동안 리플렉스 시켜주고 반응을 종결시킨다. 디클로로메틸과 증류수로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 건조시켜 여과시킨다. 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2-54 1.4g (수율 49%)을 얻는다.

[0169]

실시예 5 : 화합물 1-8로 표시되는 유기 화합물의 합성

[0170] [반응식 5-1]

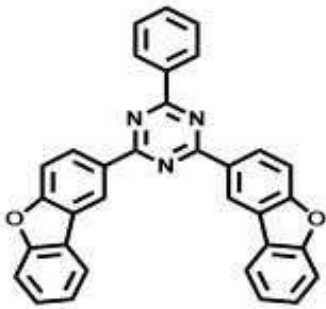


[0171]

[0172] 실시예 2의 [반응식 2-3]에서 중간체 화합물 2 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine (3.00 g, 8.77 mmol)를 사용하는 것 외에는 실시예 2와 동일한 방법으로 반응을 진행하여 화합물 1-8 2.65 g (수율 60.5%)을 얻었다.

[0174] 비교예 1

[0175] DDBFT(2,4-bis(2-dibenzofuranyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine)로서, Journal of Industrial and Engineering Chemistry 62, 258-264 (2018)을 참조하여 하기 구조식의 화합물을 합성하였다.



[0176]

[0178] [실험예1 :유기 화합물을 포함하는 지연형광 소자 평가]

[0179] 상기 제조예에 따라 제조한 실시예 1 내지 5 및 비교예 1에 대한 물성 평가를 진행하였다. ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 절단하고 아세톤, 이소프로필 알코올과 증류수를 이용하여 각 10분 동안 세정한다. 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출 시킨 후 진공증착장치에 상기 ITO 유리 기판을 장착하였다. 상기 ITO 유리 기판에 HATCN (7 nm) / NPB (50 nm) / PCZAC (10 nm) / 70중량%의 유기 화합물(실시예 1 내지 5 또는 비교예 1) : 30중량%의 T-5 (25 nm) / DDBFT(5 nm) / BPPB: Liq (1:1 중량%) (30 nm) / LiF (1.5 nm) / Al (100 nm) 순으로 적층하여 유기발광소자를 제조하였다. 제조된 유기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 코니카 미놀타(Konica minolta)사의 CS-2000으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 1,000 cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였다. 소자 특성 결과를 표 1에 나타내었다.

표 1

[0180]

구분	소자 B-1	소자 A-1-1	소자 A-1-2	소자 A-1-3	소자 A-1-4	소자 A-1-5
화합물	DDBFT	화합물 2-9	화합물 2-10	화합물 2-39	화합물 2-54	화합물 1-8
구동 전압 (V)	3.1	3.1	3.2	3.4	3.3	3.2
최대 EQE (%)	24.0	24.1	25.7	28.2	27.0	25.2
반치폭 (nm)	66	67	67	67	67	67
최대 전기 발광 파장 (nm)	491	494	493	491	491	493
CIE 좌표	(0.17, 0.41)	(0.18, 0.43)	(0.17, 0.42)	(0.17, 0.41)	(0.17, 0.41)	(0.17, 0.42)
T90 (hrs)	6.0	9.8	12.4	10.5	15.6	10.3

[0181] 상기 표 1의 결과를 참고하면, 비교예1에 비해, 실시예1 내지 5에서 최대 전기 발광파장은 약간 길어졌으나, 소자의 효율 및 수명 개선이 있었다.

[0183] [실험예 2 : 유기 화합물과 정공 수송용 호스트 화합물을 포함하는 지연형광 소자 평가]

[0184] 실험예 1과 동일하게 처리한 ITO 유리 기판에 HATCN (7 nm) / NPB (50 nm) / PCZAC (10 nm) / 49중량%의 정공 수송용 호스트 화합물 : 21중량%의 유기 화합물(실시예 1 내지 5 또는 비교예 1) : 30중량%의 T-5 (25 nm) / DDBFT (5 nm) / BPPB: Liq (1:1 중량%) (30 nm) / LiF (1.5 nm) / Al (100 nm) 순으로 적층하여 유기발광소자를 제조하였다. 제조된 유기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 코니카 미놀타(Konica minolta)사의 CS-2000으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 1,000 cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였다. 소자 특정 결과를 표 2에 나타내었다.

표 2

구분	소자 B-2	소자 A-2-1	소자 A-2-2	소자 A-2-3	소자 A-2-4	소자 A-2-5
화합물	화합물 H-2: DDBFT	화합물 H-2: 화합물2-9	화합물 H-2: 화합물2-10	화합물 H-2: 화합물 2-39	화합물 H-2: 화합물 2-54	화합물H-2: 화합물 1-8
구동 전압 (V)	3.7	3.4	3.7	3.8	3.8	3.6
최대 EQE (%)	28.9	28.6	29.4	30.3	29.2	29.1
반치폭 (nm)	67	66	67	67	67	66
최대 전기 발광 파장 (nm)	490	491	490	488	488	490
CIE 좌표	(0.16, 0.40)	(0.16, 0.41)	(0.16, 0.40)	(0.16, 0.38)	(0.16, 0.38)	(0.16, 0.41)
T90 (hrs)	35.2	35.1	39.7	40.5	36.1	35.6

[0186] 상기 표 2의 결과를 참고하면, 비교예1에 비해, 실시예1 내지 5에서 근소하나 소자의 수명과 효율이 개선되었으며, 전자 이동도가 감소할수록 전하 균형이 개선되어 소자의 수명이 더 개선됨을 알 수 있었다.단일 호스트를 사용한 결과와 비교하여, 정공 수송용 호스트와 같이 사용함으로써, 구동은 좀 높아졌으나 효율 및 수명이 개선되었다.

[0188] [실험예 3: 유기화합물과 정공 수송용 호스트를 포함하는 초형광 소자 평가]

[0189] 실험예 1과 동일하게 처리한 ITO 유리 기판에 HATCN (7 nm) / NPB (50 nm) / PCZAC (10 nm) / 55.7중량%의 정공 수송용 호스트 화합물 : 23.8중량%의 유기 화합물(실시예 1 내지 5 또는 비교예 1) : 20중량%의 T-5 0.5중량%의 M-6(25 nm) / DDBFT (5 nm) / BPPB: Liq (1:1 중량%) (30 nm) / LiF (1.5 nm) / Al (100 nm) 순으로 적층하여 유기발광소자를 제조하였다. 제조된 유기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 코니카 미놀타(Konica minolta)사의 CS-2000으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 1,000 cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였다. 소자 특정 결과를 표 3에 나타내었다.

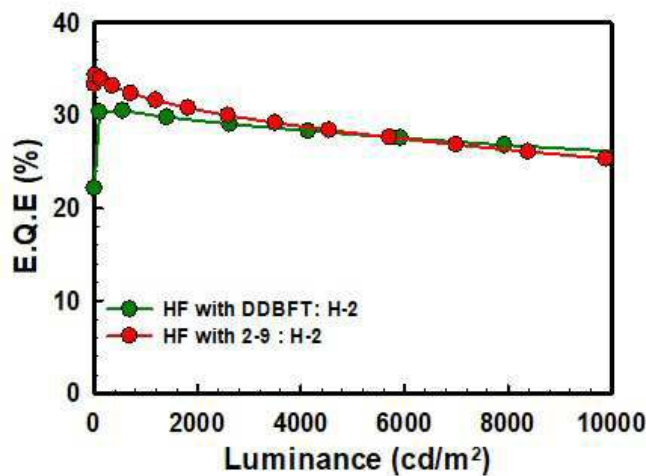
표 3

구분	소자 B-3	소자 A-3-1	소자 A-3-2	소자 A-3-3	소자 A-3-4	소자 A-3-5
화합물	화합물 H-2: DDBFT	화합물 H-2: 화합물2-9	화합물 H-2: 화합물2-10	화합물 H-2: 화합물 2-39	화합물 H-2: 화합물2-54	화합물H-2: 화합물 1-8
구동 전압 (V) @ 1000 cd/m ²	4.0	3.7	4.1	4.2	4.1	3.8
최대 EQE (%)	32.9	34.4	34.7	35.5	35.1	34.9
반치폭 (nm)	27	21	21	21	21	21
최대 전기 발광 파장 (nm)	473	474	474	474	474	474
CIE 좌표	(0.14, 0.26)	(0.12, 0.22)	(0.12, 0.22)	(0.12, 0.22)	(0.12, 0.22)	(0.12, 0.22)

- [0191] 공지된 트리아진 화합물인 비교예1(DDBFT)과 실시예1(화합물 2-9)을 각각 혼합 호스트의 전자 수송용 호스트로 사용하여 초형광 소자의 효율 및 색순도를 측정하여, 도1 및 도2로 나타내었다.
- [0192] 측정된 CIEy좌표는 0.26에서 0.22로 이동하였으며, 이는 색순도의 개선을 의미한다. 또한 소자의 외부 양자 효율(EQE) 또한 32.9%에서 34.4%로 개선되었음을 보였으며, 이는 제 1도펀트와 전자 수송용 호스트 사이에 엑시플렉스 형성이 억제된 결과이다. 해당 결과는 표 3에서 소자 B-3과 소자 A-3-1을 통해 확인할 수 있다.
- [0193] 소자 A-3-1 이외에도, 소자 A-3-2 내지 소자 A-3-5는 소자 B-3 대비 CIEy 좌표가 0.22로 변화하였고, 반치폭이 27nm에서 21nm로 변화하였으며, 소자 효율 또한 개선되었다. 이는 제1 도펀트인 M-6과 전자 수송용 호스트 사이에 엑시플렉스 형성이 억제되었음을 나타낸다. 엑시플렉스 형성이 억제된 소자에서 소자 효율이 개선될 수 있음을 보여준다.
- [0194] 또한, 구동전압이 표 2 결과 대비하여 밀리는 현상은 칸델라(cd)는 사람의 시야 민감성을 내포하고 있고, 청색 대비 녹색에 대한 민감성이 상당히 높다. 초형광 소자의 CIE 색좌표는 기존 단일 지연 형광 대비하여 청색 편이 되었기 때문에, 같은 1,000 nit를 측정함에도 더 큰 전압이 요구된다.
- [0196] 이상에서 본 발명의 실시예에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리범위는 이에 한정되는 것은 아니며, 청구범위에 기재된 본 발명의 기술적 사상을 벗어나지 않는 범위 내에서 다양한 수정 및 변형이 가능하다는 것은 당 기술분야의 통상의 지식을 가진 자에게는 자명할 것이다.

도면

도면1



도면2

