



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0054963  
(43) 공개일자 2018년05월25일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07F 7/08 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)  
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류  
C07F 7/0816 (2013.01)  
H01L 51/0072 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0151396

(22) 출원일자 2016년11월14일

심사청구일자 없음

(71) 출원인  
삼성디스플레이 주식회사  
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자  
후치와키, 준타  
일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초  
2-7 주식회사 삼성 요코하마 연구소내

(74) 대리인  
특허법인 고려

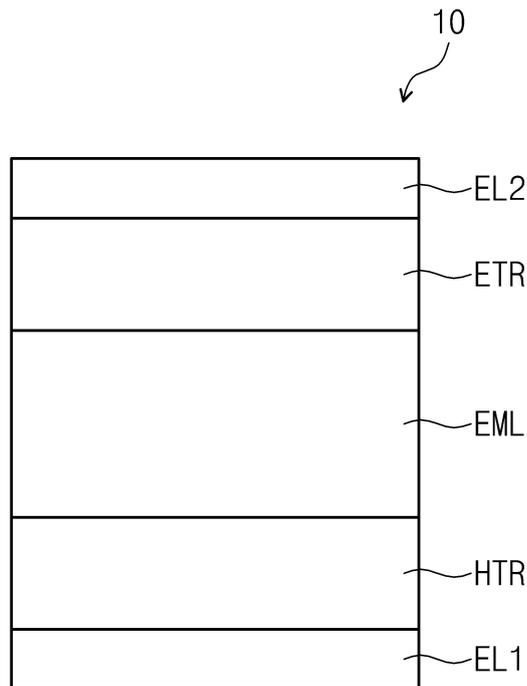
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 **헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자**

**(57) 요약**

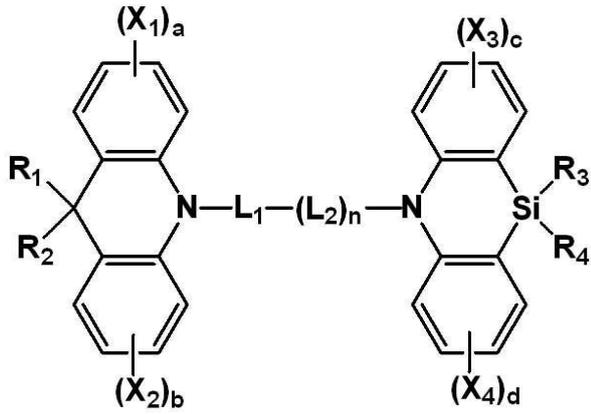
본 발명은 헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명의 일 실시예에 따른 (뒷면에 계속)

**대표도** - 도1



헤테로환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[화학식 1]



(52) CPC특허분류

*H01L 51/0094* (2013.01)

*H01L 51/5056* (2013.01)

*H01L 51/5064* (2013.01)

*H01L 51/5096* (2013.01)

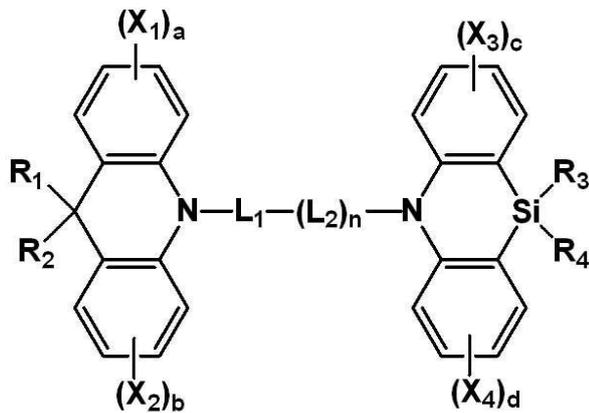
**명세서**

**청구범위**

**청구항 1**

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

$L_1$  및  $L_2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기이고,

$n$ 은 0 또는 1이며,

$R_1$  내지  $R_4$  및  $X_1$  내지  $X_4$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

$a$  내지  $d$ 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

**청구항 2**

제1항에 있어서,

$R_1$  내지  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기인 것인 헤테로환 화합물.

**청구항 3**

제1항에 있어서,

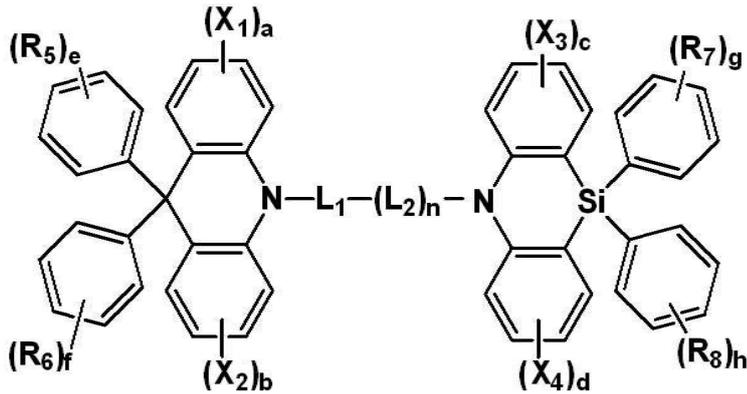
$R_1$  내지  $R_4$  중 적어도 2개는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기인 것인 헤테로환 화합물.

**청구항 4**

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 것인 헤테로환 화합물:

[화학식 1-1]



상기 화학식 1-1에서,

R<sub>5</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

e 내지 h는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며,

L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>, a 내지 d, 및 n은 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 5**

제1항에 있어서,

L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 2가의 터페닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 또는 헤테로 원자로 N을 1 이상 포함하는 헤테로아릴렌기인 것인 헤테로환 화합물.

**청구항 6**

제5항에 있어서,

n이 0인 것인 헤테로환 화합물.

**청구항 7**

제1항에 있어서,

n이 1이고, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이며, L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기인 것인 헤테로환 화합물.

**청구항 8**

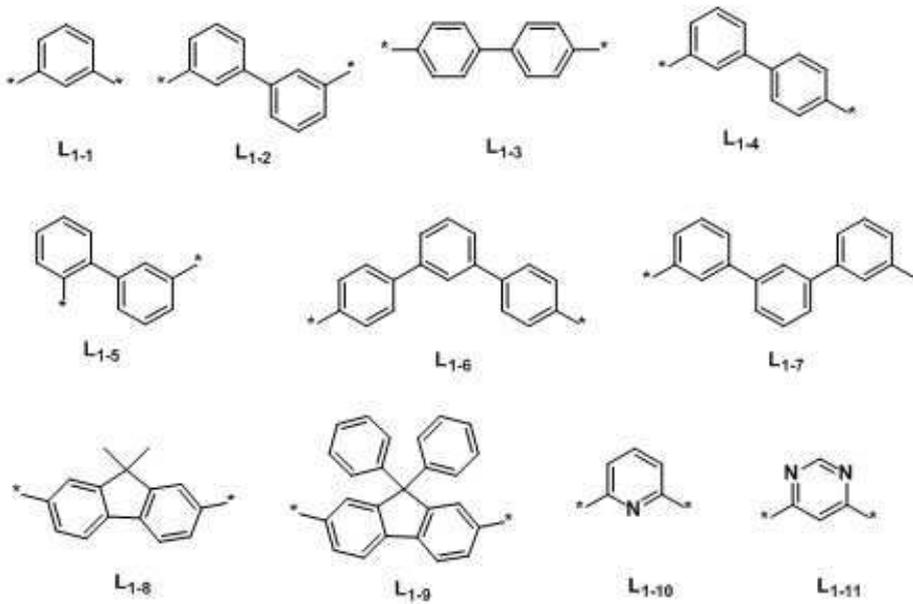
제7항에 있어서,

L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기인 것인 헤테로환 화합물.

**청구항 9**

제1항에 있어서,

L<sub>1</sub>은 하기 L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub> 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로환 화합물:



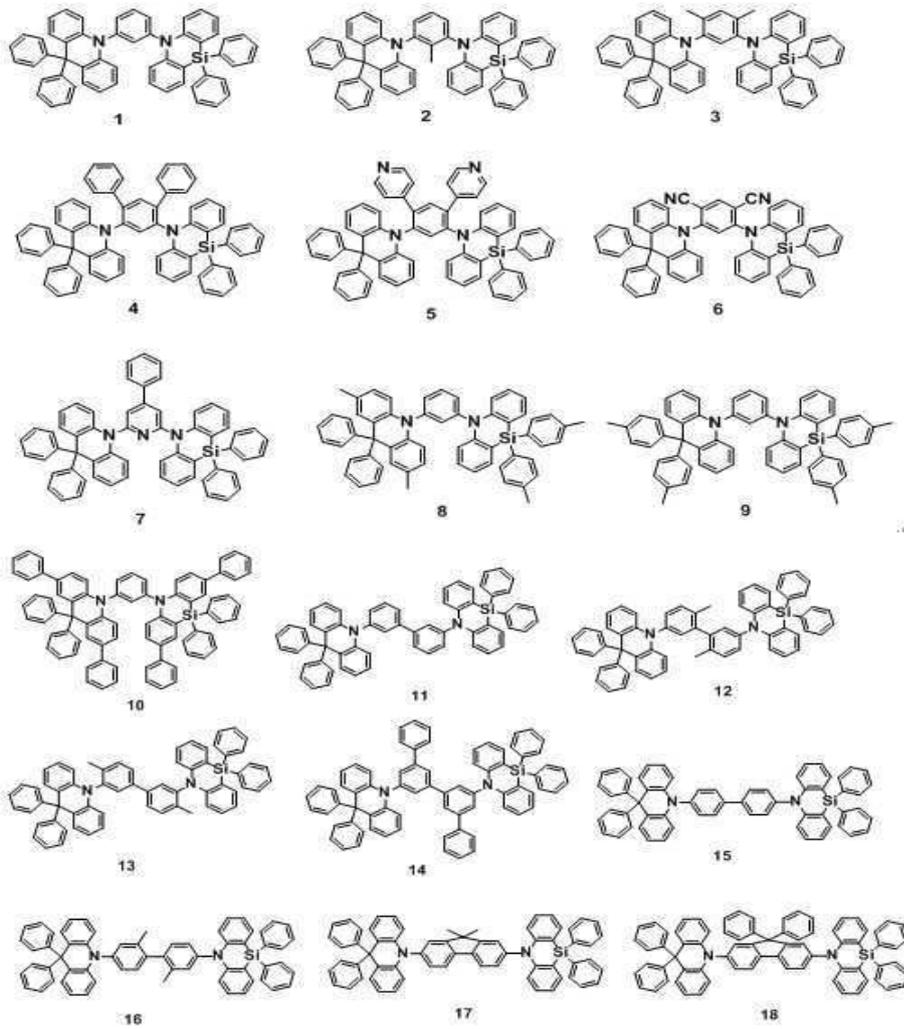
상기 L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub>는 각각 독립적으로 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된다.

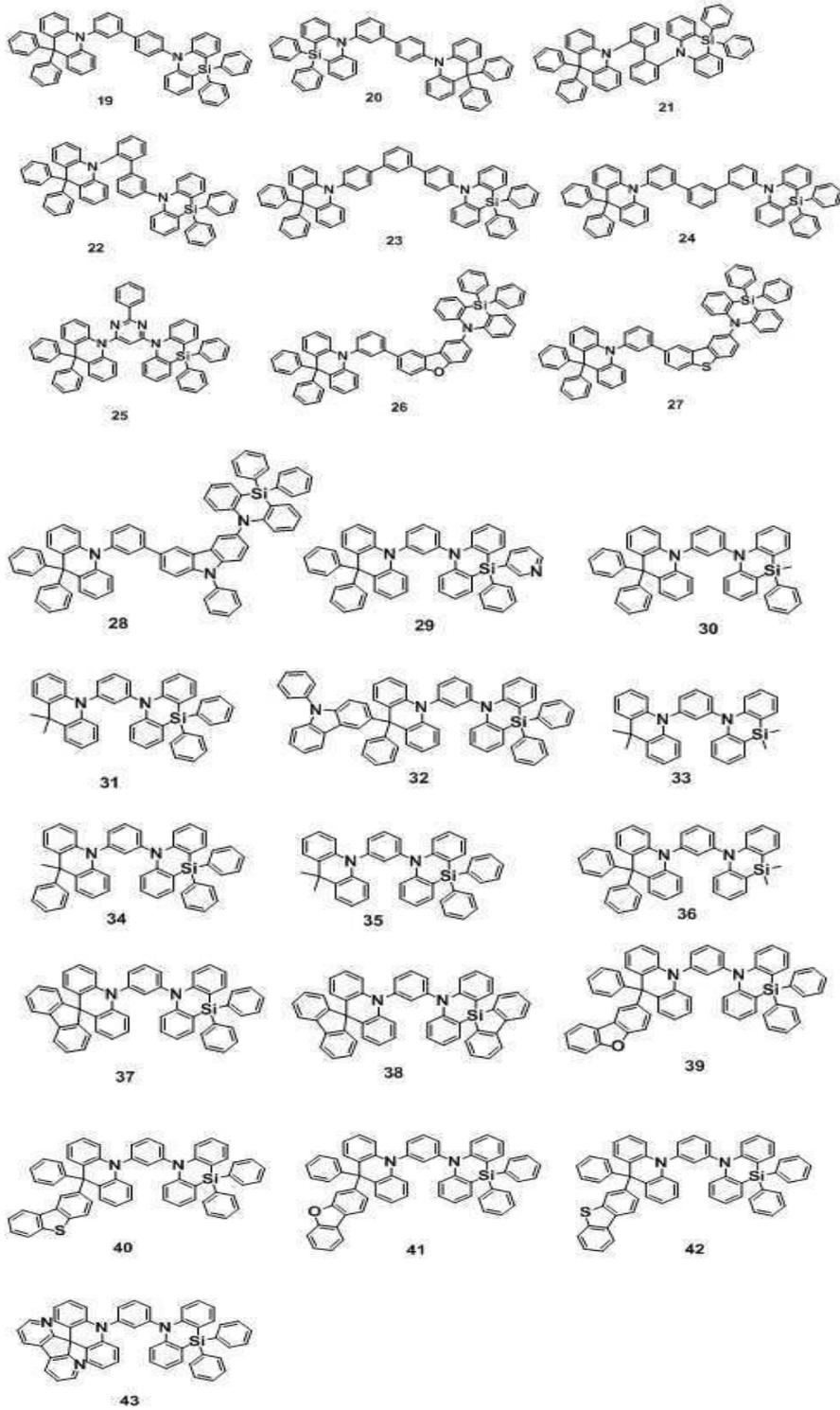
### 청구항 10

제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것인 헤테로환 화합물:

[화합물군 1]





**청구항 11**

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

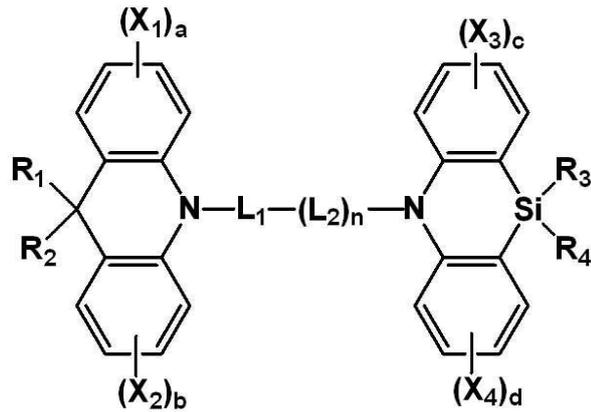
상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

상기 정공 수송 영역은 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

$L_1$  및  $L_2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아틸렌기이고,

$n$ 은 0 또는 1이며,

$R_1$  내지  $R_4$  및  $X_1$  내지  $X_4$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아틸기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고,

$a$  내지  $d$ 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

**청구항 12**

제11항에 있어서,

상기 정공 수송 영역은 다층 구조를 포함하고,

상기 다층 구조 중 상기 발광층과 접하는 층이 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 13**

제11항에 있어서,

상기 정공 수송 영역은

상기 제1 전극 상에 배치된 정공 주입층;

상기 정공 주입층 상에 배치된 정공 수송층; 및

상기 정공 수송층 상에 배치된 전자 저지층을 포함하고,

상기 전자 저지층이 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 14**

제11항에 있어서,

$R_1$  내지  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아틸기인 것인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 15**

제11항에 있어서,

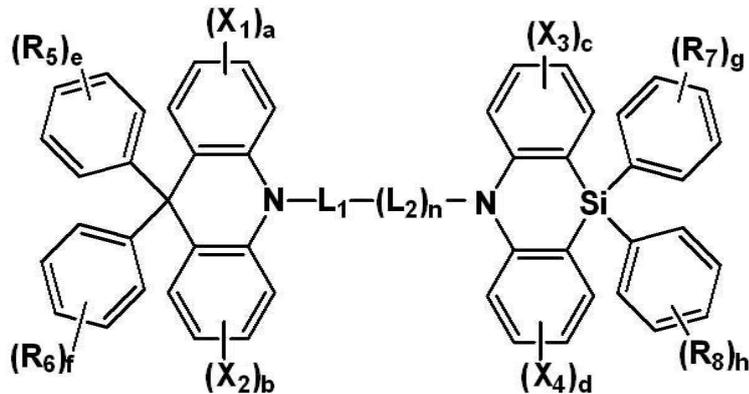
R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub> 중 적어도 2개는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기인 것인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 16**

제11항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-1]



상기 화학식 1-1에서,

R<sub>5</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

e 내지 h는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며,

L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>, a 내지 d, 및 n은 청구항 11에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 17**

제11항에 있어서,

L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 2가의 터페닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 또는 헤테로 원자로 N을 1 이상 포함하는 헤테로아릴렌기인 것인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 18**

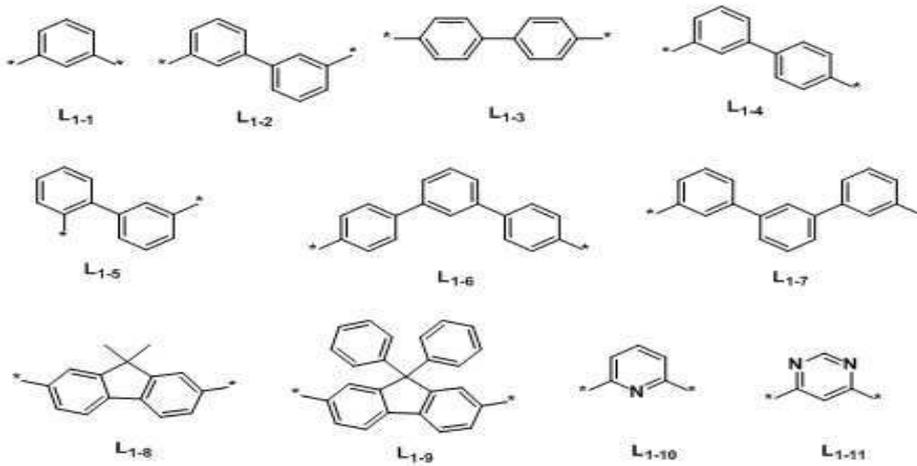
제11항에 있어서,

n이 1이고, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이며, L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기인 것인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 19**

제11항에 있어서,

L<sub>1</sub>은 하기 L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub> 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:



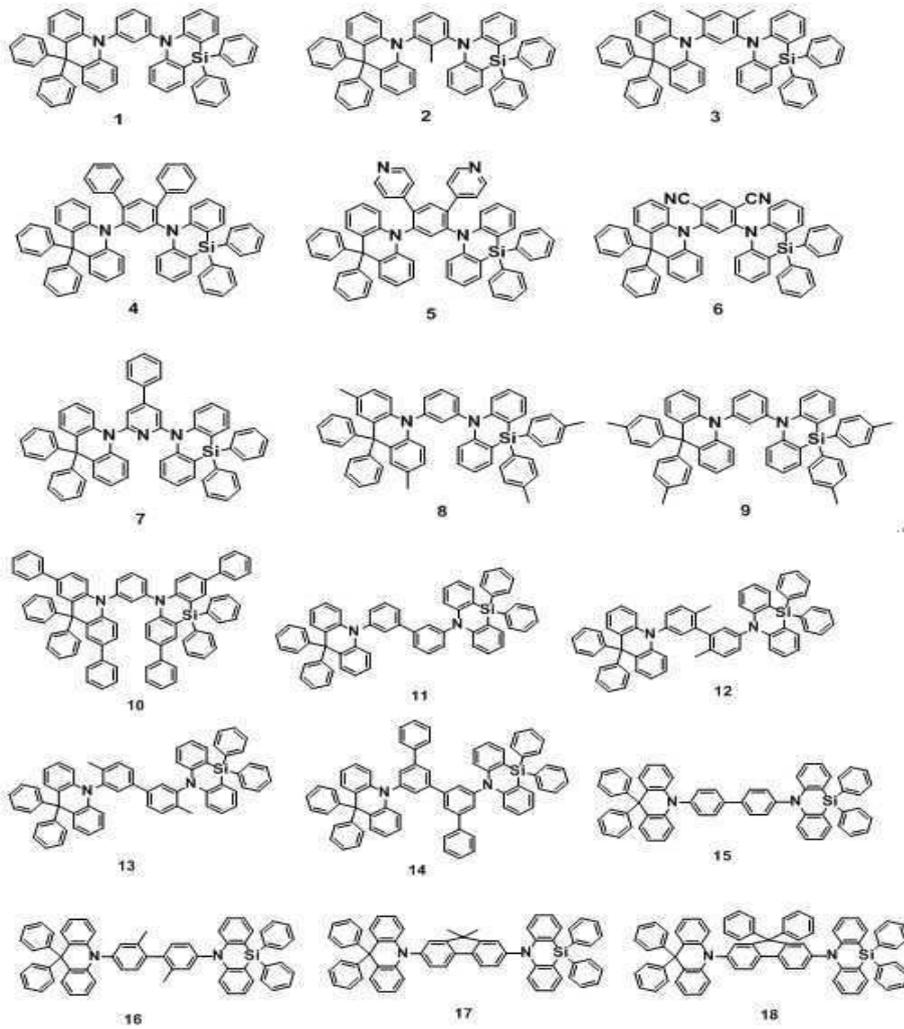
상기 L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub>는 각각 독립적으로 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된다.

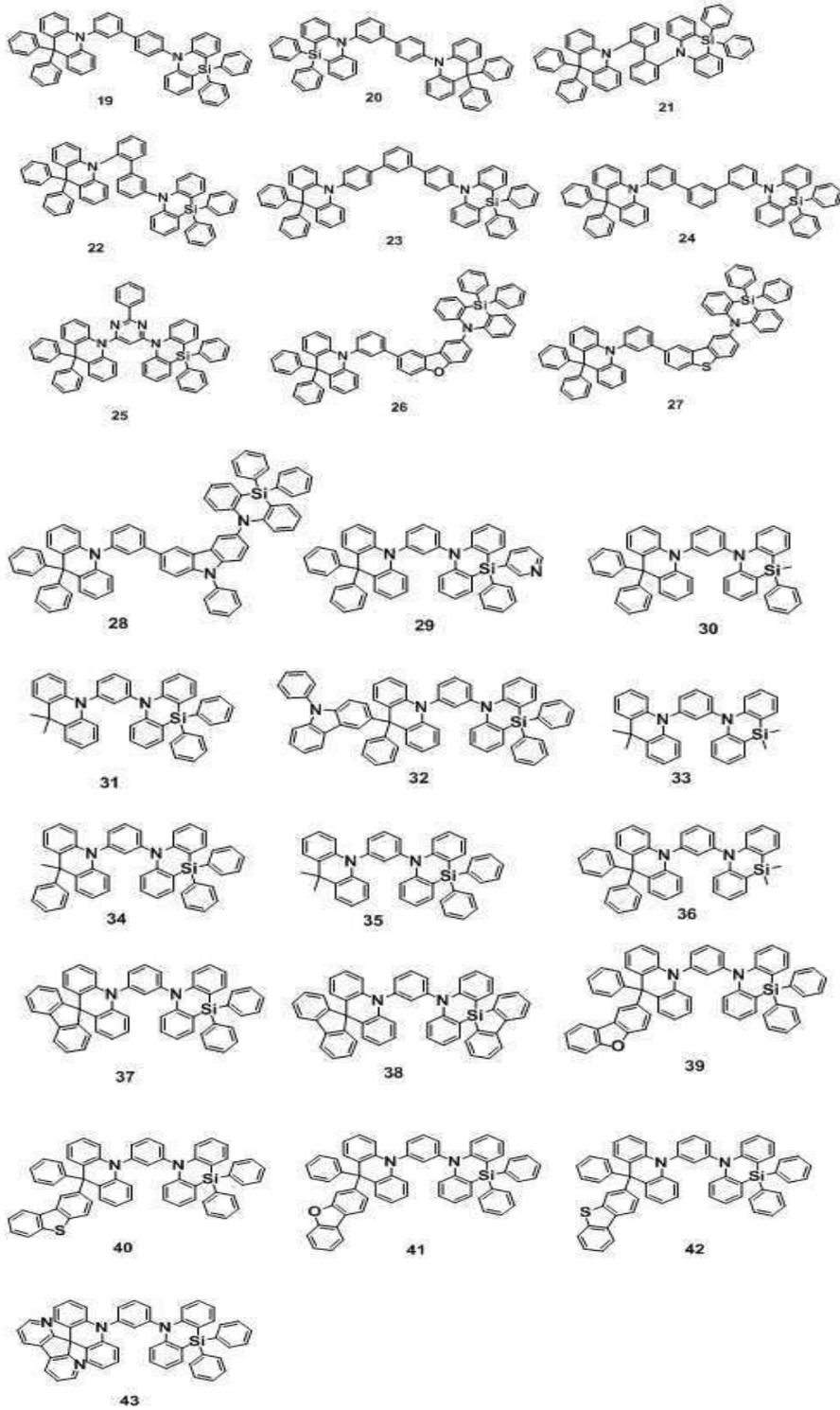
#### 청구항 20

제11항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것인 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]





**발명의 설명**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

**배경기술**

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

시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

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

**발명의 내용**

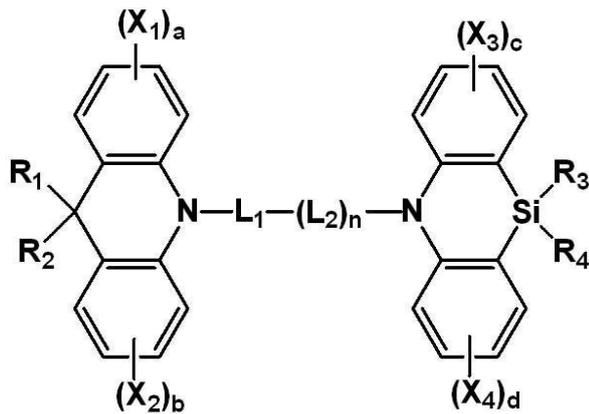
**해결하려는 과제**

[0004] 본 발명은 헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 일 목적으로 한다. 최저 삼중항 여기 에너지가 높은 헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 고효율의 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

**과제의 해결 수단**

[0005] 본 발명의 일 실시예는 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 제공한다.

[0006] [화학식 1]



[0007]

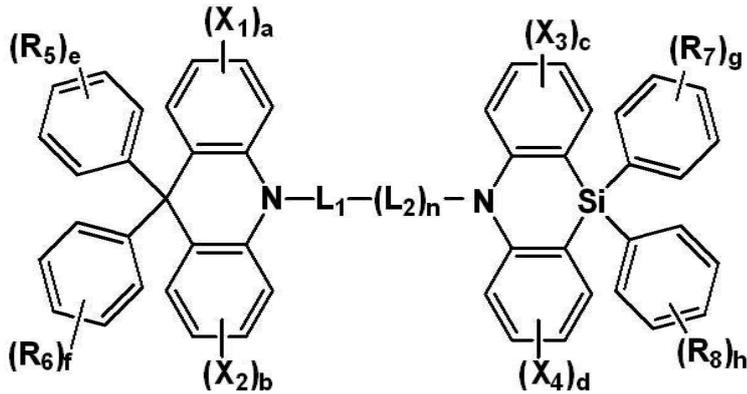
[0008] 화학식 1에서, L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기이고, n은 0 또는 1이며, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub> 및 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고, a 내지 d는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

[0009] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기인 것일 수 있다.

[0010] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub> 중 적어도 2개는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기인 것일 수 있다.

[0011] 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0012] [화학식 1-1]



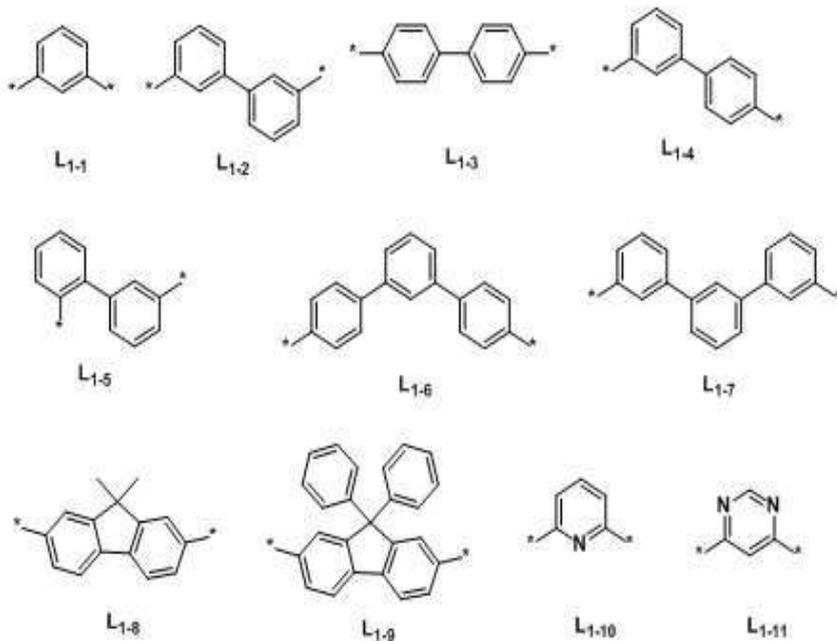
[0013]

[0014] 화학식 1-1에서, R<sub>5</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, e 내지 h는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>, a 내지 d, 및 n은 전술한 바와 동일하다.

[0015] L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 2개의 비페닐기, 치환 또는 비치환된 2개의 터페닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 또는 헤테로 원자로 N을 1 이상 포함하는 헤테로아릴렌기인 것일 수 있다. 이 경우, n은 0일 수 있다.

[0016] n이 1이고, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이며, L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기인 것일 수 있다. 이 경우, L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기인 것일 수 있다.

[0017] L<sub>1</sub>은 하기 L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub> 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



[0018]

[0019] L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub>는 각각 독립적으로 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환될 수 있다.

[0020] 본 발명의 일 실시예는 제1 전극, 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층, 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역 및 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고, 정공 수송 영역이 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0021] 정공 수송 영역은 다층 구조를 포함하고, 다층 구조 중 발광층과 접하는 층이 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0022] 정공 수송 영역은 제1 전극 상에 배치된 정공 주입층, 정공 주입층 상에 배치된 정공 수송층 및 정공 수송층 상에 배치된 전자 저지층을 포함하고, 전자 저지층이 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

**발명의 효과**

[0023] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 효율이 우수하다.

**도면의 간단한 설명**

[0024] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0025] 이상의 본 발명의 목적들, 다른 목적들, 특징들 및 이점들은 첨부된 도면 및 이하의 바람직한 실시예들을 통해서 쉽게 이해될 것이다. 그러나 본 발명은 여기서 설명되는 실시예들에 한정되지 않고 다른 형태로 구체화될 수도 있다. 오히려, 여기서 소개되는 실시예들은 개시된 내용이 철저하고 완전해질 수 있도록 그리고 통상의 기술자에게 본 발명의 사상이 충분히 전달될 수 있도록 하기 위해 제공되는 것이다.

[0026] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.

[0027] 본 명세서에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "하부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.

[0028] 본 명세서에서,  \* 는 연결되는 부위를 의미한다.

[0029] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 바이페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.

[0030] 본 명세서에서, "인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성"한다는 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리를 형성하는 것을 의미할 수 있다. 탄화수소 고리는 지방족 탄화수소 고리 및 방향족 탄화수소 고리를 포함한다. 헤테로 고리는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리를 포함한다. 탄화수소 고리 및 헤테로 고리는 단환 또는 다환일 수 있다. 또한, 인접하는 기와 서

로 결합하여 형성된 고리는 다른 고리와 연결되어 스피로 구조를 형성하는 것일 수도 있다.

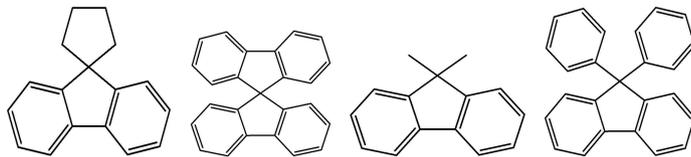
[0031] 본 명세서에서, "인접하는 기"는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기 또는 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 인접한 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 1,2-디메틸벤젠(1,2-dimethylbenzene)에서 2개의 메틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있고, 1,1-디에틸시클로펜테인(1,1-diethylcyclopentene)에서 2개의 에틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있다.

[0032] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.

[0033] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 6 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2- 에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0034] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 또는 6 이상 15 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 바이페닐기, 터페닐기, 퀴터페닐기, 퀴크페닐기, 섹시페닐기, 바이페닐렌기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0035] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수도 있다. 플루오레닐기가 치환되는 경우의 예시는 하기와 같다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.



[0036]

[0037] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 헤테로 원자로 O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다. 헤테로 아릴기가 헤테로 원자를 2개 포함할 경우, 2개의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하이다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로아릴기 또는 다환식 헤테로아릴기일 수 있다. 다환식 헤테로아릴기는 예를 들어, 2환 또는 3환 구조를 갖는 것일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 페녹사질기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난트롤린기, 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기, 디벤조실릴기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0038] 본 명세서에서, 아릴렌기는 2가인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0039] 본 명세서에서, 헤테로아릴렌기는 2가인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0040] 본 명세서에서, 실릴기는 알킬 실릴기 및 아릴 실릴기를 포함한다. 실릴기의 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0041] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸 붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

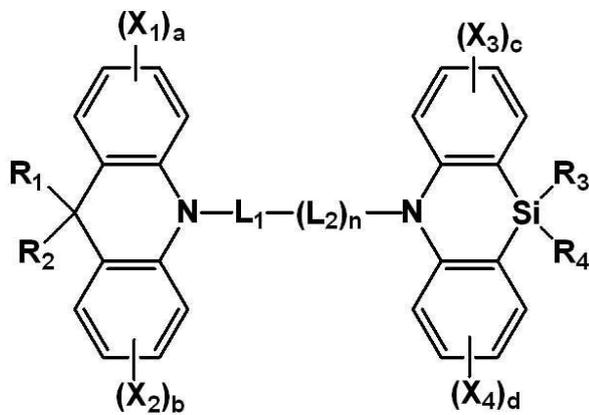
[0042] 본 명세서에서, 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하 또는 2 이상 10 이하이다. 알케닐기의 예로는 비닐기, 1-부테닐기, 1-펜테닐기, 1,3-부타디에닐 아릴기, 스티레닐기, 스티릴비닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0043] 본 명세서에서, 아미노기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아미노기는 알킬 아미노기 및 아릴 아미노기를 포함할 수 있다. 아미노기의 예로는 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 페닐아미노기, 디페닐아미노기, 나프틸아미노기, 9-메틸-안트라세닐아미노기, 트리페닐아미노기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0044] 이하에서는 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물에 대해 설명한다.

[0045] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0046] [화학식 1]



[0047] 화학식 1에서, L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기이고, n은 0 또는 1이며, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub> 및 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고, a 내지 d는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

[0049] a가 2 이상일 경우, 복수의 X<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이하다. a가 2 이상일 경우, 인접하는 X<sub>1</sub>은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 인접하는 X<sub>1</sub>은 서로 결합하여 단환식 고리를 형성할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 인접하는 X<sub>1</sub>이 서로 결합하여 벤젠 고리를 형성하는 경우는 제외될 수 있다.

[0050] b가 2 이상일 경우, 복수의 X<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하다. b가 2 이상일 경우, 인접하는 X<sub>2</sub>는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 인접하는 X<sub>2</sub>는 서로 결합하여 단환식 고리를 형성할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 인접하는 X<sub>2</sub>가 서로 결합하여 벤젠 고리를 형성하는 경우는 제외될 수 있다.

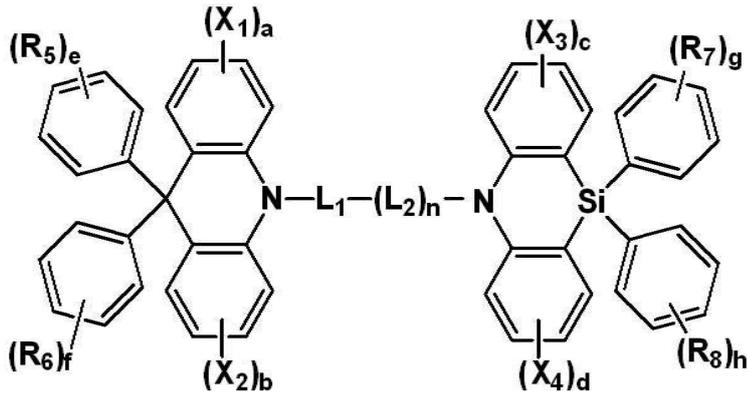
[0051] c가 2 이상일 경우, 복수의 X<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이하다. c가 2 이상일 경우, 인접하는 X<sub>3</sub>은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 인접하는 X<sub>3</sub>은 서로 결합하여 단환식 고리를 형성할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 인접하는 X<sub>3</sub>이 서로 결합하여 벤젠 고리를 형성하는 경우는 제외될 수 있다.

[0052] d가 2 이상일 경우, 복수의 X<sub>4</sub>는 서로 동일하거나 상이하다. d가 2 이상일 경우, 인접하는 X<sub>4</sub>는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 인접하는 X<sub>4</sub>는 서로 결합하여 단환식 고리를 형성할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아

니며, 인접하는  $X_4$ 가 서로 결합하여 벤젠 고리를 형성하는 경우는 제외될 수 있다.

- [0053] 화학식 1에서, a 내지 d는 각각 0일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며,  $a+b+c+d \geq 1$ 일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1에서, a 내지 d는 각각 1일 수 있고,  $X_1$  내지  $X_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0054] 화학식 1에서, a 내지 d는 각각 1이고,  $X_1$  내지  $X_4$ 는 각각 독립적으로 메틸기, 에틸기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 화학식 1에서, a 내지 d는 각각 1이고,  $X_1$  내지  $X_4$ 는 각각 독립적으로 메틸기, 에틸기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 화학식 1에서, a 내지 d는 각각 1이고,  $X_1$  내지  $X_4$ 는 각각 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.
- [0055] 화학식 1에서,  $R_1$  내지  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기인 것일 수 있다. 화학식 1에서,  $R_1$  내지  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 15 이하의 헤테로아릴기인 것일 수 있다.
- [0056] 화학식 1에서,  $R_1$  내지  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 단환식 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 단환식 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0057] 화학식 1에서,  $R_1$  및  $R_2$ 는 서로 동일할 수도 있고 상이할 수도 있다. 화학식 1에서,  $R_1$  및  $R_2$ 는 서로 결합하여 고리를 형성할 수도 있다. 예를 들어, 화학식 1에서,  $R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다. 화학식 1에서,  $R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. 화학식 1에서,  $R_1$ 은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,  $R_2$ 는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. 화학식 1에서,  $R_1$ 은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,  $R_2$ 는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0058] 화학식 1에서,  $R_3$  및  $R_4$ 는 서로 동일할 수도 있고 상이할 수도 있다. 화학식 1에서,  $R_3$  및  $R_4$ 는 서로 결합하여 고리를 형성할 수도 있다. 예를 들어, 화학식 1에서,  $R_3$  및  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다.  $R_3$  및  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. 화학식 1에서,  $R_3$ 은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,  $R_4$ 는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. 화학식 1에서,  $R_3$ 은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,  $R_4$ 는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0059] 화학식 1에서,  $R_1$  내지  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0060] [화학식 1-1]



[0061]

[0062] 화학식 1-1에서, R<sub>5</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, e 내지 h는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>, a 내지 d, 및 n은 전술한 바와 동일하다.

[0063] e가 2 이상인 경우, 복수의 R<sub>5</sub>는 서로 동일하거나 상이하다. f가 2 이상인 경우, 복수의 R<sub>6</sub>은 서로 동일하거나 상이하다. g가 2 이상인 경우, 복수의 R<sub>7</sub>은 서로 동일하거나 상이하다. h가 2 이상인 경우, 복수의 R<sub>8</sub>은 서로 동일하거나 상이하다.

[0064] 화학식 1-1에서, e 내지 h가 각각 0인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, e+f+g+h ≥ 1인 것일 수도 있다.

[0065] 화학식 1-1에서, e 내지 h가 각각 1이고, R<sub>5</sub> 내지 R<sub>8</sub>이 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. 예를 들어, R<sub>5</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 메틸기 또는 에틸기일 수 있다.

[0066] 화학식 1에서, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 화학식 1에서, R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub>는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0067] 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 2가의 터페닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 또는 헤테로 원자로 N을 1 이상 포함하는 헤테로아릴렌기인 것일 수 있다. 이 경우, n은 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0068] 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 시아노기, 알킬기, 아릴기 및 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 시아노기, 메틸기, 에틸기, 페닐기, 및 헤테로 원자로 N을 1 이상 포함하는 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 2 이상 치환된 것일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 비치환된 페닐렌기일 수 있다.

[0069] 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 알킬기, 아릴기 및 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐기일 수 있다. 화학식 1에서, 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 메틸기, 에틸기 및 페닐기로 이루어진 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 2 이상 치환된 2가의 바이페닐기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 비치환된 2가의 바이페닐기일 수 있다.

[0070] 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 2가의 터페닐기일 수 있다.

[0071] 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 알킬기 및 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기일 수 있다. 화학식 1에서,

L<sub>1</sub>은 메틸기로 2치환된 플루오레닐렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 아릴기로 2치환된 플루오레닐렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 페닐기로 2치환된 플루오레닐렌기일 수 있다.

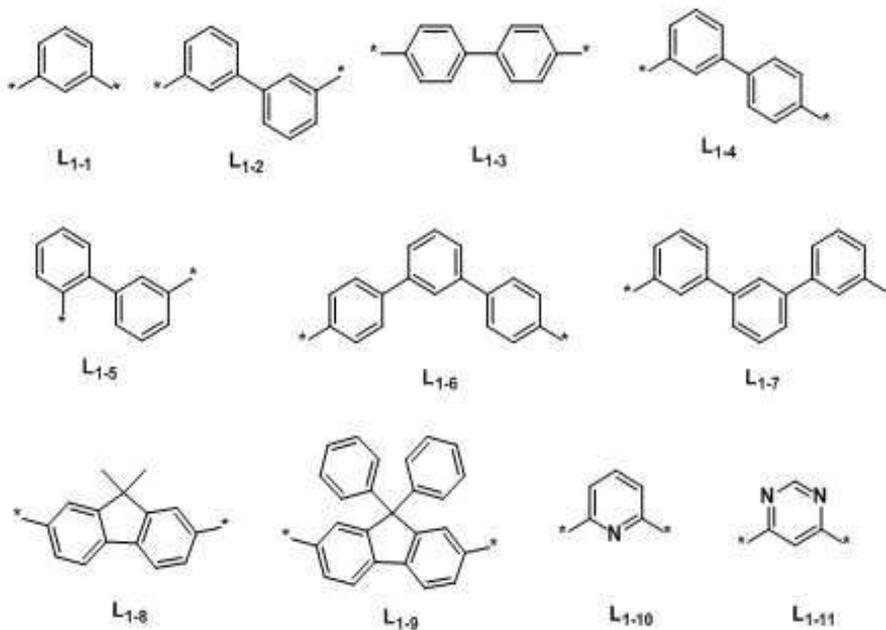
[0072] 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 15 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 단환식 헤테로아릴렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 헤테로 원자로 N을 1 이상 포함하는 헤테로아릴렌기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 2가의 피리딘기, 치환 또는 비치환된 2가의 피리미딘기, 또는 치환 또는 비치환된 2가의 트리아진기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 2가의 피리딘기, 또는 치환 또는 비치환된 2가의 피리미딘기일 수 있다. 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 아릴기로 치환 또는 비치환된 2가의 피리딘기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 2가의 피리미딘기일 수 있다.

[0073] 화학식 1에서, n이 1이고, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이며, L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다.

[0074] 화학식 1에서, n이 1이고, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 단환식 아릴렌기이며, L<sub>2</sub>는 헤테로 원자로 N, S 및 O 중 적어도 1종 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기일 수 있다.

[0075] 화학식 1에서, n이 1이고, L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 페닐렌기이며, L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기일 수 있다.

[0076] 화학식 1에서, L<sub>1</sub>은 하기 L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub> 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

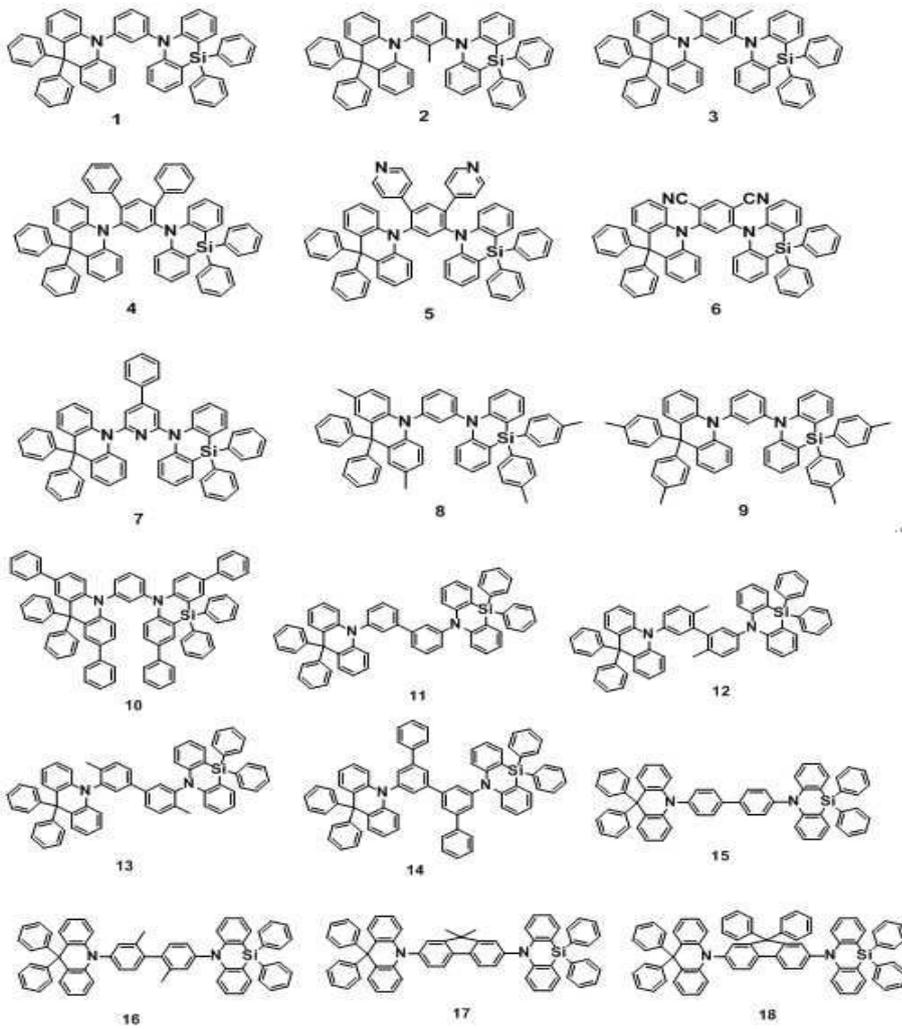


[0077]

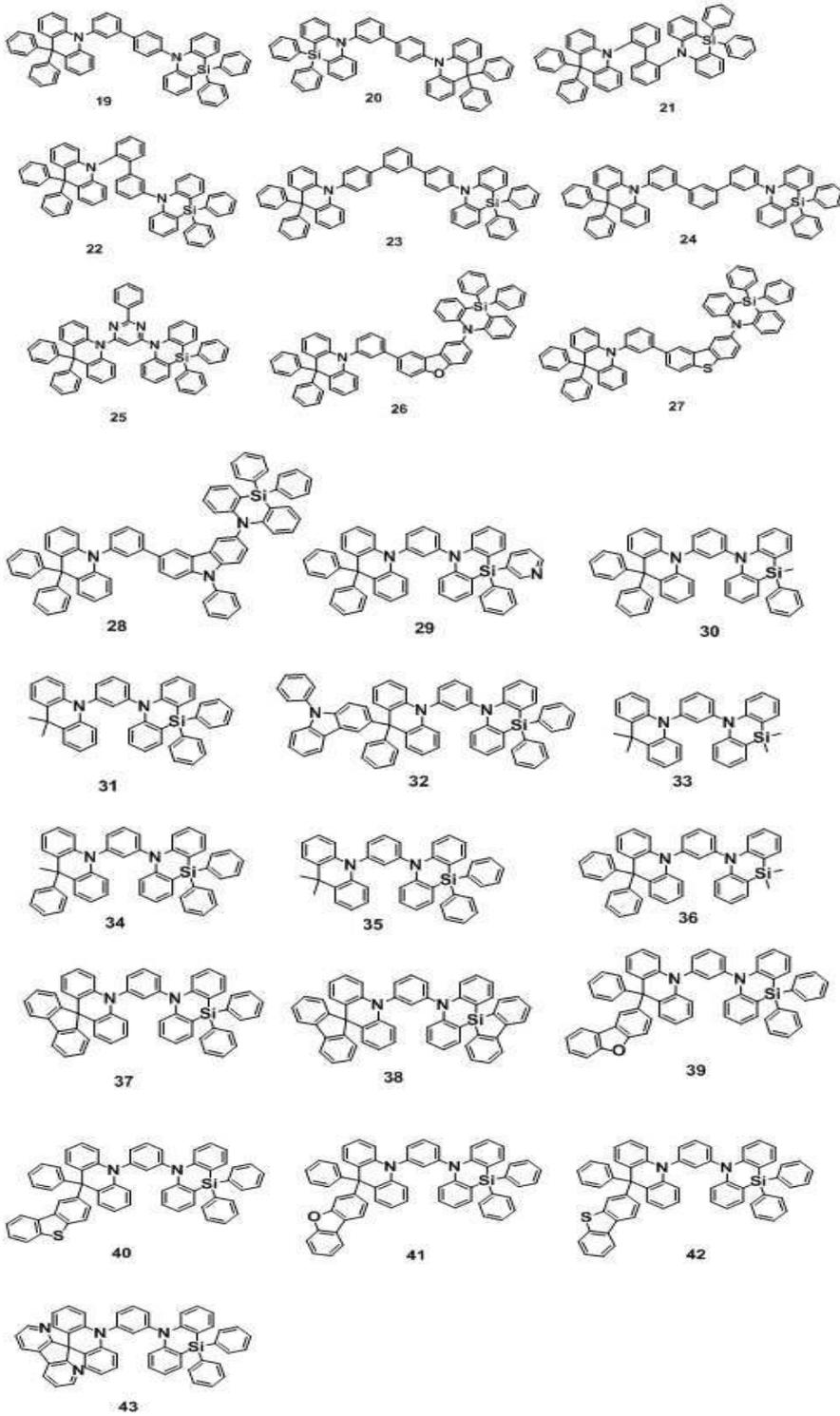
[0078] L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub>는 각각 독립적으로 1 이상의 치환기로 치환되는 것일 수도 있다. 예를 들어, L<sub>1-1</sub> 내지 L<sub>1-11</sub>는 각각 독립적으로 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 15 이하의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된다.

[0079] 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0080] [화합물군 1]



[0081]



[0082]

[0083]

[0084]

[0085]

[0086]

[0087]

본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 소자 효율을 향상시킬 수 있다.

이하에서는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다. 이하에서는 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물과의 차이점을 위주로 구체적으로 설명하고, 설명되지 않은 부분은 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물에 따른다.

본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함한다.

도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 2는 본 발명의

일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

[0088] 도 1 내지 도 3을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함한다.

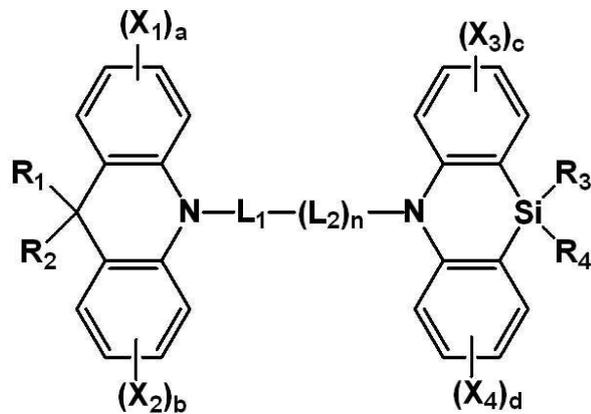
[0089] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 화소 전극 또는 양극일 수 있다. 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등을 포함할 수 있다. 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.

[0090] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

[0091] 이하에서는, 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물이 정공 수송 영역(HTR)에 포함되는 것을 예를 들어 설명한다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 제공된 1층 이상의 유기층 중 적어도 하나의 층에 포함될 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 발광층(EML)에 포함되는 것일 수 있다.

[0092] 정공 수송 영역(HTR)은 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함한다. 구체적으로, 정공 수송 영역(HTR)은 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함한다.

[0093] [화학식 1]



[0094] X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, a 내지 d 및 n에 관한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바 생략하도록 한다.

[0096] 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0097] 정공 수송 영역(HTR)이 다층 구조를 가질 경우, 다층 구조 중 발광층(EML)과 접하는 층이 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)이 제1 전극(EL1) 상에 배치된 정공 주입층(HIL), 정공 주입층(HIL) 상에 배치된 정공 수송층(HTL) 및 정공 수송층(HTL) 상에 배치된 전자 저지층(EBL)을 포함하는 경우, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 전자 저지층(EBL)에 포함되는 것일 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함하는 것일 수 있다.

[0098] 정공 수송 영역(HTR)의 구조가 상기에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질과 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구

조를 갖거나, 제1 전극(EL1)로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 또는 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층 의 구조를 가질 수 있다.

- [0099] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 비교적 높은 최저 삼중항 여기 에너지를 갖는 것일 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물의 최저 삼중항 여기 에너지는 3.0eV 이상, 3.1eV 이상, 또는 3.2eV 이상인 것일 수 있다. 높은 최저 삼중항 여기 에너지를 갖는 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물이 발광층(EML)과 접하는 층에 포함될 경우, 발광층(EML) 내에서 형성된 삼중항 여기자가 정공 수송층(HTR)으로 확산되는 것을 최소화하거나 억제시킬 수 있으며, 결과적으로 발광 효율을 향상시킬 수 있다.
- [0100] 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0101] 정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine) 화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4''-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine), TDATA(4,4'4''-Tris(N,N-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4''-tris(N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino)-triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diiphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.
- [0102] 정공 수송층(HTL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diiphenylbenzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 등을 더 포함할 수도 있다.
- [0103] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)을 모두 포함하면, 정공 주입층(HIL)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 이며, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 30Å 내지 약 120Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0104] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0105] 정공 수송 영역(HTR)은 필요에 따라 추가의 층을 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 버퍼층을 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다.
- [0106] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)은 형광, 인광에 의해 광을 발하는 층이고, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 600Å의 두께로 형성된다.
- [0107] 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

- [0108] 발광층(EML)의 재료로서는, 공지의 발광 재료를 사용할 수 있고, 특히 한정되는 것은 아니지만, 플루오란텐(fluoranthene) 유도체, 피렌(pyrene) 유도체, 아릴아세틸렌(arylacetylene) 유도체, 플루오렌(fluorene) 유도체, 페릴렌(perylene) 유도체, 크리센(chrysene) 유도체 등으로부터 선택된다. 바람직하게는, 피렌 유도체, 페릴렌 유도체, 안트라센 유도체를 들 수 있다.
- [0109] 발광층(EML)은 예를 들어, 스피로-DPVBi(spiro-DPVBi), 스피로-6P(spiro-6P, 2,2',7,7'-tetrakis(biphenyl-4-yl)-9,9'-spirobifluorene(spiro-sexiphenyl)), DSB(distyryl-benzene), DSA(distyryl-arylene), PFO(Polyfluorene)계 고분자 및 PPV(poly(p-phenylene vinylene)계 고분자로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나를 포함하는 형광 물질을 포함하는 것일 수도 있다.
- [0110] 발광층(EML)은 도펀트를 더 포함할 수 있고, 도펀트는 공지의 재료를 사용할 수 있다. 예를 들어, 10-Phenyl-10H,10'H-spiro[acridine-9,9'-anthracen]-10'-one(ACRSA), 스티릴유도체 (예를 들면, 1,4-bis[2-(3-N-ethylcarbazoyl)vinyl]benzene(BCzVB), 4-(di-p-tolylamino)-4"-[(di-p-tolylamino)styryl]stilbene(DPAVB), N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(diphenylamino)styryl)naphthalen-2-yl)vinyl)phenyl)-N-phenylbenzenamine(N-BDAVBi)), 페릴렌 및 그 유도체 (예를 들면, 2,5,8,11-tetra-t-butylperylene(TBPe)), 피렌 및 그 유도체 (예를 들면, 1,1-dipyrene, 1,4-dipyrenylbenzene, 1,4-Bis(N,N-Diphenylamino)pyrene), 2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene(TBP), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene) 등을 도펀트로 사용할 수 있다.
- [0111] 발광층(EML)은 예를 들어, Alq<sub>3</sub>(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazoyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(N-vinylcarbazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TCTA(4,4',4'-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazoyl)-2,2'-dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), CP1(Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO<sub>3</sub> (Hexaphenylcyclotrisiloxane), DPSiO<sub>4</sub> (Octaphenylcyclotetra siloxane) 또는 PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 포함하는 것일 수 있다.
- [0112] 전자 수송 영역(ETR)은 발광층(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 정공 저지층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0113] 전자 수송 영역(ETR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0114] 예를 들어, 전자 수송 영역(ETR)은 전자 주입층(EIL) 또는 전자 수송층(ETL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 전자 주입 물질과 전자 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 전자 수송 영역(ETR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)로부터 차례로 적층된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.
- [0115] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0116] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 Alq<sub>3</sub>(Tris(8-hydroxyquinolinato)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-yl)phenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzene), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq<sub>2</sub>(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술

한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0117] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, LiQ(Lithium quinolate), Li<sub>2</sub>O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI와 같은 할로겐화 금속 등이 사용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭(energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0118] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층을 포함할 수 있다. 정공 저지층은 예를 들어, DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 및 Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0119] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 공통 전극 또는 음극일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)이 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.

[0120] 제2 전극(EL2)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들을 포함하는 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.

[0121] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 보조 전극은 제2 전극(EL2)과 연결되어, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소시킬 수 있다.

[0122] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.

[0123] 유기 전계 발광 소자(10)가 전면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 반사형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 배면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 반사형 전극일 수 있다.

[0124] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 정공 수송 영역(바람직하게는, 발광층과 접하는 층)에 포함시킴으로써, 고효율을 구현할 수 있다.

[0125] 이하, 구체적인 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 예시에 불과하며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

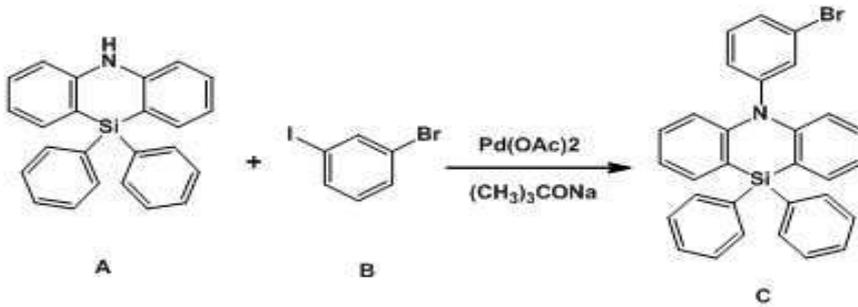
[0126] (합성예)

[0127] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0128] 1. 화합물 1의 합성

[0129] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물인 화합물 1은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

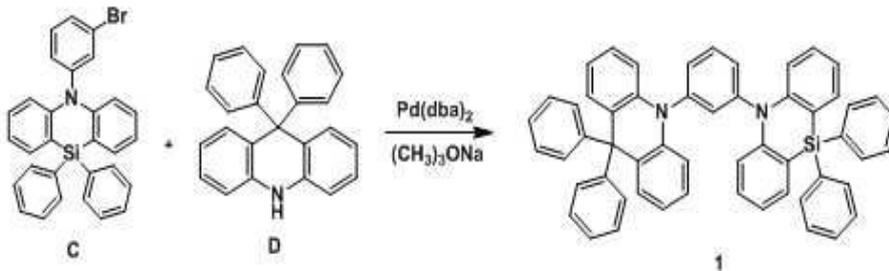
[0130] (화합물 C의 합성)



[0131]

[0132] 아르곤(Ar) 분위기 하에서, 화합물 A 6.0g, 화합물 B 4.9g, 팔라듐아세테이트(PalladiumAcetate) 0.39 g, Sodium-tert-butoxide 4.95g에 톨루엔 200ml, Xantphos 1.0g을 순서대로 첨가하고, 8시간 가열 환류했다. 실온까지 냉각한 용액을 여과하고, 여과액에 에탄올 100ml을 첨가했다. 석출한 결정을 여과하고, 물 50ml, 에탄올 100ml의 순서대로 씻어서 화합물 C의 담황색 분말 9.3 g (수율 78%)을 얻었다.

[0133] (화합물 1의 합성)



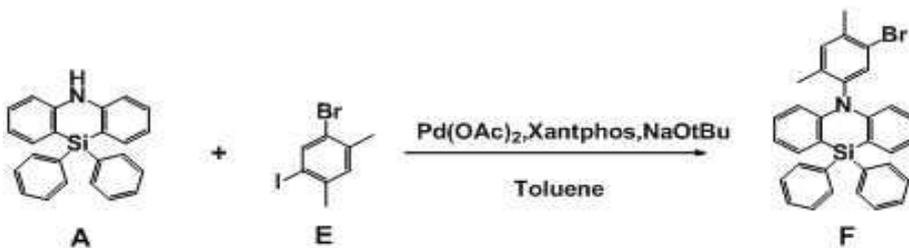
[0134]

[0135] 아르곤(Ar) 분위기 하에서, 화합물 C 16.75g, 화합물 D 4.49g, Palladium(0) Bis(dibenzylideneacetone) 0.18g, Sodium-tert-butoxide 3.9g에 톨루엔 100ml, tri(tert-buthyl)phosphine의 2M 톨루엔 용액 1.0ml를 순서대로 첨가하고, 5시간 가열 환류했다. 실온까지 냉각한 용액을 여과하고, 여과액에 에탄올 100ml를 첨가했다. 석출한 결정을 컬럼크로마토그래피(Toluene:Hexane 1:1)로 정제하고, 농축 건조한 고체를 톨루엔/에탄올로 재결정해서 화합물 1의 백색분말 9.3g (수율 92%)을 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 1의 분자량 측정 결과는 하기와 같다.

[0136] (M/z 756.3(M+), 757.3(MH+))

[0137] 2. 화합물 3의 합성

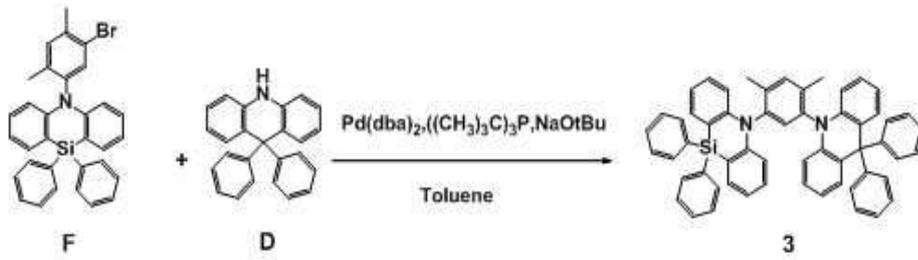
[0138] (화합물 F의 합성)



[0139]

[0140] 아르곤(A4) 분위기 하에서, 화합물 A 6.0g, 화합물 E 4.9g, PalladiumAcetate 0.39 g, Sodium-tert-butoxide 4.95g에 톨루엔 200ml, Xantphos 1.0g을 순서대로 더하고, 8시간 가열 환류했다. 실온까지 냉각한 용액을 여과하고, 여과액에 에탄올 100 ml을 더했다. 석출한 결정을 여과하고, 물 50ml, 에탄올 100ml의 순서대로 씻고, 톨루엔으로 용해한 후 실리카겔 컬럼 크로마토그래피 (Toluene:Hexane 1:1)로 정제해서 중간체 F 담황색분말 3.8 g (수율 41%)을 얻었다.

[0141] (화합물 3의 합성)



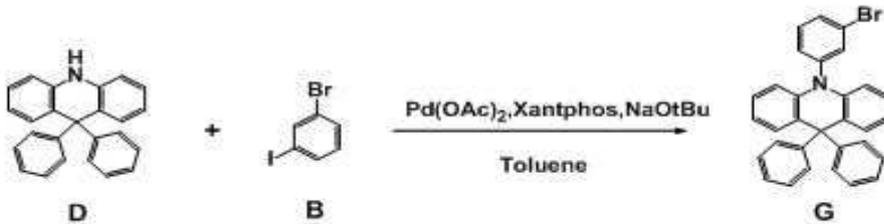
[0142]

[0143] 아르곤(Ar) 분위기 하에서, 중간체 F 3.84 g, 화합물 D 2.40 g, Palladium (0) Bis(dibenzylideneacetone) 0.18 g, Sodium-tert-butoxide 2.1 g에 톨루엔 100ml, tri(tert-butyl)phosphine의 2M톨루엔 용액 1.0ml를 순서대로 더하고, 5시간 가열 환류했다. 실온까지 냉각한 용액을 여과하고, 여과액에 에탄올100ml를 더했다. 석출한 결정을 칼럼크로마토그래피(Toluene:Hexane 1:1)로 정제하고, 농축건고한 고체를 톨루엔/에탄올로 재결정해서 화합물 3의 백색분말 4.4 g (수율 81%)을 얻었다. 생성물은 FAB-MS에 의해 측정된 화합물 3의 분자량은 하기와 같다.

[0144] (M/z 784.3(M+), 785.3(MH+))

[0145] 3. 화합물 11의 합성

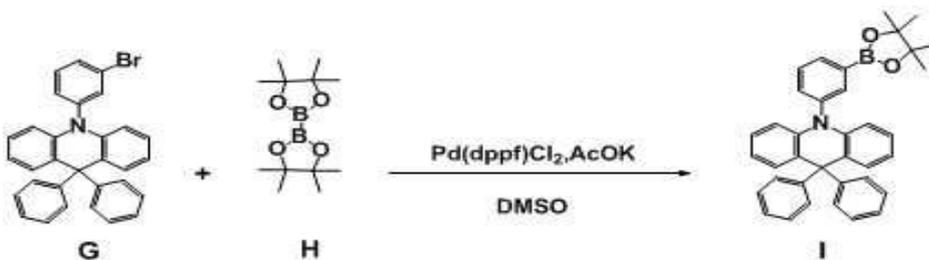
[0146] (화합물 G의 합성)



[0147]

[0148] 아르곤(Ar) 분위기 하에서, 화합물 D 6.0g, 화합물 B 5.1g, PalladiumAcetate 0.39g, Sodium-tert-butoxide 5.2g에 톨루엔 200ml, Xantphos 1.0g을 순서대로 더하고, 8시간 가열 환류했다. 실온까지 냉각한 용액을 여과하고, 여과액에 에탄올100 ml를 더했다. 석출한 결정을 여과하고, 물 50ml, 에탄올 100ml의 순서대로 씻고, 톨루엔으로 용해한 후 실리카겔 컬럼 크로마토그래피 (Toluene:Hexane 1:1)로 정제해서의 중간체 G의 담황색분말 7.2 g (수율 81%)을 얻었다.

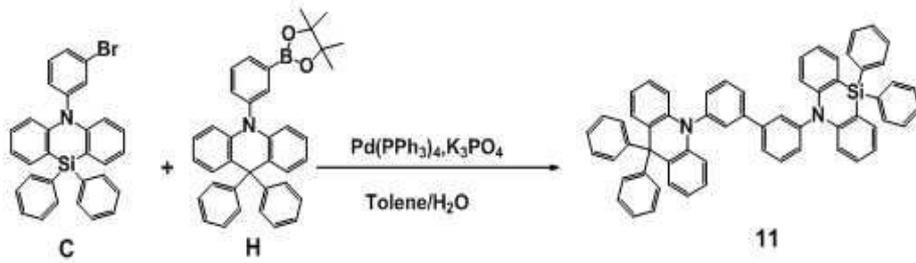
[0149] (화합물 I의 합성)



[0150]

[0151] 아르곤(Ar) 분위기 하에서, 중간체 G 7.2g, 화합물 H 6.6g, [1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene]palladium(II) Dichloride 0.53 g, Potassium Acetate 6.2 g에 DMSO 100 ml를 더하고, 8시간 가열 환류했다. 실온까지 냉각한 용액을 물 500ml에 더해서 생성된 침전을 여과하고, 톨루엔으로 용해한 후 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(Toluene:Hexane 1:1)로 정제해서 중간체 I 갈색분말 8.1g (수율 70%)을 얻었다.

[0152] (화합물 11의 합성)



[0153]

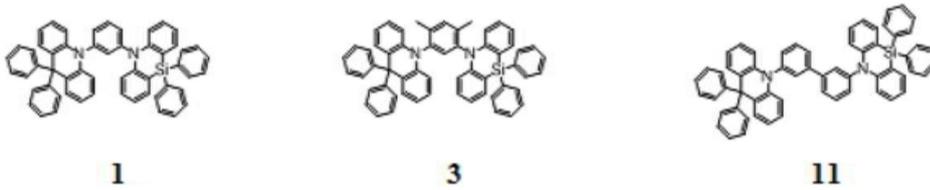
[0154] 아르곤(Ar) 분위기 하에서, 중간체 C 4.0g, 중간체 H 4.2g, [1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene]palladium(II) Dichloride 0.2 g, Potassium Phosphate 5.1 g에 톨루엔 100 ml, 물 5ml, 에탄올 5ml 을 더해, 8시간 가열 환류했다. 실온까지 냉각한 용액을 여과하고, 여과액에 에탄올 100 ml를 더했다. 석출한 결정을 여과하고, 물 50ml, 에탄올 100ml의 순서대로 씻고, 톨루엔으로 용해한 후 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(Toluene:Hexane 1:1)로 정제해서 화합물 11의 백색분말 3.43 g (수율 52%)을 얻었다. 생성물은 FAB-MS에 의해 측정된 화합물 11의 분자량은 하기와 같다.

[0155] (M/z 832.3(M+), 833.3(MH+))

[0156] (소자 작성예)

[0157] 상술한 화합물 1, 3 및 11을 전자 저지층 재료로 사용하여 실시예 1 내지 3의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

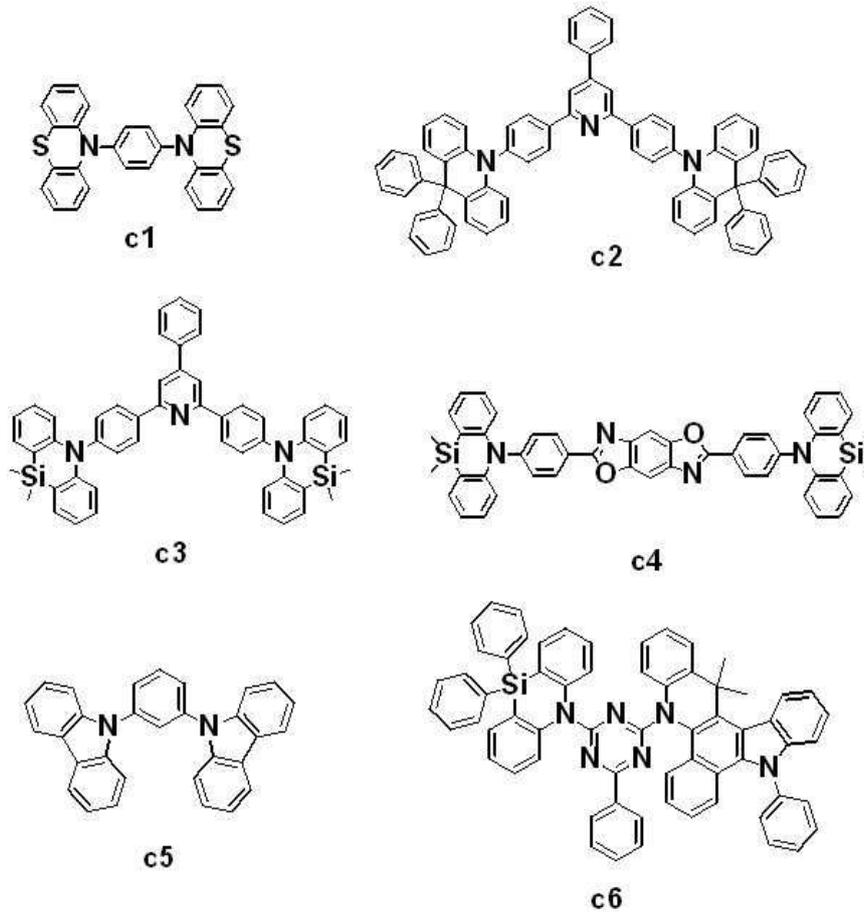
[0158] [실시예 화합물]



[0159]

[0160] 하기 비교예 화합물 c1 내지 c6을 전자 저지층 재료로 사용하여 비교예 1 내지 6의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0161] [비교예 화합물]



[0162]

[0163] 실시예 1 내지 3 및 비교예 1 내지 6의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm 두께의 제1 전극을 형성하고, HAT-CN으로 10nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, α-NPD로 80nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, 실시예 화합물 또는 비교예 화합물로 5nm 두께의 전자 저지층을 형성하고, DPEPO에 ACRSA를 18% 도핑한 20nm 두께의 발광층을 형성하고, DPEPO로 10nm 두께의 정공 저지층을 형성하고, TPBi로 30nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 0.5nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al로 100nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 모두 진공 증착법으로 형성하였다.

[0164] 다음으로, 제작한 유기 전계 발광 소자의 전압 및 외부 양자 효율을 측정하였다. 외부 양자 효율은 하마마쓰포토닉스 사의 C9920-11 휘도배향특성 측정장치를 이용하여 측정하였다. 평가 결과를 하기 표 1에 나타낸다.

표 1

[0165]

소자 작성예	전자 저지층 재료	개시 전압 (V, 10mA/cm <sup>2</sup> )	외부양자효율 (%)
실시예 1	실시예 화합물 1	6.1	17.9
실시예 2	실시예 화합물 3	6.5	18.2
실시예 3	실시예 화합물 11	6.0	16.7
비교예 1	비교예 화합물 c1	5.8	3.6
비교예 2	비교예 화합물 c2	6.1	4.3
비교예 3	비교예 화합물 c3	5.8	5.2
비교예 4	비교예 화합물 c4	5.7	3.1
비교예 5	비교예 화합물 c5	6.6	15.0
비교예 6	비교예 화합물 c6	5.7	4.3

[0166] 상기 표 1의 결과를 통해, 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 고 효율을 구현할 수 있음을 알 수 있다.

[0167] 실시예 1 내지 3에 이용된 화합물은 각각 링커를 기준으로 1개의 디하이드로아크리딘(dihydroacridine) 유도체 및 1개의 디하이드로이벤조아자실린(dihydrodibenzoazasilin) 유도체를 포함하며, 비교적 높은 최저 삼중항 여기 에너지를 갖는다.

[0168] 반면, 비교예 1 내지 5에 이용된 화합물은 각각 링커를 기준으로 동일한 종류의 유도체 2개를 포함하며, 실시예 1 내지 3에 이용된 화합물 대비 낮은 최저 삼중항 여기 에너지를 갖는다.

[0169] 실시예 화합물 1, 3, 11 및 비교예 화합물 c1 내지 c6의 최저 삼중항 여기 에너지를 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

		최저 삼중항 여기 에너지 T1(eV)
실시예 1	실시예 화합물 1	3.28
실시예 2	실시예 화합물 3	3.25
실시예 3	실시예 화합물 11	3.22
비교예 1	비교예 화합물 c1	2.99
비교예 2	비교예 화합물 c2	2.95
비교예 3	비교예 화합물 c3	2.98
비교예 4	비교예 화합물 c4	2.62
비교예 5	비교예 화합물 c5	3.18
비교예 6	비교예 화합물 c6	2.55

[0171] 최저 삼중항 여기 에너지의 산출은 이론화학 simulation software Gaussian 09에 의해 TD-B3LYP/631-G(d)를 이용하였다.

[0172] 본 발명의 일 실시예에 따른 헤테로환 화합물을 정공 수송 영역 중 발광층과 접하는 층(예를 들어, 전자 저지층)에 포함시킴으로써, 발광층에서 생성된 삼중항 여기자가 정공 수송 층으로 확산/누설되는 것을 최소화하거나 억제시킬 수 있으며, 이로 인해, 고효율의 유기 전계 발광 소자를 구현할 수 있다.

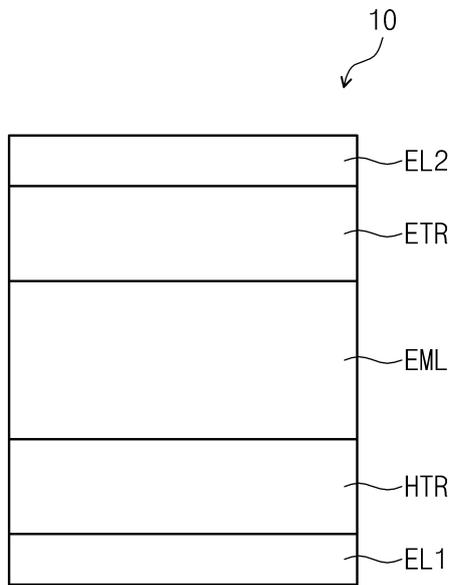
[0173] 이상, 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

**부호의 설명**

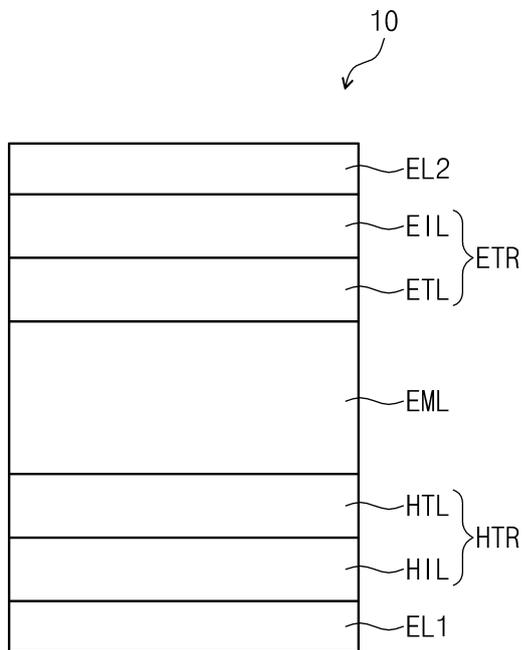
- [0174] 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극
- HTR: 정공 수송 영역 HIL: 정공 주입층
- HTL: 전자 수송층 EBL: 전자 저지층
- EML: 발광층 ETR: 전자 수송 영역
- ETL: 전자 수송층 EIL: 전자 주입층
- EL2: 제2 전극

도면

도면1



도면2



도면3

