



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년03월29일  
(11) 등록번호 10-2515819  
(24) 등록일자 2023년03월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07D 233/56 (2006.01) C07D 233/58 (2006.01)  
C07D 277/22 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
H10K 50/00 (2023.01) H10K 99/00 (2023.01)  
(52) CPC특허분류  
C07D 233/56 (2013.01)  
C07D 233/58 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2017-0160426  
(22) 출원일자 2017년11월28일  
심사청구일자 2020년10월22일  
(65) 공개번호 10-2019-0061747  
(43) 공개일자 2019년06월05일  
(56) 선행기술조사문헌  
KR10-2019-0061748A.\*  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
엘지디스플레이 주식회사  
서울특별시 영등포구 여의대로 128(여의도동)  
(72) 발명자  
배숙영  
경기도 파주시 월롱면 엘지로 245  
신인애  
경기도 파주시 월롱면 엘지로 245  
김준연  
경기도 파주시 월롱면 엘지로 245  
(74) 대리인  
네이트특허법인

전체 청구항 수 : 총 12 항

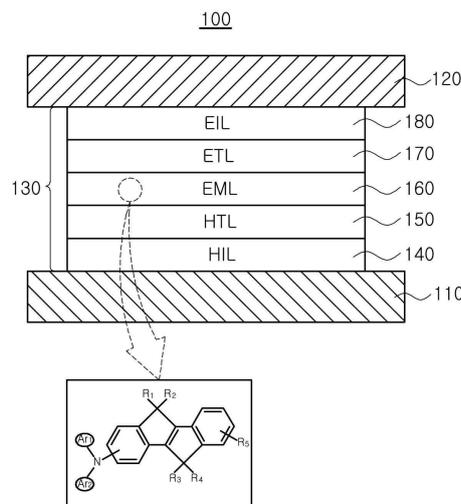
심사관 : 장봉호

(54) 발명의 명칭 유기 화합물, 이를 포함하는 유기발광다이오드 및 유기발광장치

(57) 요약

본 발명은 전자주개(electron donor)로 기능하는 인데노인덴(indenoindene)으로 치환된 트리 아릴 아민 모이어티에 전자받개(electron acceptor)로 기능하는 이미다졸(imidazole) 또는 티아졸(thiazole) 모이어티가 방향족 링커(linker)를 통하여 연결된 유기 화합물에 관한 것이다. 하나의 분자 내에 전자주개와 전자받개 모이어티를 모두 포함하고 있어, 분자 내에서 전하가 쉽게 이동하여 발광 효율이 향상될 수 있다. 또한, 전자주개의 일부분인 질소 원자는 견고한 구조를 가지는 축합 방향족 고리인 인데노인덴 고리와 연결되어 있기 때문에, 분자의 3차원 입체구조가 제한된다. 따라서 본 발명의 유기 화합물은 고색순도의 청색을 발광하는 지연 형광 도펀트로 사용될 수 있다. 본 발명의 유기 화합물을 적용하여 구동 전압이 낮으면서, 발광 효율 및 색 순도가 우수한 유기발광다이오드, 표시장치 및 조명 장치와 같은 유기발광장치에 활용될 수 있다.

대표도 - 도2



(52) CPC특허분류

*C07D 277/22* (2013.01)

*C09K 11/06* (2022.01)

*H10K 50/11* (2023.02)

*H10K 50/12* (2023.02)

*H10K 85/615* (2023.02)

*H10K 85/633* (2023.02)

*H10K 85/654* (2023.02)

*H10K 85/656* (2023.02)

*C09K 2211/1044* (2013.01)

---

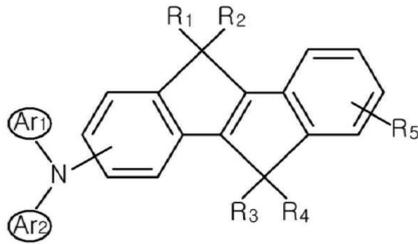
명세서

청구범위

청구항 1

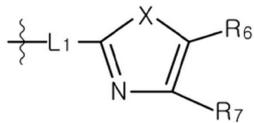
하기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물.

화학식 1



(화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 삼중수소 및 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬기로 구성되는 군에서 선택됨; R<sub>5</sub>는 하기 화학식 2로 표시됨; Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환되지 않거나 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬 치환된 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub> 호모 아릴기임)

화학식 2



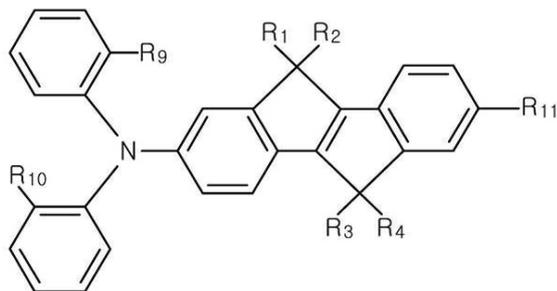
(화학식 2에서 R<sub>6</sub> 및 R<sub>7</sub>는 각각 독립적으로 치환되지 않거나 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬 치환된 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub> 호모 아릴기임; X는 S 또는 NR<sub>8</sub>이고, R<sub>8</sub>는 치환되지 않거나 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬 치환된 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub> 호모 아릴기임; L<sub>1</sub>은 치환되지 않거나 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬 치환된 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub> 호모 아릴렌기임)

청구항 2

제 1항에 있어서,

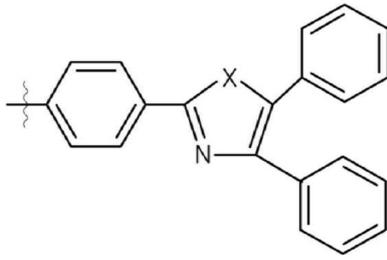
상기 유기 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 유기 화합물을 포함하는 유기 화합물.

화학식 3



(화학식 3에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 화학식 1에서 정의된 것과 동일함; R<sub>9</sub> 및 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 삼중수소 및 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬기로 구성되는 군에서 선택됨; R<sub>11</sub>은 하기 화학식 4로 표시됨)

화학식 4



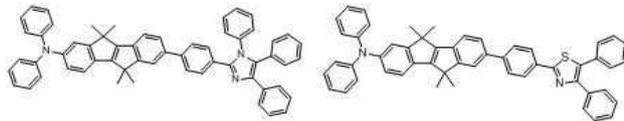
(화학식 4에서 X는 화학식 2에서 정의된 것과 동일함)

청구항 3

제 1항에 있어서,

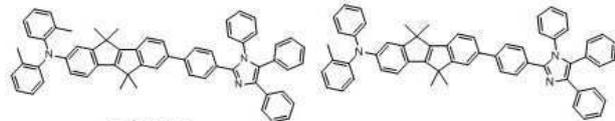
상기 유기 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 어느 하나의 유기 화합물인 유기 화합물.

화학식 5



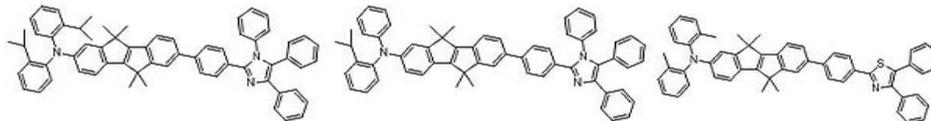
화합물 1

화합물 2



화합물 5

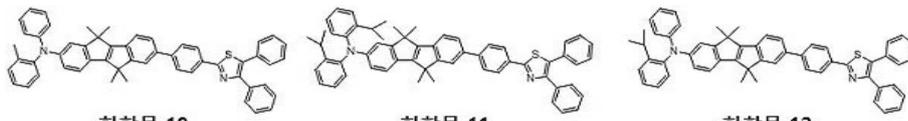
화합물 6



화합물 7

화합물 8

화합물 9



화합물 10

화합물 11

화합물 12

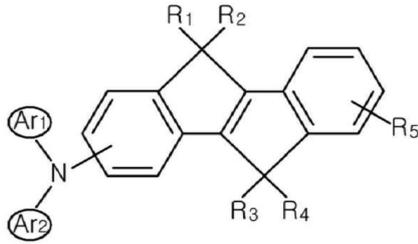
청구항 4

서로 마주하는 제 1 전극 및 제 2 전극;

상기 제 1 전극과 상기 제 2 전극 사이에 위치하는 유기발광층을 포함하고,

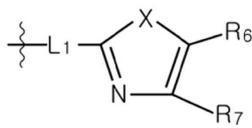
상기 유기발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물을 포함하는 유기발광다이오드.

화학식 1



(화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 삼중수소 및 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬기로 구성되는 군에서 선택됨; R<sub>5</sub>는 하기 화학식 2로 표시됨; Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환되지 않거나 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬 치환된 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub> 호모 아릴기임)

화학식 2



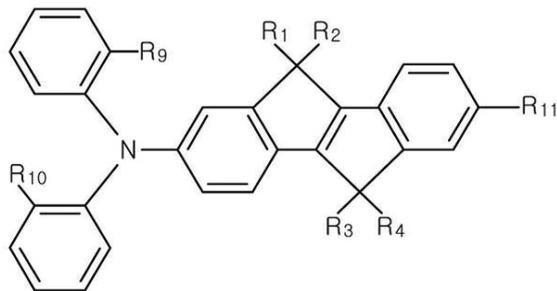
(화학식 2에서 R<sub>6</sub> 및 R<sub>7</sub>는 각각 독립적으로 치환되지 않거나 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬 치환된 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub> 호모 아릴기임; X는 S 또는 NR<sub>8</sub>이고, R<sub>8</sub>은 치환되지 않거나 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬 치환된 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub> 호모 아릴기임; L<sub>1</sub>은 치환되지 않거나 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬 치환된 C<sub>6</sub>~C<sub>30</sub> 호모 아릴렌기임)

청구항 5

제 4항에 있어서,

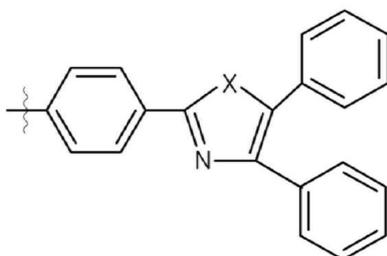
상기 유기 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 유기 화합물을 포함하는 유기발광다이오드.

화학식 3



(화학식 3에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 화학식 1에서 정의된 것과 동일함; R<sub>9</sub> 및 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 삼중수소 및 C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub> 알킬기로 구성되는 군에서 선택됨; R<sub>11</sub>은 하기 화학식 4로 표시됨)

화학식 4



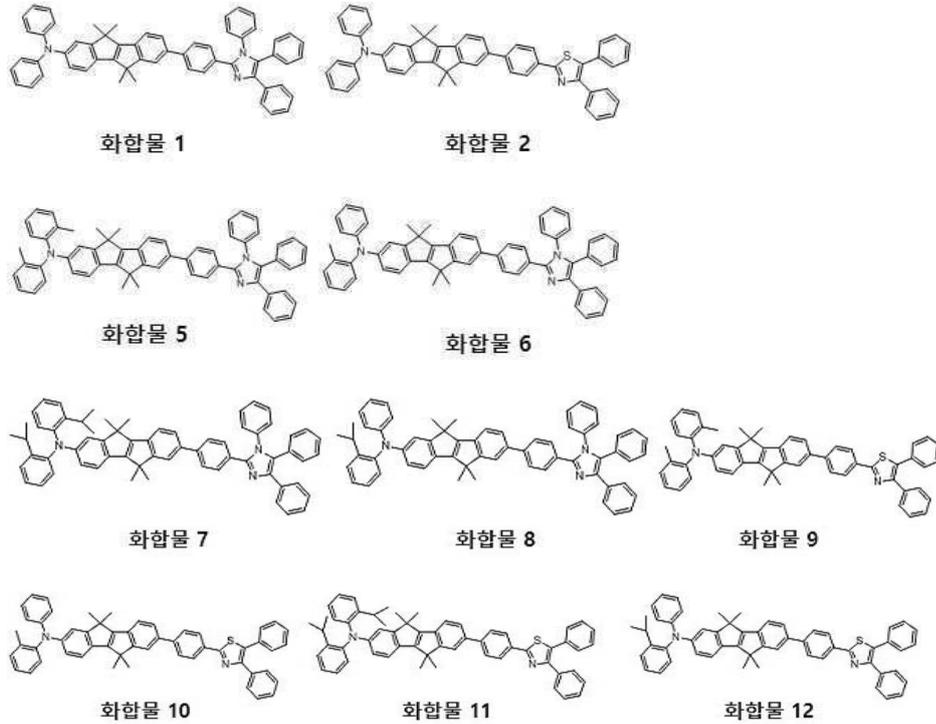
(화학식 4에서 X는 화학식 2에서 정의된 것과 동일함)

**청구항 6**

제 4항에 있어서,

상기 유기 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 어느 하나의 유기 화합물인 발광다이오드.

화학식 5



**청구항 7**

제 4항에 있어서,

상기 유기 화합물은, 발광물질층의 도펀트로 사용되는 유기발광다이오드.

**청구항 8**

제 7항에 있어서,

상기 발광물질층은 호스트를 더욱 포함하는 유기발광다이오드.

**청구항 9**

제 8항에 있어서,

상기 호스트의 최고준위점유분자궤도 에너지 준위( $HOMO^H$ )와 상기 도펀트의 최고준위점유분자궤도 에너지 준위( $HOMO^D$ )의 차이( $|HOMO^H - HOMO^D|$ ) 또는 상기 호스트의 최저준위비점유분자궤도 에너지 준위( $LUMO^H$ )와 상기 도펀트의 최저준위비점유분자궤도 에너지 준위( $LUMO^D$ )의 차이( $|LUMO^H - LUMO^D|$ )는 0.5 eV 이하인 유기발광다이오드.

**청구항 10**

제 4항에 있어서,

상기 유기 화합물의 단일항 에너지 준위( $S_1$ )와 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )의 차이( $\Delta E_{ST}$ )는 0.3 eV 이하인 유기발광 다이오드.

**청구항 11**

기판;

상기 기판 상에 위치하며, 제 4항 내지 제 10항 중 어느 하나의 항에 기재된 유기발광다이오드; 및

상기 기판 상에 위치하며 상기 유기발광다이오드의 제 1 전극과 연결되는 구동 소자

를 포함하는 유기발광장치.

**청구항 12**

제 11항에 있어서,

상기 유기발광장치는 유기발광다이오드 표시장치를 포함하는 유기발광장치.

**청구항 13**

삭제

**청구항 14**

삭제

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 유기 화합물에 관한 것으로, 더욱 상세하게는 발광 효율이 우수하여 유기발광다이오드의 발광층에 적용될 수 있는 유기 화합물, 이를 포함하는 유기발광다이오드 및 유기발광장치에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 현재 널리 사용되고 있는 평면표시소자 중 하나로서 유기전계발광소자(organic electroluminescent device; OLED)라고도 불리는 유기발광다이오드 소자의 기술이 빠른 속도로 발전하고 있다.

[0003] 유기발광다이오드(organic light emitting diodes; OLED)는 2000 Å 이내의 얇은 유기 박막으로 형성되고, 사용되는 전극의 구성에 따라 단일 방향 또는 양방향으로의 화상 구현이 가능하다. 또한 유기발광다이오드를 포함하는 유기발광장치의 하나인 유기발광다이오드 표시장치는 플라스틱과 같은 플렉서블(flexible) 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있어서 플렉서블 또는 폴더블(foldable) 표시장치를 구현할 수 있다. 뿐만 아니라, 유기발광다이오드 표시장치는 낮은 전압에서 구동이 가능하고, 색순도가 우수하여, 액정표시장치(liquid crystal display device; LCD)에 비하여 큰 장점을 가지고 있다.

[0004] 유기발광다이오드는 정공 주입 전극(양극)과, 전자 주입 전극(음극)과, 상기 양극과 음극 사이에 형성되는 유기 발광층을 포함한다. 발광 효율을 증가시키기 위하여, 유기발광층은 정공 주입 전극 상에 순차적으로 적층되는 정공주입층, 정공수송층, 발광물질층, 전자수송층, 전자주입층을 포함할 수 있다. 이때, 양극에서 주입된 정공(hole)과 음극에서 주입된 전자(electron)가 발광물질층에서 결합하여 여기자(엑시톤, exciton)을 형성하여 불안정한 에너지 상태(excited state)로 되었다가, 안정한 바닥 상태(ground state)로 돌아오며 빛을 방출한다.

발광물질층에 적용된 발광 물질의 외부양자효율(external quantum efficiency, EQE;  $\eta_{ext}$ )은 하기 식(1)로 연산할 수 있다.

$$\eta_{ext} = \eta_{S/T} \times r \times \Phi \times \eta_{out-coupling} \quad (1)$$

( $\eta_{S/T}$ 는 여기자생성효율(singlet/Triplet ratio),  $r$ 는 전하 균형 인자(charge balance factor);  $\Phi$ 는 방사양자효율(radiative quantum efficiency);  $\eta_{out-coupling}$ 은 광-추출 효율(out-coupling efficiency)임)

여기자생성효율( $\eta_{S/T}$ )은 생성된 여기자(exciton)가 빛의 형태로 전환되는 비율로, 형광 물질의 경우 최대 0.25의 제한적인 값을 갖는다. 이론적으로 정공과 전자가 만나 여기자를 형성할 때, 스핀의 배열에 따라 짝스핀(paired spin) 형태인 단일항 여기자(singlet exciton)과 홀스핀(unpaired spin) 형태인 삼중항 여기자(triplet exciton)이 1:3의 비율로 생성된다. 형광 물질에서는 단일항 여기자만이 발광에 참여하고 나머지 75%의 삼중항 여기자는 발광에 참여하지 못하기 때문이다.

전하균형인자( $r$ )는 여기자를 형성하는 정공과 전자의 균형을 의미하는데, 일반적으로 100%의 1:1 매칭(matching)을 가정하여 '1'의 값을 갖는다. 방사양자효율( $\Phi$ )은 실질적인 발광 물질의 발광 효율에 관여하는 값으로, 호스트(host)-도펀트(dopant) 시스템에서는 도펀트의 광-발광(photoluminescence, PL)에 의존한다.

광-추출 효율( $\eta_{out-coupling}$ )은 발광 물질에서 발광된 빛 중에서 외부로 추출되는 빛의 비율이다. 일반적으로 등방성(isotropic) 형태의 발광 물질을 열-증착하여 박막을 형성할 경우, 개개의 발광 분자는 일정한 방향성을 가지지 않고 무질서한 상태로 존재한다. 이와 같은 무질서한 배열(random orientation) 상태에서의 광-추출 효율은 일반적으로 0.2의 값으로 가정한다. 따라서 식 (1)에 나타난 4개의 요소들을 조합하면, 형광 물질을 이용한 유기발광다이오드의 최대 발광 효율은 약 5%에 불과하다.

반면, 인광 물질은 단일항 여기자와 삼중항 여기자를 모두 빛으로 전환시키는 발광 메커니즘을 가지고 있다. 인광 물질은 단일항 여기자를 계간전이(intersystem crossing; ISC)를 통해 삼중항으로 변환시킨다. 따라서 단일항 여기자와 삼중항 여기자를 모두 사용하는 인광 물질을 사용하는 경우, 형광 물질이 가지는 낮은 발광 효율을 향상시킬 수 있다. 인광 재료로서 Ir, Pt 등의 중금속을 포함하는 금속 착화합물을 사용하면, 중금속 원소에 의하여 강한 스핀-궤도 결합에 의하여 삼중항 상태에서 단일항 상태로의 전이가 가능하다. 그런데 특히 청색 인광 물질은 색순도가 표시장치에 적용하기 어려운 수준이며, 수명 또한 매우 짧아 상용화 수준에 크게 미치지 못하고 있다.

특히, 청색 인광 호스트는 청색 인광 도펀트의 삼중항 에너지가 호스트로 전이(back energy transfer)되는 것을 방지하기 위하여 인광 도펀트 재료의 삼중항 에너지보다 높아야 한다. 그런데, 유기 방향족 화합물은 공액화(conjugated) 구조가 늘어나거나 접합 고리(fused ring)를 가지게 되면, 삼중항 에너지가 급격하게 낮아지므로 청색 인광 호스트로 사용될 수 있는 유기 분자가 극히 제한된다. 아울러, 높은 삼중항 에너지를 가지기 위하여 인광 호스트는 에너지 밴드갭이 상당히 넓게 설계된다. 에너지 밴드갭이 넓은 인광 호스트 재료로 인하여 전하의 주입 및 수송이 지연되고, 이에 따라 유기발광다이오드의 구동 전압이 상승하면서 소비 전력 면에서 악영향을 미치게 되고, 발광층을 구성하는 재료에 전기적인 스트레스가 가해지면서 소자의 수명 특성이 저하되는 문제가 발생하였다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

본 발명의 목적은 발광 효율을 향상시킬 수 있는 유기 화합물과, 상기 유기 화합물을 이용하여 구동 전압을 낮춰서 소비 전력을 감소시키며, 소자 수명이 향상된 유기발광다이오드 및 유기발광장치를 제공하고자 하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

본 발명의 일 측면에 따르면, 본 발명은 전자주개(electron donor)로 작용하는 인데노인덴(indenindene) 고리로 치환된 트리 아릴 아민 모이어티에 전자받개(electron acceptor)로 작용하는 이미다졸(imidazole) 또는 티아졸(thiazole) 모이어티가 방향족 링커(linker)를 통하여 연결된 유기 화합물을 제공한다.

- [0014] 일례로, 전자주개를 구성하는 아민 원자는 인데노인덴 고리를 제외한 나머지 2곳이 호모 아틸기로 연결될 수 있으며, 전자주개와 전자받개 사이의 방향족 링커는 호모 아틸렌 고리일 수 있다.
- [0015] 본 발명의 다른 측면에 따르면, 본 발명은 전술한 유기 화합물이 유기발광층에 적용된 유기 발광다이오드와, 유기발광장치를 제공한다.
- [0016] 예를 들어, 상기 유기 화합물은 발광물질층에 적용될 수 있다.
- [0017] 하나의 예시적인 실시형태에서, 본 발명의 유기 화합물은 발광물질층의 도펀트로 사용될 수 있다.

**발명의 효과**

- [0018] 본 발명에 따른 유기 화합물은 전자주개(electron donor)로 작용하며, 인데노인덴(indenoindene) 고리를 가지는 트리 아틸 아민 모이어티에 전자받개(electron acceptor)로 작용하는 이미다졸(imidazole) 또는 티아졸(thiazole) 모이어티가 방향족 링커(linker)를 통하여 연결되어 있다.
- [0019] 4개의 방향족 고리가 축합된 인데노인덴 고리를 가지는 트리 아틸 아민 모이어티가 전자주개로 이용되고, 이미다졸 또는 티아졸 모이어티가 전자받개로 이용되는데, 전자주개를 구성하는 인데노인덴 고리와 전자받개 사이의 입체장애가 커지면서, 전자주개와 전자받개 사이의 이면각이 증가한다. 전자주개로 기능하는 인데노인덴 축합 방향족 고리를 가지는 트리 아틸 아민 모이어티와 전자받개로 기능하는 이미다졸/티아졸 모이어티 사이의 공액 구조(conjugate structure)의 형성이 제한되면서, 유기 화합물의 최고준위점유분자궤도(HOMO) 에너지 상태와 최저준위비점유분자궤도(LUMO) 에너지 상태로 쉽게 분리되면서 발광 효율이 향상될 수 있다.
- [0020] 또한, 전자주개로 기능하는 트리 아틸 아민 모이어티에서 전자받개로 기능하는 이미다졸/티아졸 모이어티로 쌍극자(dipole)가 형성되어, 분자 내부의 쌍극자 모멘트(dipole moment)가 증가하면서 발광 효율이 더욱 향상될 수 있다.
- [0021] 또한, 전자주개로 기능하며, 인데노인덴 축합 방향족 고리를 가지는 트리 아틸 아민 모이어티는 페닐렌과 같은 호모 또는 헤테로 아틸렌기를 통하여 전자받개인 이미다졸/티아졸 모이어티와 연결된다. 전자주개와 전자받개 사이의 거리가 증가하기 때문에, HOMO와 LUMO 간 중첩이 감소하게 되므로, 삼중항 에너지 준위와 단일항 에너지 준위의 차이( $\Delta E_{ST}$ )를 줄일 수 있다. 링커를 통한 입체장애에 의하여 본 발명에 따른 유기 화합물을 포함하는 유기발광층으로부터 발광되는 빛의 적색 천이(red shift) 문제를 최소화할 수 있다.
- [0022] 더욱이, 전자주개로 기능하는 트리 아틸 아민 모이어티는 견고한 구조의 축합 방향족 고리인 인데노인덴 고리를 가지고 있기 때문에, 분자의 3차원 입체구조(conformation)가 크게 제한된다. 본 발명에 따른 유기 화합물이 발광할 때 분자의 3차원 입체구조의 변경에 따른 에너지 손실이 없으며, 발광 스펙트럼을 특정 범위로 제한할 수 있기 때문에 고색순도를 구현할 수 있다.
- [0023] 따라서 본 발명의 유기 화합물을 유기발광다이오드를 구성하는 유기발광층, 예를 들어 발광물질층의 도펀트로 사용하여, 발광 소자의 구동 전압을 낮추고, 발광 효율을 향상시킬 수 있다. 낮은 전압에서도 구동이 가능하기 때문에 높은 전압에서 발생하는 열로 인하여 발광 소자가 열화되지 않으며, 발광 효율이 향상되어 발광 소자의 전류 밀도를 감소시킬 수 있기 때문에, 발광 소자를 구동할 때 부하를 감소시켜 소자의 수명이 증가한다.
- [0024] 결국, 본 발명에 따른 유기 화합물을 적용하여, 발광 효율 및 소자 수명 특성이 개선되며, 청색으로 발광할 수 있는 유기발광다이오드와, 유기발광다이오드 표시장치 및 조명 장치 등의 유기발광장치를 구현할 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

- [0025] 도 1은 본 발명의 예시적인 실시형태에 따른 유기 화합물이 지연 형광 물질로 사용되었을 때의 발광 메커니즘을 설명하기 위한 모식도이다.
- 도 2는 본 발명의 예시적인 실시형태에 따라 유기 화합물이 유기발광층에 적용된 유기발광다이오드를 개략적으로 도시한 단면도이다.
- 도 3은 본 발명의 예시적인 실시형태에 따른 유기 화합물이 지연 형광 물질로 사용되었을 때의 호스트로 사용되는 물질과의 에너지 준위를 설명하기 위한 모식도이다.
- 도 4는 본 발명의 다른 예시적인 실시형태에 따라 유기 화합물이 유기발광층에 적용된 유기발광다이오드를 개략적으로 도시한 단면도이다.

도 5는 본 발명의 예시적인 실시형태에 따라 유기 화합물이 유기발광층에 적용된 유기발광다이오드를 가지는 유기발광장치의 일례로서 유기발광다이오드 표시장치를 개략적으로 도시한 단면도이다.

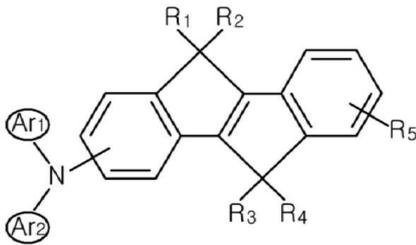
**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0026] 이하, 필요한 경우에 첨부하는 도면을 참조하면서 본 발명을 상세하게 설명한다.

[0027] [유기 화합물]

[0028] 본 발명에 따른 유기 화합물은 견고한 화학 구조를 가지는 인데노인덴(indenoindene) 방향족 고리를 가지며 전자주개(electron donor)로 기능하는 트리 아릴 아민 모이어티와, 트리 아릴 아민 모이어티에 적절한 방향족 링커(linker)를 통하여 연결되어 전자받개(electron acceptor)로 기능하는 이미다졸(imidazole) 또는 티아졸(thiazole)기를 포함한다. 본 발명에 따른 유기 화합물은 하기 화학식 1로 표시될 수 있다.

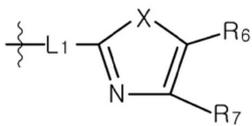
[0029] 화학식 1



[0030]

[0031] (화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 삼중수소, 치환되지 않거나 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> 알킬기 및 치환되지 않거나 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> 알콕시기로 구성되는 군에서 선택됨; R<sub>5</sub>는 하기 화학식 2로 표시됨; Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환되지 않거나 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 호모 아릴기 및 치환되지 않거나 치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로 아릴기로 구성되는 군에서 선택됨)

[0032] 화학식 2



[0033]

[0034] (화학식 2에서 R<sub>6</sub> 및 R<sub>7</sub>는 각각 독립적으로 치환되지 않거나 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 호모 아릴기 및 치환되지 않거나 치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로 아릴기로 구성되는 군에서 선택됨; X는 S 또는 NR<sub>8</sub>이고, R<sub>8</sub>은 치환되지 않거나 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 호모 아릴기 및 치환되지 않거나 치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로 아릴기로 구성되는 군에서 선택됨; L<sub>1</sub>은 치환되지 않거나 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 호모 아릴렌기 및 치환되지 않거나 치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로 아릴렌기로 구성되는 군에서 선택됨)

[0035] 본 명세서에서 '치환되지 않은' 또는 '치환되지 않거나'란, 수소 원자가 치환된 것을 의미하며, 이 경우 수소 원자는 경수소, 중수소 및 삼중수소가 포함된다.

[0036] 본 명세서에서 '치환된'에서 치환기는 예를 들어, 치환되지 않거나 할로젠 원자, 시아노기 및/또는 니트로기로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> 알킬기, 치환되지 않거나 할로젠 원자, 시아노기 및/또는 니트로기로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> 알콕시기, 할로젠 원자, 시아노기, -CF<sub>3</sub>와 같은 알킬할라이드기, 치환되지 않거나 할로젠 원자, 시아노기 및/또는 니트로기로 각각 치환된 하이드록시기, 카르복시기, 카르보닐기, 아민기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 알킬치환 아민기, C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 아릴치환 아민기, C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로아릴치환 아민기, 니트로기, 하이드라질기(hydrazyl group), 술폰산기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> 알킬 실릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> 알콕시 실릴기, C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub> 사이클로알킬 실릴기, C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 아릴 실릴기, C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로아릴 실릴기, C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 아릴기, C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로 아릴기, C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 호모 아랄킬기, C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로 아랄킬기, C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 호모 아랄콕시기 또는 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로 아랄콕시기 등을 들 수 있지만, 본 발명이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0037] 본 명세서에서 '헤테로 방향족 고리', '헤테로 사이클로알킬렌기', '헤테로 아릴기', '헤테로 아랄킬기', '헤테

로 아랄옥실기', '헤테로 아릴 아민기' 등에서 사용된 용어 '헤테로'는 이들 방향족 또는 지환족(alicyclic) 고리를 구성하는 탄소 원자 중 1개 이상, 예를 들어 1 내지 5개의 탄소 원자가 N, O, S 및 이들의 조합으로 구성되는 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로 원자로 치환된 것을 의미한다.

[0038] 예를 들어, 화학식 1 및 화학식 2에서  $R_1$  내지  $R_4$ 가 각각 알킬기 또는 알콕시기이고/이거나,  $Ar_1, Ar_2, R_6$  및/또는  $R_7$ 이 각각 독립적으로 알킬기 또는 알콕시기로 치환된 경우, 이들 알킬기 및/또는 알콕시기는 직쇄 또는 측쇄의  $C_1$ - $C_{20}$  알킬기 또는 알콕시기, 바람직하게는  $C_1$ - $C_{10}$  알킬기 또는 알콕시기일 수 있다.

[0039] 또한, 화학식 1 및 화학식 2에서  $Ar_1, Ar_2, R_6, R_7$  및/또는  $R_8$ 이 방향족 작용기인 경우, 이들 방향족 작용기는 각각 독립적으로 치환되지 않거나 치환된 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 테트라페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 인데닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 아줄레닐기, 파이레닐기, 플루오레닐기, 테트라세닐기, 인다세닐기 또는 스페이로 플루오레닐기와 같은 축합되지 않거나 축합된(fused) 호모 방향족 고리, 및/또는 피롤릴기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 테트라지닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 인돌일기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 인돌로카바졸일기, 인데노카바졸일기, 벤조푸라노카바졸일기, 벤조티에노카바졸일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 퓨라닐기, 피라닐기, 옥사지닐기, 옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아졸일기, 디옥시닐기, 벤조퓨라닐기, 디벤조퓨라닐기, 티오피라닐기, 티아지닐기, 티오펜닐기 또는 N-치환된 스페이로 플루오레닐기와 같은 축합되지 않거나 축합된 헤테로 방향족 고리일 수 있다.

[0040] 예를 들어, 화학식 1 및 화학식 2에서  $Ar_1, Ar_2, R_6, R_7$  및/또는  $R_8$ 은 각각 독립적으로 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 또는 스페이로플루오레닐기와 같은 호모 아릴기 및/또는 벤조티오펜일기, 디벤조티오펜일기, 벤조퓨라닐기, 디벤조퓨라닐기, 피롤릴기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 테트라지닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 인돌일기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 인돌로카바졸일기, 인데노카바졸일기, 벤조푸라노카바졸일기, 벤조티에노카바졸일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 벤조퀴나졸리닐기 또는 벤조퀴녹살리닐기와 같은 헤테로 아릴기일 수 있다.

[0041] 이때, 화학식 1 및 화학식 2에서  $Ar_1, Ar_2, R_6, R_7$  및/또는  $R_8$ 을 구성하는 방향족 고리의 개수가 많아지면, 전체 유기 화합물에서 공액화(conjugated) 구조가 지나치게 길어져서, 유기 화합물의 밴드갭이 지나치게 줄어들 수 있다. 따라서 바람직하게는 화학식 1 및 화학식 2에서  $Ar_1, Ar_2, R_6, R_7$  및/또는  $R_8$ 을 각각 구성하는 방향족 고리의 개수는 1 내지 2개, 더욱 바람직하게는 1개이다. 또한, 전하의 주입 및 이동 특성과 관련하여, 화학식 1 및 화학식 2에서  $Ar_1, Ar_2, R_6, R_7$  및/또는  $R_8$ 은 각각 5-원자 고리(5-membered ring) 내지 7-원자 고리(7-membered ring)일 수 있으며, 특히 6-원자 고리(6-membered ring)인 것이 바람직할 수 있다. 예를 들어, 화학식 1 및 화학식 2에서  $Ar_1, Ar_2, R_6, R_7$  및/또는  $R_8$ 은 각각 독립적으로 치환되거나 치환되지 않은 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기, 바이페닐기, 피롤기, 이미다졸기, 피라졸기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퓨라닐기 또는 티오펜닐기일 수 있다.

[0042] 한편, 하나의 비-제한적인 실시형태에서, 화학식 2에서 링커(연결기)인  $L_1$  은 전자주개 모이어티와 전자받개 모이어티를 매개하며, 치환되지 않거나 치환된 방향족 연결기일 수 있다. 예를 들어,  $L_1$ 이 치환되지 않거나 치환된  $C_5$ - $C_{30}$  아릴렌기인 경우,  $L_1$ 은 치환되지 않거나 치환된 페닐렌기(phenylene), 바이페닐렌기(biphenylene), 터페닐렌기(terphenylene), 테트라페닐렌기(tetraphenylene), 인데닐렌기(indenylene), 나프틸렌기(naphthylene), 아줄레닐렌기(azulenylene), 인다세닐렌기(indacenylene), 아세나프틸렌기(acenaphthylene), 플루오레닐렌기(fluorenylene), 스페이로-플루오레닐렌기, 페날레닐렌기(phenalenylene), 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 안트라세닐렌기(anthracenylene), 플루오란트레닐렌기(fluoranthrenylene), 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 파이레닐렌기(pyrenylene), 크라이세닐렌기(chrysenylene), 나프타세닐렌기(naphtacenylene), 피세닐렌기(picenylene), 페릴레닐렌기(perylene), 펜타페닐렌기(pentaphenylene) 및 헥사세닐렌기(hexacenylene)로 구성되는 군에서 선택될 수 있다.

[0043] 다른 선택적인 실시형태에서,  $L_1$ 이 치환되지 않거나 치환된  $C_4$ - $C_{30}$  헤테로 아릴렌기인 경우,  $L_1$ 은 치환되지 않거나

나 치환된 피롤릴렌기(pyrrolylene), 이미다졸일렌기(imidazolylene), 피라졸일렌기(pyrazolylene), 피리디닐렌기(pyridinylene), 피라지닐렌기(pyrazinylene), 피리미디닐렌기(pyrimidinylene), 피리다지닐렌기(pyridazinylene), 이소인돌일렌기(isoindolylene), 인돌일렌기(indolylene), 인다졸일렌기(indazolylene), 푸리닐렌기(purinylene), 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 이소퀴놀리닐렌기(isoquinolinylene), 벤조퀴놀리닐렌기(benzoquinolinylene), 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 나프티리디닐렌기(naphthyridinylene), 퀴녹살리닐렌기(quinoxalinylene), 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylene), 벤조퀴놀리닐렌기, 벤조이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴나졸리닐렌기, 벤조퀴녹살리닐렌기, 시놀리닐렌기(cinnolinylene), 페난트리디닐렌기(phenanthridinylene), 아크리디닐렌기(acridinylene), 페난트롤리닐렌기(phenanthrolinylene), 페나지닐렌기(phenazinylene), 벤즈옥사졸일렌기(benzoxazolylene), 벤즈이미다졸일렌기(benzimidazolylene), 퓨라닐렌기(furanylene), 벤조퓨라닐렌기(benzofuranylene), 티오펜일렌기(thiophenylene), 벤조티오펜일렌기(benzothiophenylene), 티아졸일렌기(thiazolylene), 이소티아졸일렌기(isothiazolylene), 벤조티아졸일렌기(benzothiazolylene), 이소옥사졸일렌기(isoxazolylene), 옥사졸일렌기(oxazolylene), 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기(oxadiazolylene), 트리아지닐렌기(triazinylene), 벤조퓨라닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기(dibenzofuranylene), 벤조퓨로디벤조퓨라닐렌기, 벤조티에노벤조퓨라닐렌기, 벤조티에노디벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜일렌기, 디벤조티오펜일렌기(dibenzothiophenylene), 벤조티에토벤조티오펜일렌기, 벤조티에노디벤조티오펜일렌기, 카바졸일렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 인돌로카바졸일렌기, 인데노카바졸일렌기, 벤조퓨로카바졸일렌기, 벤조티에노카바졸일렌기, 이미다조피리미디닐렌기(imidazopyrimidinylene) 및 이미다조피리디닐렌기(imidazopyridinylene)로 구성되는 군에서 선택될 수 있다.

[0044] 하나의 예시적인 실시형태에서,  $L_1$ 을 구성하는 방향족 고리의 개수가 많아지면, 전체 유기 화합물에서 공액화(conjugated) 구조가 지나치게 길어져서, 유기 화합물의 밴드갭이 지나치게 줄어들 수 있다. 따라서 바람직하게는  $L_1$ 을 구성하는 방향족 고리의 개수는 1 내지 2개, 더욱 바람직하게는 1개이다. 또한 전하의 주입 및 이동 특성과 관련하여,  $L_1$ 은 5-원자 고리(5-membered ring) 내지 7-원자 고리(7-membered ring)일 수 있으며, 특히 6-원자 고리(6-membered ring)인 것이 바람직할 수 있다. 예를 들어,  $L_1$ 은 치환되지 않거나 치환된 페닐렌기, 바이페닐렌기, 피롤릴렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 퓨라닐렌기 또는 티오펜일렌기일 수 있다.

[0045] 화학식 1 내지 화학식 2로 표시되는 유기 화합물은 전자주개(electron donor)로 기능할 수 있으며, 견고한 구조를 가지는 인데노인덴 축합 방향족 고리를 가지는 트리 아릴 아민 모이어티를 가지며, 트리 아릴 아민 모이어티가 방향족 링커를 통하여 전자받개(electron acceptor)로 기능할 수 있는 이미다졸(imidazole) 고리 또는 티아졸(thiazole) 고리가 연결된다. 4개의 방향족 고리로 이루어지는 인데노인덴 고리의 입체장애(steric hindrance)가 크기 때문에, 인데노인덴 고리가 방향족 고리가 방향족 연결기를 통하여 헤테로 방향족 고리와 화학 결합을 형성하여 합성되는 본 발명의 유기 화합물의 3차원 입체구조(conformation)가 제한된다. 이에 따라 본 발명에 따른 유기 화합물은 견고한(rigid) 구조를 가지게 되어 열 안정성이 향상된다. 화학식 1 내지 화학식 2로 표시되는 유기 화합물이 발광할 때 분자의 3차원 입체구조의 변경에 따른 에너지 손실이 없으며, 발광 스펙트럼을 특정 범위로 제한할 수 있기 때문에 양호한 색순도를 구현할 수 있다.

[0046] 특히, 본 발명에 따른 유기 화합물을 사용하여 저-전압 구동이 가능하여 소비 전력을 줄일 수 있으며, 소자 수명이 향상된 발광다이오드를 구현할 수 있다. 일례로, 본 발명에 따른 유기 화합물은 유기발광다이오드를 구성하는 유기발광층의 도펀트(dopant)로 사용될 수 있으며, 특히 이른바 지연 형광(delayed fluorescence) 특성을 가지게 되는데, 이에 대해서 설명한다.

[0047] 도 1은 본 발명에 따른 유기 화합물이 지연 형광 화합물로서 사용되었을 때의 발광 메커니즘을 설명하기 위한 모식도이다. 지연 형광은 열-활성지연형광(thermally activated delayed fluorescence; TADF)와 전계-활성지연형광(field activated delayed fluorescence; FADF)로 구분될 수 있는데, 열 또는 전계에 의하여 삼중항 여기자가 활성화되어, 종래 형광 물질에서의 최대 발광 효율을 뛰어넘는 이른바 초-형광을 구현할 수 있다.

[0048] 즉, 지연 형광 화합물은 소자를 구동할 때 발생하는 열이나 전계에 의하여 삼중항 여기자가 활성화되어 삼중항 여기자도 발광에 관여한다. 일반적으로 지연 형광 화합물은 전자주개 모이어티와 전자받개 모이어티를 모두 가지고 있어서 분자내전하이동(intramolecular charge transfer, ICT) 상태로의 변환이 가능하다. ICT가 가능한 지연 형광 화합물을 도펀트로 이용하면, 지연 형광 화합물에서 단일항 에너지 준위( $S_1$ )를 가지는 여기자와 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )를 가지는 여기자가 중간 상태인 ICT 상태로 이동하고, 바닥 상태(ground state,  $S_0$ )로 전이

된다( $S_1 \rightarrow ICT \leftarrow T_1$ ). 단일항 에너지 준위( $S_1$ )를 가지는 여기자와 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )를 가지는 여기자가 모두 발광에 참여하기 때문에 내부양자효율이 향상되고, 이에 따라 발광 효율이 향상된다.

[0049] 종래의 형광 물질은 최고준위점유분자궤도(Highest Occupied Molecular Orbital; HOMO)와 최저준위비점유분자궤도(Lowest Unoccupied Molecular Orbital; LUMO)가 분자 전체에 퍼져있기 때문에, 단일항 상태와 삼중항 상태 사이의 상호 전환이 불가능하다(선택 규칙, selection rule). 하지만, ICT 상태를 가지는 화합물은 HOMO와 LUMO의 궤도 겹침이 적기 때문에, HOMO 상태의 궤도와 LUMO 상태의 궤도 사이의 상호작용이 작다. 따라서 전자의 스핀 상태 변화가 다른 전자에 영향을 미치지 않게 되고, 선택 규칙을 따르지 않는 새로운 전하 이동 밴드(charge transfer band, CT band)가 형성된다.

[0050] 즉, 지연 형광 화합물에서 전자받개 모이어티와 전자주개 모이어티가 분자 내에서 이격되어 있기 때문에, 분자 내 쌍극자 모멘트(dipole moment)가 큰 분극 상태로 존재하게 된다. 쌍극자 모멘트가 분극된 상태에서 HOMO와 LUMO 상태의 궤도 간의 상호작용이 작아지고, 삼중항 상태와 단일항 상태에서 중간 상태(ICT)로 전이가 가능해진다. 이에 따라, 단일항 에너지 준위( $S_1$ )를 가지는 여기자는 물론이고 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )를 가지는 여기자가 발광에 참여한다. 즉, 발광 소자가 구동되면, 열이나 전계에 의하여 25%의 단일항 에너지 준위( $S_1$ )를 가지는 여기자와 75%의 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )를 가지는 여기자가 중간 상태(ICT)로 전이되고, 다시 바닥 상태( $S_0$ )로 떨어지면서 발광이 일어나기 때문에, 내부양자효율은 이론적으로 100%가 된다.

[0051] 지연 형광을 구현하기 위한 도펀트는 다음과 같은 특징을 가질 필요가 있다. 도펀트는 한 분자 내에 전자주개 모이어티와 전자받개 모이어티를 동시에 가지고 있어 ICT 상태를 구현할 수 있어야 한다. 도펀트는 통상 ICT 상태의 착물(ICT 착물) 형태를 가지는데, 한 분자 내에 전자주개 모이어티와 전자받개 모이어티를 동시에 가지고 있어서 분자 내에서 전자 이동이 쉽게 일어난다. 즉, ICT 착물은 특정 조건에서 전자주개 모이어티에서 하나의 전자가 전자받개 부분으로 이동하여 분자 내에서 전하의 분리가 일어난다.

[0052] 또한, 삼중항 상태와 단일항 상태에서 모두 에너지 전이가 일어나기 위해서는, 지연 형광을 구현하기 위한 도펀트는 단일항 에너지 준위( $S_1$ )와 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )의 차이( $\Delta E_{ST}$ )가 0.3 eV 이하, 예를 들어 0.05 내지 0.3 eV이어야 한다. 이 경우 단일항 상태와 삼중항 상태의 에너지 차이가 작은 재료는 단일항 상태에서 삼중항 상태로 에너지가 전이되는 계간전이(Inter System Crossing; ISC)가 일어나면서 형광을 나타낼 뿐만 아니라, 상온 수준의 열 에너지 또는 전계에 의하여 삼중항 상태에서 에너지가 보다 높은 단일항 상태로 역 계간전이(Reverse Inter System Crossing; RISC)되고 이 단일항 상태가 바닥 상태로 전이되면서 지연 형광을 나타낸다. 지연 형광의 경우 이론적으로 최대 100%의 효율을 얻을 수 있기 때문에, 종래의 중금속을 포함하는 인광 재료와 동등한 내부 양자 효율을 구현할 수 있다. 하지만, 종래 지연형광 특성을 가지는 화합물의 전자주개-전자받개의 결합 구조 및 구조적 뒤틀림으로 인하여, 추가적인 전하 이동 전이(charge transfer transition, CT transition)이 유발되기 때문에, 발광할 때 넓은 스펙트럼을 가지게 되어 색순도를 저하시키는 단점이 있다.

[0053] 화학식 1 내지 화학식 2로 표시되는 유기 화합물은 전자주개로 기능하며, 인데노인텐 고리를 가지는 트리 아릴 아민 모이어티와, 전자받개로 기능하는 헥테로 방향족 고리인 이미다졸 또는 티아졸 모이어티가 1개의 분자 내에 공존하기 때문에, 지연 형광 특성을 보일 수 있다. 특히, 인데노인텐 고리와 이미다졸 또는 티아졸 고리 사이의 입체장애가 크기 때문에, 공액 구조의 형성이 제한되고, HOMO와 LUMO 상태로 쉽게 분리된다. 인데노인텐 고리를 가지는 트리 아릴 아민 모이어티와 이미다졸 또는 티아졸 모이어티에 쌍극자가 형성되면서 분자 내부의 쌍극자 모멘트가 증가하여, 발광 효율이 향상된다. 전자주개와 전자받개가 분자 내에 공존하여, 분자의 HOMO와 LUMO의 중첩이 감소한다.

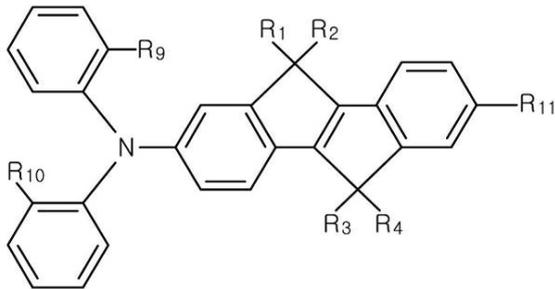
[0054] 또한, 링커(화학식 2에서  $L_1$ 으로 표시)인 방향족 연결기를 통하여 트리 아릴 아민 모이어티와 이미다졸/티아졸 모이어티가 연결되어 있어서, HOMO와 LUMO의 중첩이 더욱 감소하므로, 삼중항 에너지 준위와 단일항 에너지 준위의 에너지 준위의 차이( $\Delta E_{ST}$ )를 줄일 수 있다. 특히 트리 아릴 아민 모이어티를 구성하는 질소 원자는 견고한 구조의 축합 방향족 고리인 인데노인텐 고리로 연결되어 있기 때문에, 트리 아릴 아민 모이어티와 이미다졸/티아졸 모이어티 사이의 입체구조가 제한된다. 발광할 때 에너지 손실이 없으며 효율이 우수하고 고색순도의 청색 발광을 구현할 수 있다.

[0055] 특히, 화학식 1 내지 화학식 2로 표시되는 유기 화합물을 발광물질층의 도펀트로 사용할 때, 화학식 1 내지 화학식 2로 표시되는 유기 화합물의 삼중항 에너지 준위는 종래의 인광 재료의 삼중항 에너지보다 낮으며 에너지 밴드갭은 종래의 인광 재료보다 좁다. 따라서, 화학식 1 내지 화학식 2로 표시되는 유기 화합물과 함께 사용할

는 유기 호스트는 종래의 인광 재료를 사용할 때만큼 높은 삼중항 에너지 준위를 가질 필요가 없으며, 밴드갭도 넓을 필요가 없다. 따라서 종래 인광 재료를 적용할 때 한계로 작용하였던 삼중항 에너지가 높은 유기 화합물을 호스트로 사용할 필요가 없으며, 에너지 밴드갭이 넓은 인광 호스트를 반드시 사용하지 않아도 된다. 에너지 밴드갭이 넓은 호스트를 사용함으로써 전하의 주입 및 수송이 지연되고, 이에 따라 발광다이오드의 구동 전압이 상승하고, 소비 전력이 증가하며, 소자의 수명 특성이 저하되는 것을 방지할 수 있다.

[0056] 하나의 예시적인 실시형태에서, 본 발명에 따른 유기 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 유기 화합물을 포함한다.

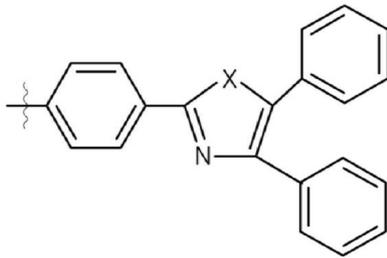
[0057] 화학식 3



[0058]

[0059] (화학식 3에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 화학식 1에서 정의된 것과 동일함; R<sub>9</sub> 및 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 삼중수소, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> 알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub> 알콕시기, C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub> 호모 아릴기 및 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 헤테로 아릴기로 구성되는 군에서 선택됨; R<sub>11</sub>은 하기 화학식 4로 표시됨)

[0060] 화학식 4

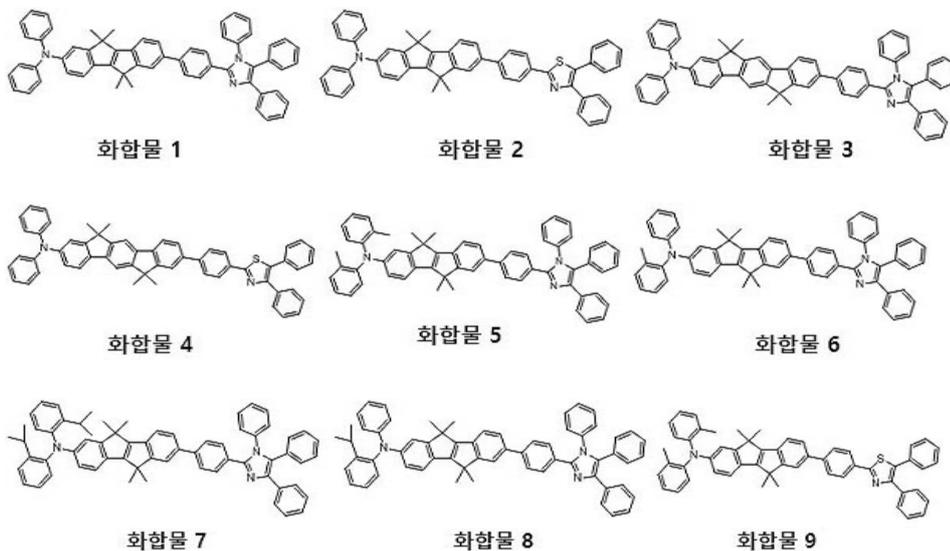


[0061]

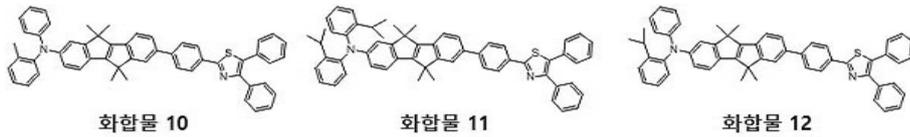
[0062] (화학식 4에서 X는 화학식 2에서 정의된 것과 동일함)

[0063] 보다, 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 어느 하나의 화합물일 수 있다.

[0064] 화학식 5



[0067]



[0068]

[0069]

화학식 3 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물은 전자주개로 기능하며, 견고한 구조의 인데노인덴 고리를 가지는 트리 아릴 아민 모이어티와, 전자받개로 기능하는 이미다졸/티아졸 모이어티가 적절한 공액 구조를 가지는 페닐렌 고리로 연결된다. 전자주개인 트리 아릴 아민 모이어티와 전자받개인 이미다졸/티아졸 모이어티가 1분자 내에 존재하여 쌍극자 모멘트가 증가하고 HOMO와 LUMO가 쉽게 분리되어 쌍극자 모멘트가 증가할 수 있는 구조를 가진다. 따라서, 화학식 3 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물은 지연형광 재료로 응용될 수 있으며, 화학식 3 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물을 사용하여 유기발광다이오드의 발광 효율을 향상시키고 색순도가 개선될 수 있다. 또한, 화학식 3 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물을 유기발광다이오드에 적용하여, 유기발광다이오드의 구동 전압을 낮춰서 소비 전력을 줄일 수 있으며, 발광층을 구성하는 유기 재료에 전기적인 스트레스를 감소시켜 소자의 수명 특성을 개선할 수 있다.

[0070]

[유기발광다이오드 및 유기발광장치]

[0071]

전술한 바와 같이, 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물을 유기발광다이오드를 구성하는 유기발광층에 적용하여, 특히 고순도의 발광 컬러를 얻을 수 있고, 구동 전압을 낮추어 소비 전력을 감소시킬 수 있으며, 소자 수명 특성이 개선된 발광 소자를 구현할 수 있다. 이에 대해서 설명한다. 도 2는 본 발명의 예시적인 실시 형태에 따라 유기 화합물이 유기발광층에 적용된 유기발광다이오드를 개략적으로 도시한 단면도이다.

[0072]

도 2에 도시한 바와 같이, 본 발명의 제 1 실시형태에 따른 유기발광다이오드(100)는 서로 마주하는 제 1 전극(110) 및 제 2 전극(120)과, 제 1 및 제 2 전극(110, 120) 사이에 위치하는 유기발광층(130)을 포함한다. 예시적인 실시형태에서, 유기발광층(130)은 제 1 전극(110)으로부터 순차적으로 적층되는 정공주입층(hole injection layer, HIL, 140), 정공수송층(hole transfer layer, HTL, 150), 발광물질층(emissive material layer, EML, 160), 전자수송층(electron transfer layer, ETL, 170) 및 전자주입층(electron injection layer, EIL, 180)을 포함한다.

[0073]

제 1 전극(110)은 발광물질층(160)에 정공을 공급하는 양극(anode)일 수 있다. 제 1 전극(110)은 일함수(work function) 값이 비교적 큰 도전성 물질, 예를 들어 투명 도전성 산화물(transparent conductive oxide; TCO)로 형성되는 것이 바람직하다. 예시적인 실시형태에서, 제 1 전극(110)은 인듐-주석-산화물(indium-tin-oxide; ITO), 인듐-아연-산화물(indium-zinc-oxide; IZO), 인듐-주석-아연-산화물(indium-tin-zinc oxide; ITZO), 주석산화물(SnO), 아연산화물(ZnO), 인듐-구리-산화물(indium-copper-oxide; ICO) 및 알루미늄:산화아연(Al:ZnO; AZO)으로 이루어질 수 있다.

[0074]

제 2 전극(120)은 발광물질층(160)에 전자를 공급하는 음극(cathode)일 수 있다. 제 2 전극(120)은 일함수 값이 비교적 작은 도전성 물질, 예를 들어 알루미늄(Al), 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 은(Ag), 또는 이들의 합금이나 조합과 같은 반사 특성이 좋은 소재로 이루어질 수 있다.

[0075]

정공주입층(140)은 제 1 전극(110)과 정공수송층(150) 사이에 위치하는데, 무기물인 제 1 전극(110)과 유기물인 정공수송층(150) 사이의 계면 특성을 향상시킨다. 하나의 예시적인 실시형태에서, 정공주입층(140)은 4,4',4"-트리스(3-메틸페닐아미노)트리페닐아민(4,4',4"-Tris(3-methylphenylamino)triphenylamine; MTDATA), 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐-아미노)트리페닐아민(4,4',4"-Tris(N,N-diphenyl-amino)triphenylamine; NATA), 4,4',4"-트리스(N-(나프탈렌-1-일)-N-페닐-아미노)트리페닐아민(4,4',4"-Tris(N-(naphthalene-1-yl)-N-phenyl-amino)triphenylamine; 1T-NATA), 4,4',4"-트리스(N-(나프탈렌-2-일)-N-페닐-아미노)트리페닐아민(4,4',4"-Tris(N-(naphthalene-2-yl)-N-phenyl-amino)triphenylamine; 2T-NATA), 프탈로시아닌구리(Copper phthalocyanine; CuPc), 트리스(4-카바조일-9-일-페닐)아민(Tris(4-carbazoyl-9-yl-phenyl)amine; TCTA), N,N'-디페닐-N,N'-비스(1-나프틸)-1,1'-바이페닐-4,4"-디아민(N,N'-Diphenyl-N,N'-bis(1-naphthyl)-1,1'-biphenyl-4,4"-diamine; NPB; NPD), 1,4,5,8,9,11-헥사아자트리페닐렌헥사카보니트릴(1,4,5,8,9,11-Hexaazatriphenylenehexacarbonitrile, Dipyrazino[2,3-f:2'3'-h]quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile; HAT-CN), 1,3,5-트리스[4-(디페닐아미노)페닐]벤젠(1,3,5-tris[4-(diphenylamino)phenyl]benzene; TDAPB), 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)폴리스티렌 술포네이트(poly(3,4-ethylenedioxythiophene)polystyrene sulfonate; PEDOT/PSS) 및/또는 N-(바이페닐-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민(N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-

carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine) 등으로 이루어지는 어느 하나의 화합물로 이루어질 수 있다. 유기 발광다이오드(100)의 특성에 따라 정공주입층(140)은 생략될 수 있다.

- [0076] 정공수송층(150)은 제 1 전극(110)과 발광물질층(160) 사이에 발광물질층(160)에 인접하여 위치한다. 하나의 예시적인 실시형태에서, 정공수송층(150)은 N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-1,1'-바이페닐-4,4'-디아민(N,N'-Diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)-1,1'-biphenyl-4,4'-diamine; TPD), NPB, 4,4'-비스(N-카바졸릴)-1,1'-바이페닐(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl; CBP), 폴리[N,N'-비스(4-부틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘](Poly[N,N'-bis(4-butylphenyl)-N,N'-bis(phenyl)-benzidine]; Poly-TPD), 폴리[(9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디일)-co-(4,4'-(N-(4-sec-부틸페닐)디페닐아민))](Poly[(9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl)-co-(4,4'-(N-(4-sec-butylphenyl)diphenylamine))]), TFB), 디-[4-(N,N-디-p-톨릴-아미노)페닐]사이클로hex산(Di-[4-(N,N-di-p-tolyl-amino)-phenyl]cyclohexane; TAPC), N-(비페닐-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민(N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine) 및/또는 N-(바이페닐-4-일)-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)바이페닐-4-아민(N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)biphenyl-4-amine) 등으로 구성되는 군에서 선택되는 화합물로 이루어질 수 있지만, 본 발명이 이에 한정되지 않는다.
- [0077] 발광물질층(160)은 호스트(host)에 도펀트(dopant)가 도핑되어 이루어질 수 있다. 일례로, 발광물질층(160)은 호스트에 도펀트가 약 1 내지 50 중량% 첨가될 수 있으며, 청색을 발광할 수 있다.
- [0078] 하나의 예시적인 실시형태에서, 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물은 발광물질층(160)의 도펀트로 사용될 수 있다. 한편, 발광물질층(160)에 사용되는 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물인 도펀트는 지연 형광 특성을 가지는 도펀트일 수 있다.
- [0079] 전술한 바와 같이, 지연 형광 특성을 가지는 화합물은 열이나 전계에 의해 활성화되어 ICT 착물 형태와 같은 중간 에너지 상태를 갖는다. 단일항 에너지 준위를 가지는 여기자와 삼중항 에너지 준위를 가지는 여기자가 모두 발광에 관여하기 때문에 유기발광다이오드(100)의 발광 효율을 향상시킬 수 있다.
- [0080] 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물의 단일항 에너지 준위( $S_1$ )와 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )의 차이( $\Delta E_{ST}$ )가 0.3 eV 이하, 예를 들어 0.05 내지 0.3 eV일 수 있다. 지연 형광 도펀트로 사용될 수 있는 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물의 단일항 에너지 준위( $S_1$ )와 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )의 차이( $\Delta E_{ST}$ )가 0.3 eV 이하인 경우, 이들 에너지 준위에서 각각 중간 에너지 상태로 전이되고, 최종적으로 바닥 상태로 떨어지면서 도펀트의 양자 효율이 향상될 수 있다. 즉,  $\Delta E_{ST}$ 가 작을수록 발광 효율이 증가할 수 있으며, 도펀트의 단일항 에너지 준위( $S_1$ )와 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )의 차이가 0.3 eV 이하인 경우, 열이나 전계에 의하여 단일항 상태 여기자와 삼중항 상태 여기자가 중간 상태인 ICT 착물 상태로 전이될 수 있다( $\Delta E_{ST} \leq 0.3$ ).
- [0081] 한편, 지연 형광을 구현하기 위해서 발광물질층(160)에 포함되는 호스트는 도펀트에서의 삼중항 상태의 여기자가 소광(비발광 소멸, quenching)되지 않고 발광에 관여할 수 있도록 유도할 수 있어야 한다. 도 3은 본 발명의 예시적인 실시형태에 따른 유기 화합물을 호스트로 사용하였을 때, 지연 형광 화합물의 에너지 준위와의 상관 관계를 설명하기 위한 모식도이다.
- [0082] 도 3에 도시한 바와 같이, 지연형광을 구현하기 위한 호스트는 도펀트와의 에너지 준위가 조절되어야 한다. 먼저, 호스트의 삼중항 에너지 준위( $T_1^H$ )는 도펀트의 삼중항 에너지 준위( $T_1^D$ )보다 높아야 한다. 호스트의 삼중항 에너지 준위( $T_1^H$ )가 도펀트의 삼중항 에너지 준위( $T_1^D$ )보다 충분히 높지 않은 경우에는, 도펀트의 삼중항 상태 여기자가 호스트의 삼중항 에너지 준위( $T_1^H$ )로 넘어가게 되고, 비발광으로 소멸되기 때문에, 도펀트의 삼중항 상태 엑시톤이 발광이 기여하지 못하게 된다.
- [0083] 또한, 호스트와 도펀트의 HOMO 에너지 준위와 LUMO 에너지 준위를 적절하게 조정할 필요가 있다. 일례로, 호스트의 최고준위점유분자궤도 에너지 준위( $HOMO^H$ )와 도펀트의 최고준위점유분자궤도 에너지 준위( $HOMO^D$ )의 차이 ( $|HOMO^H - HOMO^D|$ ) 또는 호스트의 최저준위비점유분자궤도 에너지 준위( $LUMO^H$ )와 도펀트의 최저준위비점유분자궤도 에너지 준위( $LUMO^D$ )의 차이 ( $|LUMO^H - LUMO^D|$ )는 0.5 eV 이하, 예를 들어, 0.1 내지 0.5 eV 이하인 것이 바람직할 수 있다. 이에 따라, 호스트에서 도펀트로의 전하 이동 효율이 향상되어, 최종적으로 발광 효율을 향상시킬 수

있다.

- [0084] 하나의 예시적인 실시형태에서, 발광물질층(160)의 호스트는 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-9H-카바졸-3-카보니트릴(9-(3-(9H-carbazol-9-yl)phenyl)-9H-carbazole-3-carbonitrile; mCP-CN), CBP, 3,3'-비스(N-카바졸릴)-1,1'-바이페닐(3,3'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl; mCBP), 1,3-비스(카바졸-9-일)벤젠(1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzene; MCP), (옥시비스(2,1-페닐렌))비스(디페닐포스핀 옥사이드; DPEPO), 2T-NATA, TCTA, 1,3,5-트리[(3-피리딜)-펜-3-일]벤젠(1,3,5-Tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene; TmPyPB), 2,6-디(9H-카바졸-9-일)피리딘(2,6-Di(9H-carbazol-9-yl)pyridine; PYD-2Cz), 3', 5'-디(카바졸-9-일)-[1,1'-바이페닐]-3,5-디카보니트릴(3',5'-Di(carbazol-9-yl)-[1,1'-bipheyl]-3,5-dicarbonitrile; DCzTPA), 4'-(9H-카바졸-9-일)biphenyl-3,5-dicarbonitrile(4'-(9H-carbazol-9-yl)biphenyl-3,5-dicarbonitrile; pCzB-2CN), 3'-(9H-카바졸-9-일)바이페닐-3,5-디카보니트릴(3'-(9H-carbazol-9-yl)biphenyl-3,5-dicarbonitrile; mCzB-2CN), 4-(3-(트리페닐렌-2-일)페닐)디벤조[b,d]티오펜(4-(3-(triphenylen-2-yl)phenyl)dibenzo[b,d]thiophene), 9-(4-(9H-카바졸-9-일)페닐)-9H-3,9'-바이카바졸(9-(4-(9H-carbazol-9-yl)phenyl)-9H-3,9'-bicarbazole) 및/또는 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-9H-3,9'-바이카바졸(9-(3-(9H-carbazol-9-yl)phenyl)-9H-3,9'-bicarbazole) 등을 포함하지만, 본 발명이 이에 한정되지 않는다.
- [0085] 다시 도 2 로 돌아가면, 발광물질층(160)과 제 2 전극(120) 사이에는 전자수송층(170)과 전자주입층(180)이 순차적으로 적층될 수 있다. 전자수송층(170)을 이루는 소재는 높은 전자 이동도가 요구되는데, 원활한 전자 수송을 통하여 발광물질층(160)에 전자를 안정적으로 공급한다.
- [0086] 하나의 예시적인 실시형태에서, 전자수송층(170)은 옥사디아졸(oxadiazole), 트리아졸(triazole), 페난트롤린(phenanthroline), 벤조사졸(benzoxazole), 벤조티아졸(benzothiazole), 벤즈이미다졸, 트리아진 등의 유도체일 수 있다.
- [0087] 일례로, 전자수송층(170)은 트리스(8-하이드록시퀴놀린)알루미늄(tris-(8-hydroxyquinoline aluminum; Alq<sub>3</sub>), 2-바이페닐-4-일-5-(4-터셔리-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(2-biphenyl-4-yl-5-(4-t-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole; PBD), 스파이로-PBD, 리튬 퀴놀레이트(lithium quinolate; Liq), 1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-Tris(N-phenylbenzimidazol-2-yl)benzene; TPBi), 비스(2-메틸-8-퀴놀리노라토-N1,08)-(1,1'-바이페닐-4-올라토)알루미늄(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,08)-(1,1'-biphenyl-4-olato)aluminum; BAlq), 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline; Bphen), 2,9-비스(나프탈렌-2-일)4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(2,9-Bis(naphthalene-2-yl)4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline; NBphen), 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline; BCP), 3-(4-바이페닐)-4-페닐-5-터르-부틸페닐-1,2,4-트리아졸(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole; TAZ), 4-(나프탈렌-1-일)-3,5-디페닐-4H-1,2,4-트리아졸(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole; NTAZ), 1,3,5-트리(p-피리드-3-일-페닐)벤젠(1,3,5-Tri(p-pyrid-3-yl-phenyl)benzene; TpPyPB), 2,4,6-트리스(3'-(피리딘-3-일)바이페닐-3-일)1,3,5-트리아진(2,4,6-Tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)1,3,5-triazine; TmPPPyTz), 폴리[(9,9-비스(3'-((N,N-디메틸)-N-에틸암모늄)-프로필)-2,7-플루오렌]-알트-2,7-(9,9-디옥틸플루오렌)](Poly[9,9-bis(3'-((N,N-dimethyl)-N-ethylammonium)-propyl)-2,7-fluorene]-alt-2,7-(9,9-dioctylfluorene)); PFNBr) 및/또는 트리스(페닐퀴녹살린)(tris(phenylquinoxaline; TPQ) 등으로 구성되는 군에서 선택될 수 있지만, 본 발명이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0088] 전자주입층(180)은 제 2 전극(120)과 전자수송층(170) 사이에 위치하는데, 제 2 전극(120)의 특성을 개선하여 소자의 수명을 개선할 수 있다. 하나의 예시적인 실시형태에서, 전자주입층(180)의 소재로는 LiF, CsF, NaF, BaF<sub>2</sub> 등의 알칼리 할라이드계 물질 및/또는 Liq(lithium quinolate), 리튬 벤조에이트(lithium benzoate), 소듐 스테아레이트(sodium stearate) 등의 유기금속계 물질이 사용될 수 있지만, 본 발명이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0089] 본 발명의 예시적인 실시형태에 따른 유기발광다이오드(100)는 유기발광층(130)을 구성하는 발광물질층(160)에 지연 형광 특성을 가지는 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물인 도펀트를 가지고 있다. 단일항 에너지 상태 및 삼중항 에너지 상태의 여기자가 모두 발광에 관여하기 때문에, 발광 효율이 향상된다.
- [0090] 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물은 전자주개 모이어티와 전자받개 모이어티가 공존하기 때문에, 쌍극자 모멘트가 증가하고, HOMO와 LUMO가 쉽게 분리되며, 쌍극자 모멘트가 증가할 수 있는 구조를 가지기 때문에, 지연 형광 특성을 가진다. 또한, 견고한 구조를 가지는 인테노인텐 고리와 이미다졸 고리 또는 티아졸 고리

사이의 입체 구조가 크게 제한되어 발광할 때 에너지 손실이 감소하므로, 발광 효율과 색순도가 개선된 청색 발광을 구현할 수 있다.

- [0091] 또한, 종래의 증금속을 포함하는 인광 재료를 사용하는 경우와 비교할 때, 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물과 함께 발광물질층(EML, 160)에 포함되는 유기 호스트는 높은 삼중항 에너지 준위를 가지지 않아도 되며, 밴드갭도 넓은 필요가 없다. 따라서, 에너지 밴드갭이 넓은 유기 호스트를 사용함으로써 인하여 야기되는 문제점, 즉, 전하의 주입 및 수송이 지연되고, 이에 따라 발광다이오드(100)의 구동 전압이 상승하고 소비 전력이 증가하며, 소자의 수명 특성이 저하되는 것을 방지할 수 있다.
- [0092] 한편, 본 발명에 따른 유기발광다이오드는 1개 이상의 엑시톤 차단층을 더욱 포함할 수 있다. 도 4는 본 발명의 예시적인 제 2 실시형태에 따라 인광 화합물이 적용된 유기발광다이오드를 개략적으로 도시한 단면도이다. 도 4에 도시한 바와 같이, 본 발명의 제 2 실시형태에 따른 유기발광다이오드(200)는 서로 마주하는 제 1 전극(210) 및 제 2 전극(220)과, 제 1 및 제 2 전극(210, 220) 사이에 위치하는 유기발광층(230)을 포함한다.
- [0093] 예시적인 실시형태에서, 유기발광층(230)은 제 1 전극(210)으로부터 순차적으로 적층되는 정공주입층(240), 정공수송층(250), 발광물질층(260), 전자수송층(270) 및 전자주입층(280)을 포함한다. 또한, 유기발광층(230)은 정공수송층(250)과 발광물질층(260) 사이에 위치하는 제 1 엑시톤 차단층인 전자차단층(electron blocking layer, EBL, 255) 및/또는 발광물질층(260)과 전자수송층(270) 사이에 위치하는 제 2 엑시톤 차단층인 정공차단층(hole blocking layer, HBL, 265)을 더욱 포함한다.
- [0094] 전술한 바와 같이, 제 1 전극(210)은 양극일 수 있으며, 일함수 값이 비교적 큰 도전성 물질인 ITO, IZO, ITZO, SnO, ZnO, ICO 및 AZO 등으로 이루어질 수 있다. 제 2 전극(220)은 음극일 수 있으며, 일함수 값이 비교적 적은 도전성 물질인 Al, Mg, Ca, Ag 또는 이들의 합금이나 조합으로 이루어질 수 있다.
- [0095] 정공주입층(240)은 제 1 전극(210)과 정공수송층(22) 사이에 위치한다. 정공주입층(240)은 MTDATA, NATA, 1T-NATA, 2T-NATA, CuPc, TCTA, NPB(NPD), HAT-CN, TDAPB, PEDOT/PSS 및/또는 N-(비페닐-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민 등으로 이루어지는 어느 하나의 화합물로 이루어질 수 있다.
- [0096] 정공수송층(250)은 제 1 전극(210)과 발광물질층(260) 사이에 발광물질층(260)에 인접하여 위치한다. 정공수송층(250)은 TPD, NPD(NPB), CBP, Poly-TPD, TFB, TAPC, N-(비페닐-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민 및/또는 N-(비페닐-4-일)-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)비페닐-4-아민 등의 방향족 아민 화합물을 포함하는 군에서 선택되는 화합물로 이루어질 수 있다.
- [0097] 발광물질층(260)은 호스트에 도펀트가 도핑되어 이루어질 수 있다. 일례로, 발광물질층(260)은 호스트에 도펀트가 약 1 내지 50 중량% 첨가될 수 있으며, 청색을 발광할 수 있다. 예를 들어, 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물이 발광물질층(260)의 도펀트로 사용되고, mCP-CN, CBP, mCBP, MCP, DPEPO, 2T-NATA, TCTA, TmPyPB, PYD-2Cz, DCzTPA, pCzB-2CN, mCzB-2CN, 4-(3-(트리페닐렌-2-일)페닐)디벤조[b,d]티오펜, 9-(4-(9H-카바졸-9-일)페닐)-9H-3,9'-바이카바졸 및/또는 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-9H-3,9'-바이카바졸 등의 화합물이 호스트로 사용될 수 있다.
- [0098] 전자수송층(270)은 발광물질층(260)과 전자주입층(280) 사이에 위치한다. 일례로, 전자수송층(270)은 옥사디아졸(oxadiazole), 트리아졸(triazole), 페난트롤린(phenanthroline), 벤족사졸(benzoxazole), 벤조티아졸(benzothiazole), 벤즈이미다졸, 트리아진 등의 유도체일 수 있다. 예를 들어, 전자수송층(270)은 Alq<sub>3</sub>, PBD, 스파이로-PBD, Liq, BA1q, Bphen, NBphen, BCP, TAZ, NTAZ, TpPyPB, TmPPyTz, PFNBr 및/또는 TPQ 등으로 이루어질 수 있지만, 본 발명이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0099] 전자주입층(280)은 제 2 전극(220)과 전자수송층(270) 사이에 위치한다. 전자주입층(280)의 소재로는 LiF, CsF, NaF, BaF<sub>2</sub> 등의 알칼리 할라이드계 물질 및/또는 Liq, 리튬 벤조에이트, 소듐 스테아레이트 등의 유기금속계 물질이 사용될 수 있지만, 본 발명이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0100] 한편, 정공이 발광물질층(260)을 제 2 전극(220)으로 이동하거나, 전자가 발광물질층(260)을 지나 제 1 전극(210)으로 가는 경우, 소자의 수명과 효율에 감소를 가져올 수 있다. 이를 방지하기 위하여, 본 발명의 예시적인 제 2 실시형태에 따른 유기발광다이오드(200)는 발광물질층(260)에 인접하여 적어도 1개의 엑시톤 차단층이 위치한다.
- [0101] 예를 들어, 본 발명의 제 2 실시형태에 따른 유기발광다이오드(200)는 정공수송층(250)과 발광물질층(260) 사이

에 전자의 이동을 제어, 방지할 수 있는 전자차단층(electron blocking layer, EBL, 255)이 위치한다.

- [0102] 일례로, 전자차단층(255)은 TCTA, 트리스[4-(디에틸아미노)페닐]아민(tris[4-(diethylamino)phenyl]amine), N-(바이페닐-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민, TAPC, MTDATA, mCP, mCBP, CuPC, N,N'-비스[4-[비스(3-메틸페닐)아미노]페닐]-N,N'-디페닐-[1,1'-바이페닐]-4,4'-디아민(N,N'-bis[4-[bis(3-methylphenyl)amino]phenyl]-N,N'-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine; DNTPD) 및/또는 TDAPB 등으로 이루어질 수 있다.
- [0103] 또한, 발광물질층(260)과 전자수송층(270) 사이에 제 2 엑시톤 차단층으로서 정공차단층(265)이 위치하여 발광물질층(260)과 전자수송층(270) 사이에 정공의 이동을 방지한다. 하나의 예시적인 실시형태에서, 정공차단층의 소재로서 전자수송층(270)에 사용될 수 있는 옥사디아졸(oxadiazole), 트리아졸(triazole), 페난트롤린(phenanthroline), 벤조사졸(benzoxazole), 벤조티아졸(benzothiazole), 벤즈이미다졸, 트리아진 등의 유도체가 사용될 수 있다.
- [0104] 예를 들어 정공차단층(265)은 발광물질층(260)에 사용된 소재와 비교해서 HOMO(highest occupied molecular orbital; 최고점유분자궤도) 에너지 준위가 낮은 BCP, BA1q, Alq3, PBD, 스파이로-PBD, Liq 및/또는 비스-4,6-(3,5-디-3-피리딜페닐)-2-메틸피리미딘(bis-4,6-(3,5-di-3-pyridylphenyl)-2-methylpyrimidine; B3PYMPM) 및 이들의 조합으로 구성되는 군에서 선택되는 화합물로 이루어질 수 있다.
- [0105] 본 발명의 제 2 실시형태에 따른 유기발광다이오드(200)는 발광물질층(160)에 지연 형광 특성을 가지는 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물인 도펀트를 가지고 있다. 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물은 1분자 내에 전자주개 모이어티와 전자받개 모이어티가 공존하여 쌍극자 모멘트가 증가하고, HOMO와 LUMO가 쉽게 분리되며, 쌍극자 모멘트가 증가할 수 있는 구조를 가지기 때문에, 지연 형광 특성을 가진다. 또한, 전자주개 모이어티를 구성하는 인데노인덴 고리와, 전자받개 모이어티를 구성하는 이미다졸 고리 또는 티아졸 고리의 입체 구조가 제한된다. 따라서, 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물을 발광 소자의 도펀트로 사용하면, 발광 효율이 향상되고, 양호한 색순도를 가지는 유기발광다이오드(200)를 제조할 수 있다.
- [0106] 높은 삼중항 에너지와 넓은 밴드갭을 가지는 유기 호스트를 사용할 필요가 없기 때문에, 발광다이오드(200)의 구동 전압을 낮춰서 소비 전력을 감소시킬 수 있고, 소자의 수명을 향상시킬 수 있다. 아울러, 본 발명의 제 2 실시형태에 따른 유기발광다이오드(200)는 적어도 하나의 엑시톤 차단층(255, 265)을 포함하고 있기 때문에, 발광물질층(260)과 인접한 전자수송층(250, 270)과의 계면에서 발광을 방지함으로써, 유기발광다이오드(200)의 발광 효율과 수명을 더욱 향상시킬 수 있다.
- [0107] 본 발명에 따른 유기발광다이오드는 유기발광다이오드 표시장치 또는 전술한 유기발광다이오드를 적용한 조명장치 등의 유기발광장치에 적용될 수 있다. 일례로, 본 발명의 유기발광다이오드를 적용한 표시장치에 대해서 설명한다. 도 5는 본 발명의 예시적인 실시형태에 따른 유기발광다이오드 표시장치의 개략적인 단면도이다.
- [0108] 도 5에 도시한 바와 같이, 유기발광다이오드 표시장치(300)는 구동 소자인 구동 박막트랜지스터(Td)와, 구동 박막트랜지스터(Td)를 덮는 평탄화층(360)과, 평탄화층(360) 상에 위치하며 구동 소자인 구동 박막트랜지스터(Td)에 연결되는 유기발광다이오드(400)를 포함한다. 구동 박막트랜지스터(Td)는, 반도체층(310)과, 게이트 전극(330)과, 소스 전극(352)과, 드레인 전극(354)을 포함하는데, 도 3에서는 코플라나(coplanar) 구조의 구동 박막트랜지스터(Td)를 나타낸다.
- [0109] 기판(302)은 유리 기판, 얇은 플렉서블(flexible) 기판 또는 고분자 플라스틱 기판일 수 있다. 예를 들어, 플렉서블 기판은 폴리이미드(polyimide; PI), 폴리테르술폰(Polyethersulfone; PES), 폴리에틸렌나프탈레이트(polyethylenenaphthalate; PEN), 폴리테르페탈레이트(polyethylene Terephthalate; PET) 및 폴리카보네이트(polycarbonate; PC) 중 어느 하나로 형성될 수 있다. 구동 소자인 구동 박막트랜지스터(Td)와, 유기발광다이오드(400)가 위치하는 기판(302)은 어레이 기판을 이룬다.
- [0110] 기판(302) 상부에 반도체층(310)이 형성된다. 예를 들어, 반도체층(310)은 산화물 반도체 물질로 이루어질 수 있다. 이 경우 반도체층(310) 하부에는 차광패턴(미도시)과 버퍼층(미도시)이 형성될 수 있으며, 차광패턴은 반도체층(310)으로 빛이 입사되는 것을 방지하여 반도체층(310)이 빛에 의해 열화되는 것을 방지한다. 이와 달리, 반도체층(310)은 다결정 실리콘으로 이루어질 수도 있으며, 이 경우 반도체층(310)의 양 가장자리에 불순물이 도핑되어 있을 수 있다.
- [0111] 반도체층(310) 상부에는 절연물질로 이루어진 게이트 절연막(320)이 기판(302) 전면에 형성된다. 게이트 절연막

(320)은 실리콘산화물(SiO<sub>2</sub>) 또는 실리콘질화물(SiNx)과 같은 무기절연물질로 이루어질 수 있다.

- [0112] 게이트 절연막(320) 상부에는 금속과 같은 도전성 물질로 이루어진 게이트 전극(330) 반도체층(310)의 중앙에 대응하여 형성된다. 또한, 게이트 절연막(320) 상부에는 게이트 배선(미도시)과 제 1 캐패시터 전극(미도시)이 형성될 수 있다. 게이트 배선은 제 1 방향을 따라 연장되고, 제 1 캐패시터 전극은 게이트 전극(330)에 연결될 수 있다. 한편, 게이트 절연막(320)이 기판(302) 전면에 형성되어 있으나, 게이트 절연막(320)은 게이트 전극(330)과 동일한 모양으로 패터닝 될 수도 있다.
- [0113] 게이트 전극(330) 상부에는 절연물질로 이루어진 층간 절연막(340)이 기판(302) 전면에 형성된다. 층간 절연막(340)은 실리콘산화물(SiO<sub>2</sub>) 또는 실리콘질화물(SiNx)과 같은 무기절연물질로 형성되거나, 벤조사이클로부텐(benzocyclobutene)이나 포토 아크릴(photo-acryl)과 같은 유기절연물질로 형성될 수 있다.
- [0114] 층간 절연막(340)은 반도체층(310)의 양측 상면을 노출하는 제 1 및 제 2 반도체층 콘택홀(342, 344)을 갖는다. 제 1 및 제 2 반도체층 콘택홀(342, 344)은 게이트 전극(330)의 양측에서 게이트 전극(330)과 이격되어 위치한다. 여기서, 제 1 및 제 2 반도체층 콘택홀(342, 344)은 게이트 절연막(320) 내에도 형성된다. 이와 달리, 게이트 절연막(320)이 게이트 전극(330)과 동일한 모양으로 패터닝 될 경우, 제 1 및 제 2 반도체층 콘택홀(342, 344)은 층간 절연막(340) 내에만 형성된다.
- [0115] 층간 절연막(340) 상부에는 금속과 같은 도전성 물질로 이루어진 소스 전극(352)과 드레인 전극(354)이 형성된다. 또한, 층간 절연막(340) 상부에는 제 2 방향을 따라 연장되는 데이터 배선(미도시)과 전원 배선(미도시) 및 제 2 캐패시터 전극(미도시)이 형성될 수 있다.
- [0116] 소스 전극(352)과 드레인 전극(354)은 게이트 전극(330)을 중심으로 이격되어 위치하며, 각각 제 1 및 제 2 반도체층 콘택홀(342, 344)을 통해 반도체층(310)의 양측과 접촉한다. 도시하지 않았지만, 데이터 배선은 제 2 방향을 따라 연장되고 게이트 배선과 교차하여 화소영역을 정의하며, 고전위 전압을 공급하는 전원 배선은 데이터 배선과 이격되어 위치한다. 제 2 캐패시터 전극은 드레인 전극(354)과 연결되고 제 1 캐패시터 전극과 중첩함으로써, 제 1 및 제 2 캐패시터 전극 사이의 층간 절연막(340)을 유전체층으로 하여 스토리지 캐패시터를 이룬다.
- [0117] 한편, 반도체층(310), 게이트 전극(330), 소스 전극(352) 및 드레인 전극(354)은 구동 박막트랜지스터(Td)를 이룬다. 도 5에 예시된 구동 박막트랜지스터(Td)는 반도체층(310)의 상부에 게이트 전극(330), 소스 전극(352) 및 드레인 전극(354)이 위치하는 코플라나(coplanar) 구조를 가진다. 이와 달리, 구동 박막트랜지스터(Td)는 반도체층의 하부에 게이트 전극이 위치하고, 반도체층의 상부에 소스 전극과 드레인 전극이 위치하는 역 스테aggerd(inverted staggered) 구조를 가질 수 있다. 이 경우, 반도체층은 비정질 실리콘으로 이루어질 수 있다.
- [0118] 또한, 구동 박막트랜지스터(Td)와 실질적으로 동일한 구조의 스위칭 소자인 스위칭 박막트랜지스터(미도시)가 기판(302) 상에 더 형성된다. 구동 박막트랜지스터(Td)의 게이트 전극(330)은 스위칭 박막트랜지스터(미도시)의 드레인 전극(미도시)에 연결되고 구동 박막트랜지스터(Td)의 소스 전극(352)은 전원 배선(미도시)에 연결된다. 또한, 스위칭 박막트랜지스터(미도시)의 게이트 전극(미도시)과 소스 전극(미도시)은 게이트 배선 및 데이터 배선과 각각 연결된다.
- [0119] 한편, 유기발광다이오드 표시장치(300)는 유기발광다이오드(400)에서 생성된 빛을 흡수하는 컬러 필터(미도시)를 포함할 수 있다. 예를 들어, 컬러 필터(미도시)는 적색(R), 녹색(G), 청색(B) 및 백색(W) 광을 흡수할 수 있다. 이 경우, 광을 흡수하는 적색, 녹색 및 청색의 컬러 필터 패턴이 각각의 화소영역 별로 분리되어 형성될 수 있으며, 이들 각각의 컬러 필터 패턴은 흡수하고자 하는 파장 대역의 빛을 방출하는 유기발광다이오드(400) 중의 유기발광층(430)과 각각 중첩되게 배치될 수 있다. 컬러 필터(미도시)를 채택함으로써, 유기발광다이오드 표시장치(300)는 풀-컬러를 구현할 수 있다.
- [0120] 예를 들어, 유기발광다이오드 표시장치(300)가 하부 발광 타입인 경우, 유기발광다이오드(400)에 대응하는 층간 절연막(340) 상부에 광을 흡수하는 컬러 필터(미도시)가 위치할 수 있다. 선택적인 실시형태에서, 유기발광다이오드 표시장치(300)가 상부 발광 타입인 경우, 컬러 필터는 유기발광다이오드(400)의 상부, 즉 제 2 전극(420) 상부에 위치할 수도 있다.
- [0121] 소스 전극(352)과 드레인 전극(354) 상부에는 평탄화층(360)이 기판(302) 전면에 형성된다. 평탄화층(360)은 상면이 평탄하며, 구동 박막트랜지스터(Td)의 드레인 전극(354)을 노출하는 드레인 콘택홀(362)을 갖는다. 여기서, 드레인 콘택홀(362)은 제 2 반도체층 콘택홀(344) 바로 위에 형성된 것으로 도시되어 있으나, 제 2 반

도체층 컨택홀(344)과 이격되어 형성될 수도 있다.

[0122] 발광다이오드(400)는 평탄화층(360) 상에 위치하며 구동 박막트랜지스터(Td)의 드레인 전극(354)에 연결되는 제 1 전극(410)과, 제 1 전극(410) 상에 순차 적층되는 유기발광층(430) 및 제 2 전극(420)을 포함한다.

[0123] 1 전극(410)은 각 화소영역 별로 분리되어 형성된다. 제 1 전극(410)은 양극(anode)일 수 있으며, 일함수 값이 비교적 큰 도전성 물질로 이루어질 수 있다. 예를 들어, 상기 제 1 전극(410)은 ITO, IZO, ITZO, SnO, ZnO, ICO 및 AZO 등과 같은 투명 도전성 물질로 이루어질 수 있다.

[0124] 한편, 본 발명의 유기발광다이오드 표시장치(300)가 상부 발광 방식(top-emission type)인 경우, 상기 제 1 전극(310) 하부에는 반사전극 또는 반사층이 더욱 형성될 수 있다. 예를 들어, 상기 반사전극 또는 상기 반사층은 알루미늄-팔라듐-구리(aluminum-palladium-copper: APC) 합금으로 이루어질 수 있다.

[0125] 또한, 상기 평탄화층(360) 상에는 상기 제 1 전극(410)의 가장자리를 덮는 बैं크층(370)이 형성된다. 상기 बैं크층(370)은 상기 화소영역에 대응하여 상기 제 1 전극(410)의 중앙을 노출한다.

[0126] 상기 제 1 전극(410) 상에는 유기발광층(430)이 형성된다. 하나의 예시적인 실시형태에서, 상기 유기발광층(430)은, 발광물질층의 단층 구조를 가질 수 있다. 이와 달리, 유기발광층(430)은 도 2 및/또는 도 4에 도시한 바와 같이, 정공주입층, 정공수송층, 전자차단층, 발광물질층, 정공차단층, 전자수송층 및/또는 전자주입층과 같은 다수의 유기물층으로 이루어질 수도 있다.

[0127] 유기발광층(430)이 형성된 상기 기판(302) 상부로 제 2 전극(420)이 형성된다. 상기 제 2 전극(420)은 표시영역의 전면에 위치하며 일함수 값이 비교적 작은 도전성 물질로 이루어져 음극(cathode)으로 이용될 수 있다. 예를 들어, 상기 제 2 전극(420)은 알루미늄(Al), 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 은(Ag) 또는 알루미늄-마그네슘 합금(AlMg)과 같은 이들의 합금이나 조합 중 어느 하나로 이루어질 수 있다.

[0128] 제 2 전극(420) 상에는, 외부 수분이 유기발광다이오드(400)로 침투하는 것을 방지하기 위해, 인캡슐레이션 필름(encapsulation film, 380)이 형성된다. 상기 인캡슐레이션 필름(380)은 제 1 무기 절연층(382)과, 유기 절연층(384)과 제 2 무기 절연층(386)의 적층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.

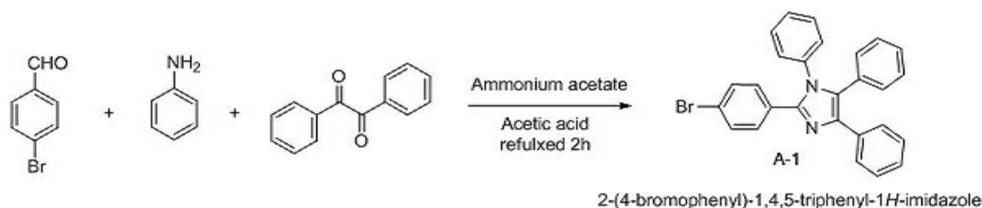
[0129] 전술한 바와 같이, 유기발광다이오드(400)는 유기발광층(430)에 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되며 지연 형광 특성을 가지는 유기 화합물이 도펀트로 사용되어 발광 효율이 향상된다.

[0130] 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물은 1분자 내에 전자주개 모이어티와 전자받개 모이어티가 공존하므로 지연 형광 특성을 갖는다. 또한, 전자주개 모이어티를 구성하는 인데노인덴 고리와, 전자받개 모이어티를 구성하는 이미다졸 고리 또는 티아졸 고리의 입체 구조가 제한된다. 따라서, 화학식 1 내지 화학식 5로 표시되는 유기 화합물을 발광 소자의 도펀트로 사용하면, 발광 효율이 향상되고, 양호한 색순도를 가지는 유기발광다이오드(400)를 제조할 수 있다. 높은 삼중항 에너지와 넓은 밴드갭을 가지는 유기 호스트를 사용할 필요가 없기 때문에, 발광다이오드(400) 및 이를 포함하는 유기발광다이오드 표시장치(300)의 구동 전압을 낮춰서 소비 전력을 감소시킬 수 있고, 소자의 수명을 향상시킬 수 있다.

[0131] 이하, 예시적인 실시형태를 통하여 본 발명을 설명하지만, 본 발명이 하기 실시예에 기재된 기술사상으로 한정되지 않는다.

[0132] 합성예 1: 화합물 1의 합성

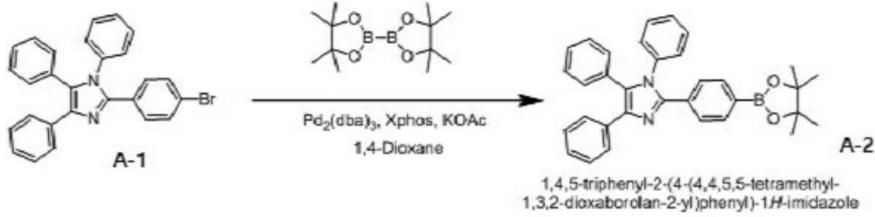
[0133] (1) 2-(4-bromophenyl)-1,4,5-triphenyl-1H-imidazole(A1) 합성



[0134]

[0135] 500 mL 2-neck flask에 4-Bromobenzaldehyde(5.00 g, 27.03 mmol), Aniline (12.58 g, 135.13 mmol), Benzil(1,2-diphenylethane-1,2-dione, 5.68 g, 27.03 mmol), Ammonium acetate(8.33 g, 108.10 mmol)을 넣고 acetic acid 250 mL로 녹인다. 그리고 나서 3시간 동안 환류 교반시킨다. 반응종료 후 석출된 고체를 filter하고, acetic acid: water(1:1) 용액으로 씻는다. 흰색 고체 A1 9.15 g(수율: 75%)를 얻었다.

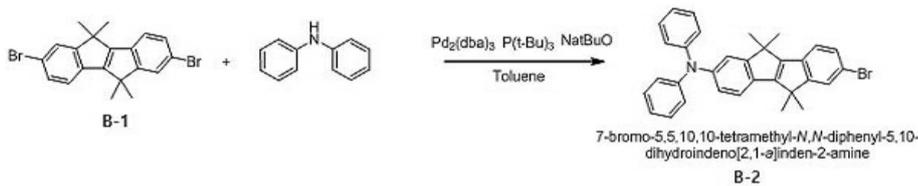
[0136] (2) 1,4,5-triphenyl-2-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-1H-imidazole(A-2) 합성



[0137]

[0138] 500 mL 2-neck flask에 A-1(5.00 g, 11.08 mmol), Bis(pinacolato)diboran(8.44 g, 33.23 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0), 0.30 g, 0.33 mmol), XPhos(2-Dicyclohexylphosphino-2',4',6'-triisopropylbiphenyl, 0.32 g, 0.66 mmol), KOAc(Potassium acetate, 3.81 g, 38.77 mmol)을 넣고 1,4-Dioxane 200 mL로 녹인다. 그리고 나서 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응종료 후 hexane: ethyl acetate(10:1)로 column하여 고체 A-2 4.80 g(수율: 88.07%)를 얻었다.

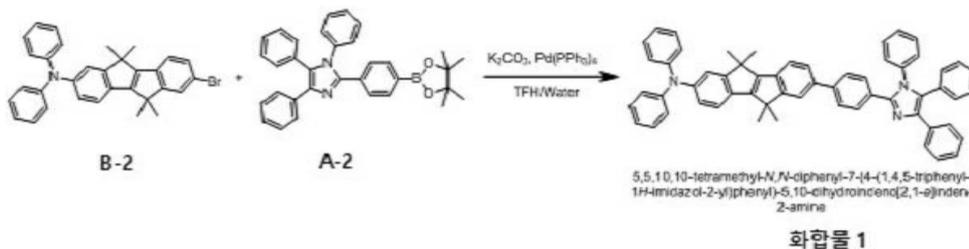
[0139] (3) 7-bromo-5,5,10,10-tetramethyl-N,N-diphenyl-5,10-dihydroindeno[2,1-a]inden-2-amine(B-2) 합성



[0140]

[0141] 250 mL 2-neck flask에 B-1(5.00 g, 11.96 mmol), diphenylamine (2.43 g, 14.35 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.33 g, 0.36 mmol), potassium tert-butoxide (0.07 g, 0.36 mmol), sodium tert-butoxide (2.30 g, 23.91 mmol)을 넣고 1,4-Dioxane 200 mL로 녹인다. 그리고 나서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응종료 후 hexane: ethyl acetate(10:1)로 column하여 고체 B-2 3.0 g(수율: 49.5%)를 얻었다.

[0142] (4) 1,4,5-triphenyl-2-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-1H-imidazole(화합물 1) 합성

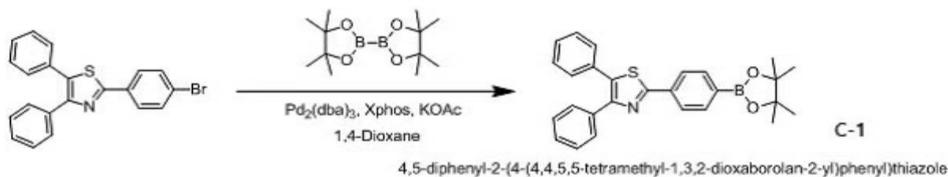


[0143]

[0144] 250 mL 2-neck flask에 B-2(1.00 g, 1.97 mmol), A-2(1.18 g, 2.37 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (1.36 g, 9.87 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(Tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0), 0.07 g, 0.06 mmol)를 넣고 THF: water(3:1)의 혼합 용매 80 mL로 녹인다. 그리고 나서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응종료 후 MC:hexane으로 column하여 화합물 1의 고체 1.0 g(수율: 63.47%)를 얻었다.

[0145] 합성예 2: 화합물 2의 합성

[0146] (1) 4,5-diphenyl-2-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)thiazole(C-1) 합성

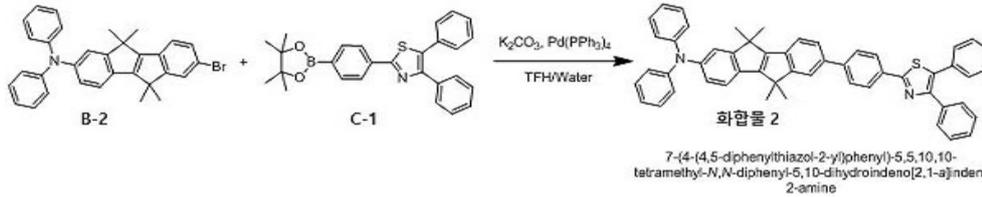


[0147]

[0148] 500 mL 2-neck flask에 2-(4-bromophenyl)-4,5-diphenylthiazole(3.30 g, 8.41 mmol),

Bis(pinacolato)diboran(6.41 g, 25.24 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>(0.23 g, 0.25 mmol), XPhos (0.24 g, 0.50 mmol), KOAc(2.89 g, 29.44 mmol)을 넣고 1,4-Dioxane 100 mL로 녹인다. 그리고 나서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응종료 후 hexane: ethyl acetate(10:1)로 column하여 고체 C-1 2.72 g(수율: 73.5%)를 얻었다.

[0149] (2) 7-(4-(4,5-diphenylthiazol-2-yl)phenyl)-5,5,10,10-tetramethyl-N,N-diphenyl-5,10-dihydroindeno[2,1-a]inden-2-amine (화합물 2) 합성



[0150] 250 mL 2-neck flask에 B-2(1.00 g, 1.97 mmol), C-1 (1.04 g, 2.37 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(1.36 g, 9.87 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.07 g, 0.06 mmol)를 넣고 THF: water(3:1) 혼합 용매 80 mL로 녹인다. 그리고 나서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응종료 후 MC: hexane으로 column하여 화합물의 고체 1.1 g(수율: 75.3%)를 얻었다.

[0152] 실시예 1: 발광다이오드 제작

[0153] 합성예 1에서 합성한 화합물 1을 발광물질층의 도펀트로 적용한 유기발광다이오드를 제작하였다. 먼저 40 mm x 40 mm x 두께 0.5 mm의 ITO(반사판 포함) 전극 부착 유리 기판을 이소프로필알코올, 아세톤, DI Water로 5분 동안 초음파 세정을 진행한 후 100°C Oven에 건조하였다. 기판 세정 후 진공상태에서 2분 동안 O<sub>2</sub> 플라즈마 처리하고 상부에 다른 층들을 증착하기 위하여 증착 챔버로 이송하였다. 약 10<sup>-7</sup> Torr 진공 하에 가열 보트로부터 증발에 의해 다음과 같은 순서로 유기물층을 증착하였다.

[0154] 정공주입층(HAT-CN, 7 nm), 정공수송층(NPB, 55 nm), 전자차단층(mCBP, 10 nm), 발광물질층(4-(3-(트리페닐렌-2-일)페닐)디벤조[b,d]티오펜을 호스트로 사용하고, 화합물 1이 5 중량% 도핑, 25 nm), 정공차단층(B3PYMPM, 10 nm), 전자수송층(TPBi, 20 nm), 전자주입층(LiF), 음극(Al).

[0155] CPL(capping layer)을 성막한 뒤에 유리로 인캡슐레이션 하였다. 이러한 층들의 증착 후 피막 형성을 위해 증착 챔버에서 건조 박스 내로 옮기고 후속적으로 UV 경화 에폭시 및 수분 게터(getter)를 사용하여 인캡슐레이션 하였다.

[0156] 실시예 2: 발광다이오드 제작

[0157] 발광물질층의 도펀트로서 화합물 1을 대신하여 합성예 2에서 합성한 화합물 2를 사용한 것을 제외하고 실시예 1의 절차를 반복하여 발광다이오드를 제작하였다.

[0158] 비교예: 발광다이오드 제작

[0159] 발광물질층의 도펀트로서 화합물 1을 대신하여 TBP(2,5,8,11-Tetral-tert-butylphenylene)를 사용한 것을 제외하고 실시예 1의 절차를 반복하여 발광다이오드를 제작하였다.

[0160] 실험예: 유기발광다이오드의 발광 특성 측정

[0161] 실시예 1 내지 실시예 2와 비교예에서 각각 제작된 유기발광다이오드를 대상으로 물성을 측정하였다. 9 mm<sup>2</sup>의 방출 영역을 갖는 각각의 유기발광다이오드를 외부전력 공급원에 연결하였으며, 전류 공급원(KEITHLEY) 및 광도계(PR 650)를 사용하여 실온에서 소자 특성을 평가하였다. 10 mA/cm<sup>2</sup>의 전류밀도에서 측정된 각각의 발광다이오드의 구동 전압(V), 전류효율(cd/A), 전력효율(lm/W), 외부양자효율(External Quantum Efficiency, EQE, %), CIE 색좌표 측정 결과를 하기 표 1에 나타낸다.

**표 1**

발광다이오드의 발광 특성 평가

샘플	V	cd/A	lm/W	EQE (%)	CIE <sub>x</sub>	CIE <sub>y</sub>
비교예	5.91	12.49	6.64	6.92	0.172	0.294
실시예 1	4.70	9.02	6.03	5.87	0.159	0.2306

[0162]

실시예 2	4.48	10.77	7.55	6.54	0.167	0.255
-------	------	-------	------	------	-------	-------

[0163] 표 1에 나타낸 바와 같이, 비교예의 유기 화합물을 발광물질층의 도펀트로 사용한 경우와 비교해서, 본 발명에 따라 합성된 유기 화합물을 발광물질층의 도펀트로 사용한 경우, 구동 전압은 최대 24.2% 감소하였으며, 전력효율은 최대 13.7% 향상되었다. 또한, 전류효율과 외부양자효율은 비교예에 버금가는 정도의 효율을 보여주었다. 색좌표 측정에서도 본 발명에 따라 합성된 유기 화합물을 사용하면 고색 순도의 청색 발광을 구현할 수 있다. 결국, 본 발명의 유기 화합물을 발광층에 적용하여 구동 전압을 크게 낮출 수 있으며, 발광 효율이 양호한 유기 발광다이오드를 제작할 수 있다. 따라서 본 발명의 유기 화합물이 적용된 유기발광다이오드를 이용하여, 유기발광다이오드 표시장치 및/또는 조명 장치 등에 활용될 수 있다.

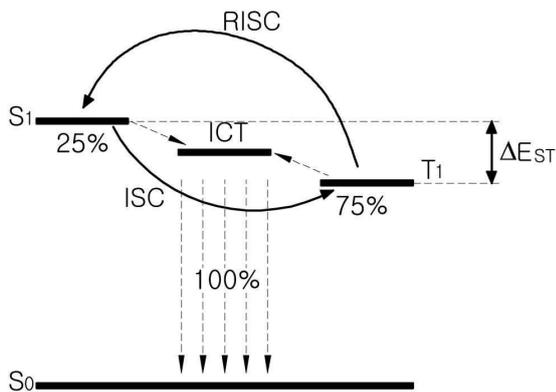
[0164] 상기에서는 본 발명의 예시적인 실시형태 및 실시예에 기초하여 본 발명을 설명하였으나, 본 발명이 상기 실시 형태 및 실시예에 기재된 기술사상으로 한정되는 것은 아니다. 오히려 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 전술한 실시형태 및 실시예를 토대로 다양한 변형과 변경을 용이하게 추고할 수 있다. 하지만, 이러한 변형과 변경은 모두 본 발명의 권리범위에 속한다는 점은, 첨부하는 청구범위에서 분명하다.

**부호의 설명**

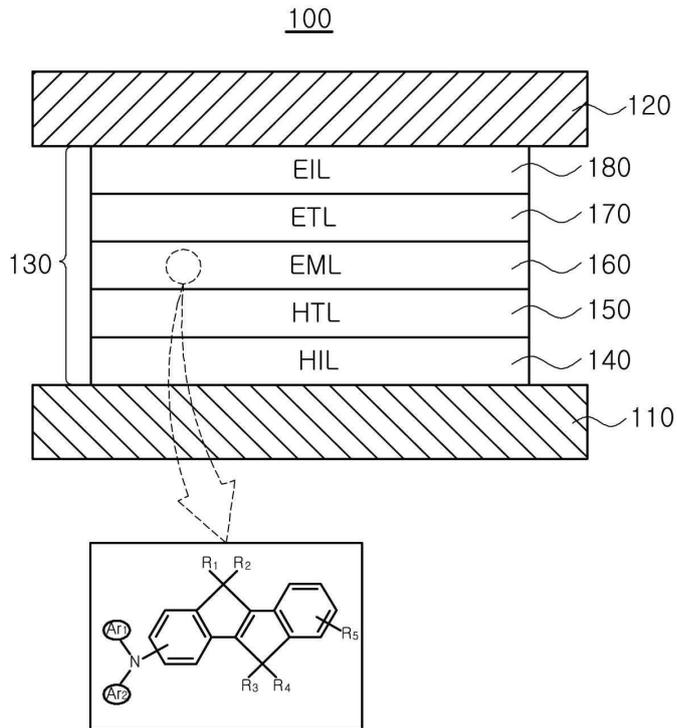
- [0165] 100, 200, 400: 유기발광다이오드  
 110, 210, 410: 제 1 전극                      120, 220, 420: 제 2 전극  
 130, 230, 430: 유기발광층                  140, 240: 정공주입층  
 150, 250: 정공수송층                      160, 260: 발광물질층  
 170, 270: 전자수송층                      180, 280: 전자주입층  
 255, 265: 엑시톤 차단층                  300: 유기발광다이오드 표시장치

**도면**

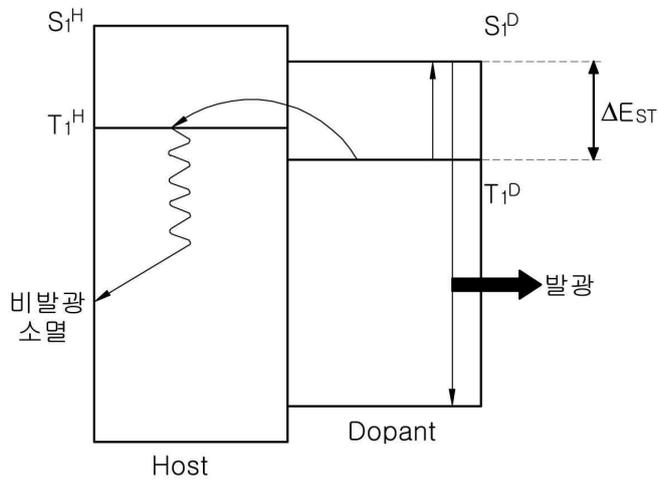
**도면1**



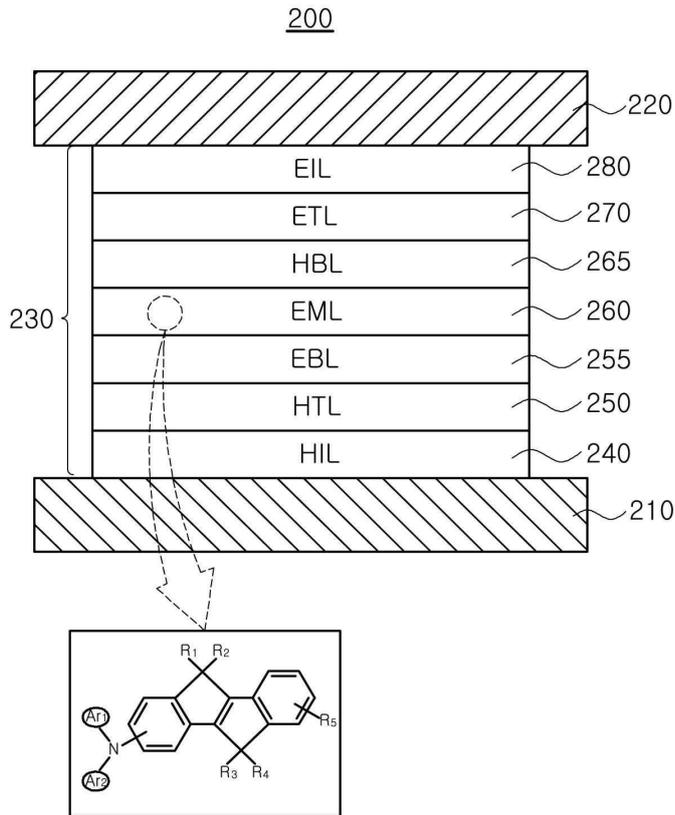
도면2



도면3



도면4



도면5

