



등록특허 10-2512548



(19) 대한민국특허청(KR)  
 (12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년03월22일  
 (11) 등록번호 10-2512548  
 (24) 등록일자 2023년03월16일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H10K 50/00* (2023.01)  
*H10K 99/00* (2023.01)
- (52) CPC특허분류  
*C09K 11/06* (2022.01)  
*H10K 50/11* (2023.02)
- (21) 출원번호 10-2017-0178632
- (22) 출원일자 2017년12월22일  
 심사청구일자 2020년11월02일
- (65) 공개번호 10-2019-0077157
- (43) 공개일자 2019년07월03일
- (56) 선행기술조사문현  
 KR1020160034528 A

- (73) 특허권자  
**삼성디스플레이 주식회사**  
 경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
- (72) 발명자  
**야마타니, 아키노리**  
 일본 가나가와Ken 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸  
 2-7 주식회사 삼성 요코하마 연구소내
- (74) 대리인  
**특허법인 고려**

전체 청구항 수 : 총 22 항

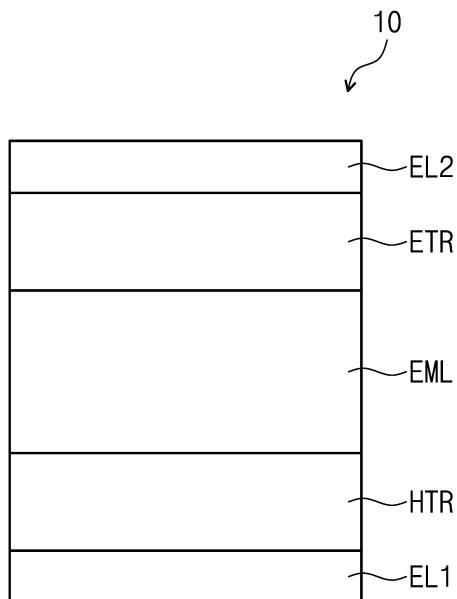
심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 함질소 화합물

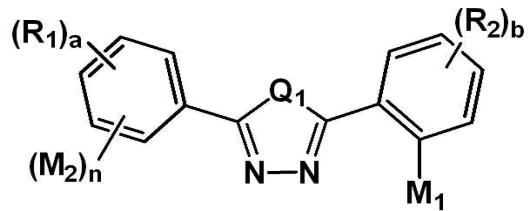
**(57) 요 약**

본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 함질소 화합물에 관한 것이다. 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다. 하기 화학식 1에서, n은 0 또는 1이고, M<sub>1</sub> 및 M<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 하기 화학식 2 또는 3으로 표시된다.

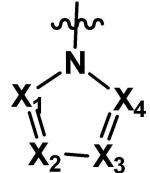
(뒷면에 계속)

**대 표 도** - 도1

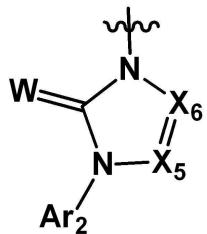
[화학식 1]



[화학식 2]



[화학식 3]



(52) CPC특허분류

*H10K 50/12* (2023.02)*H10K 50/14* (2023.02)*H10K 85/654* (2023.02)*C09K 2211/1044* (2013.01)*C09K 2211/1048* (2013.01)*C09K 2211/1051* (2013.01)

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

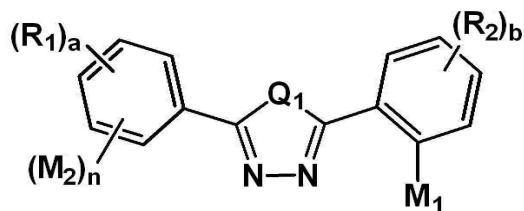
상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

상기 제1 전극 및 상기 제2 전극은 각각 독립적으로, Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti, In, Sn, 및 Zn 중 선택되는 적어도 하나, 이들 중 선택되는 2종 이상의 화합물, 이들 중 선택되는 2종 이상의 혼합물, 또는 이들의 산화물을 포함하고,

상기 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

$Q_1$ 은  $NAr_1$ , 0 또는 S이고,

$Ar_1$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

$R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 할로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 포스핀옥시기, 치환 또는 비치환된 포스핀실파이드기, 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 형성할 수 있고,

a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며,

n은 0 또는 1이고,

$M_1$  및  $M_2$ 는 각각 독립적으로 하기 화학식 2 또는 3으로 표시된다:

[화학식 2]

[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

$X_1$  내지  $X_6$ 은 각각 독립적으로  $CR_3$  또는  $N$ 이요,

$X_1$  내지  $X_4$  중 적어도 하나는  $N$ 이며,

$R_3$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

$W$ 는 0,  $NAr_3$ , 또는  $CAr_4Ar_5$ 이며,

$Ar_2$  내지  $Ar_5$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

## 청구항 2

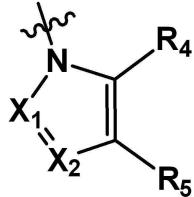
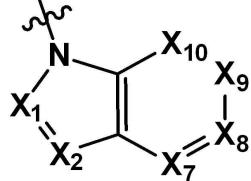
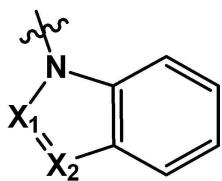
제1항에 있어서,

상기 화학식 2가 하기 화학식 2-1 내지 2-3 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 2-1]

[화학식 2-2]

[화학식 2-3]



상기 화학식 2-1 내지 2-3에서,

$X_1$  및  $X_2$ 는 각각 독립적으로  $CR_3$  또는  $N$ 이요,

$X_1$  및  $X_2$  중 적어도 하나는  $N$ 이며,

$X_7$  내지  $X_{10}$ 은 각각 독립적으로  $CR_6$  또는  $N$ 이며,

$X_7$  내지  $X_{10}$  중 적어도 하나는  $N$ 이요,

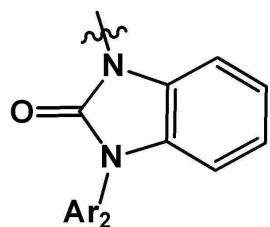
$R_3$  내지  $R_6$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

## 청구항 3

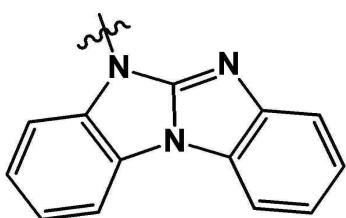
제1항에 있어서,

상기 화학식 3이 하기 화학식 3-1 내지 3-4 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

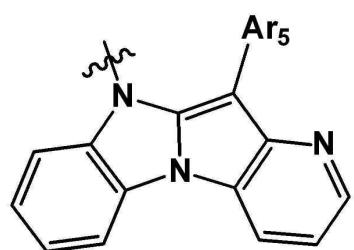
[화학식 3-1]



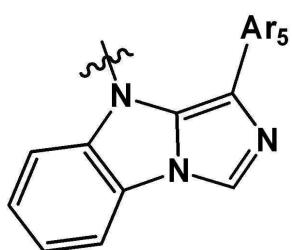
[화학식 3-2]



[화학식 3-3]



[화학식 3-4]



상기 화학식 3-1, 3-3 및 3-4에서,

$\text{Ar}_2$  및  $\text{Ar}_5$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

#### 청구항 4

제1항에 있어서,

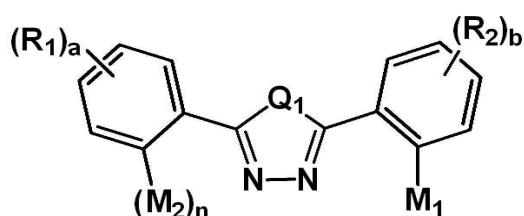
$\text{Q}_1$ 이  $\text{NAr}_1$ 이고,  $\text{Ar}_1$ 이 치환 또는 비치환된 페닐기인 것인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 5

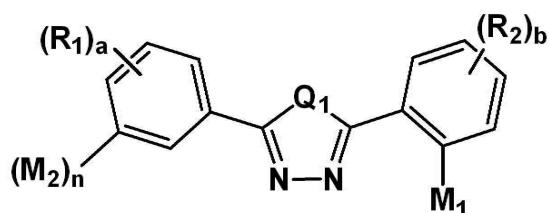
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



상기 화학식 1-1 및 1-2에서,

$\text{Q}_1$ ,  $\text{R}_1$ ,  $\text{R}_2$ ,  $\text{M}_1$ ,  $\text{M}_2$ ,  $n$ ,  $a$  및  $b$ 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

## 청구항 6

제1항에 있어서,

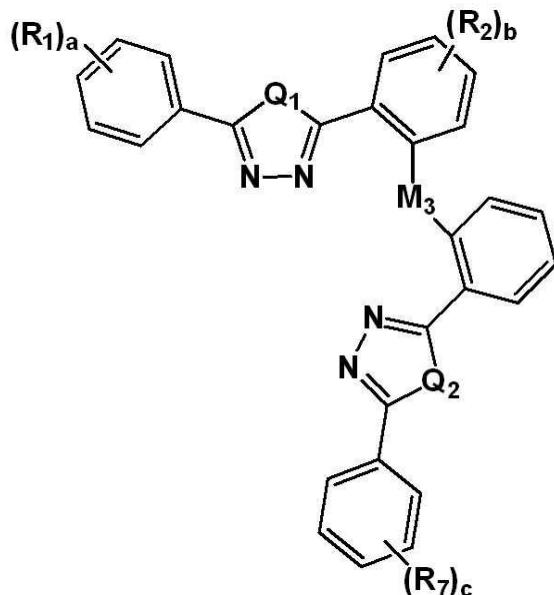
a가 0인 유기 전계 발광 소자.

## 청구항 7

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-3으로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-3]



상기 화학식 1-3에서,

$Q_1$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $a$  및  $b$ 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하고,

$Q_2$ 는  $Q_1$ 의 정의와 동일하며,

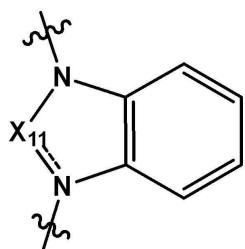
$Q_1$  및  $Q_2$ 는 서로 동일하거나 상이하고,

$R_7$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

$c$ 는 0 이상 5 이하의 정수이고,

$M_3$ 는 하기 화학식 4로 표시된다:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

$X_{11}$ 은  $C=0$ , 또는  $CR_8^{\circ}$ 이고,

$R_8$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

#### 청구항 8

제1항에 있어서,

$b$ 가 0 또는 1이고,

$b$ 가 1일 때,  $R_2$ 가  $M_1$ 과 동일한 것인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 9

제1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도편트를 포함하고,

상기 호스트가 상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 10

제9항에 있어서,

상기 도편트는 인광 도편트인 것인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 11

제1항에 있어서,

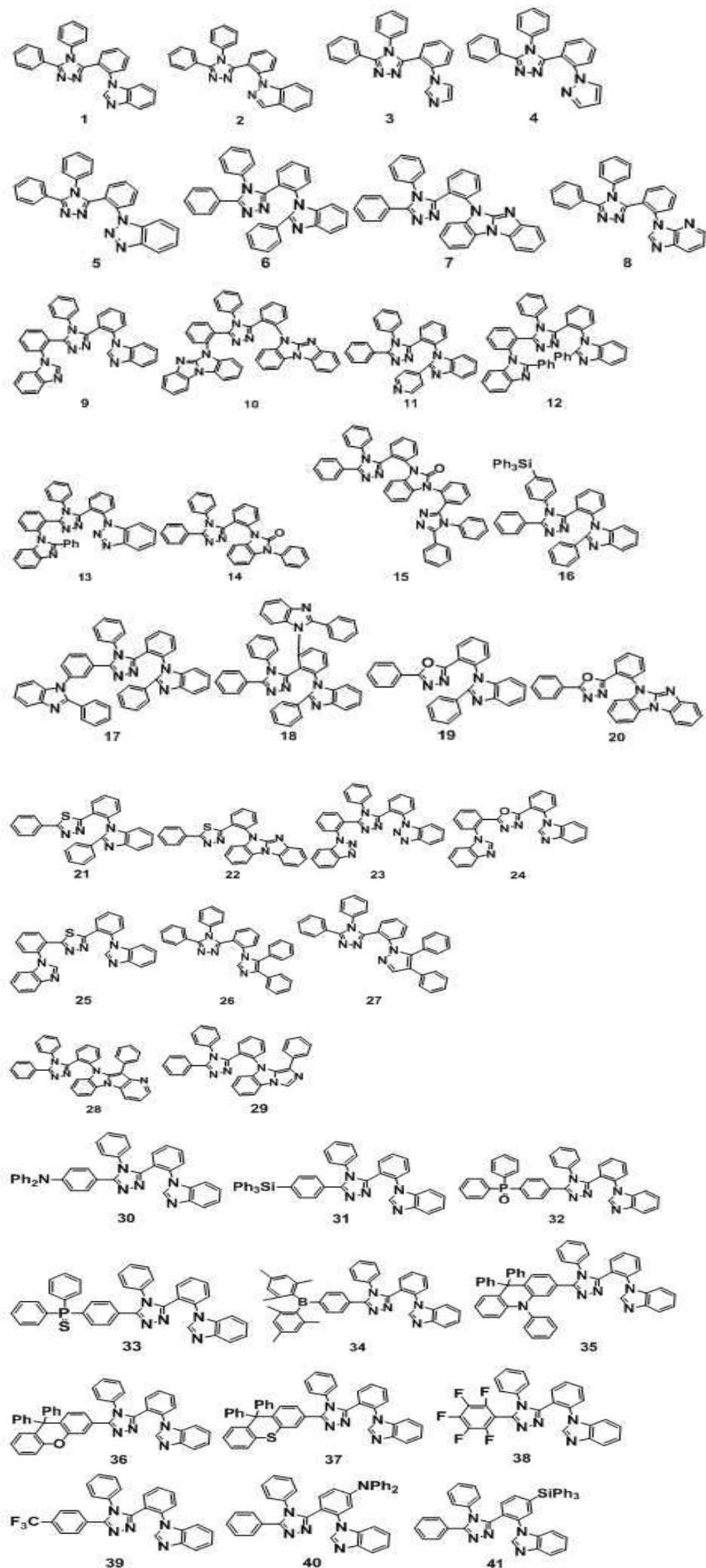
상기 함질소 화합물은 최저 삼중항 에너지 준위가 3.0eV 이상인 것인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 12

제1항에 있어서,

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

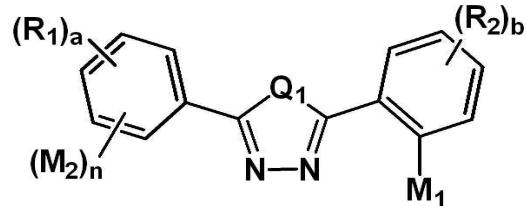
[화합물군 1]



## 청구항 13

하기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

$Q_1$ 은  $NAr_1$ , 0 또는 S이고,

$Ar_1$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

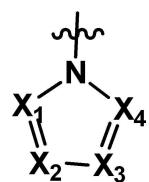
$R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 할로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 포스핀옥시기, 치환 또는 비치환된 포스핀설파이드기, 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 형성할 수 있고,

a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며,

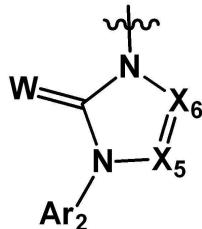
n은 0 또는 1이고,

$M_1$  및  $M_2$ 는 각각 독립적으로 하기 화학식 2 또는 3으로 표시된다:

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

$X_1$  내지  $X_6$ 는 각각 독립적으로  $CR_3$  또는 N이고,

$X_1$  내지  $X_4$  중 적어도 하나는 N이며,

$R_3$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

W는 0,  $NAr_3$ , 또는  $CAr_4Ar_5$ 이며,

$Ar_2$  내지  $Ar_5$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치

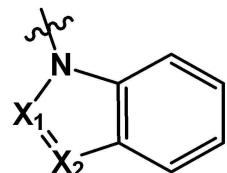
환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

#### 청구항 14

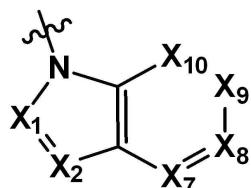
제13항에 있어서,

상기 화학식 2가 하기 화학식 2-1 내지 2-3 중 어느 하나로 표시되는 것인 함질소 화합물:

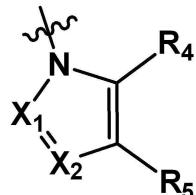
[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



[화학식 2-3]



상기 화학식 2-1 내지 2-3에서,

X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 CR<sub>3</sub> 또는 N이고,

X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub> 중 적어도 하나는 N이며,

X<sub>7</sub> 내지 X<sub>10</sub>은 각각 독립적으로 CR<sub>6</sub> 또는 N이며,

X<sub>7</sub> 내지 X<sub>10</sub> 중 적어도 하나는 N이고,

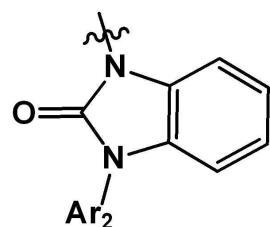
R<sub>3</sub> 내지 R<sub>6</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이다.

#### 청구항 15

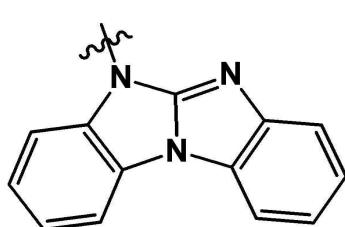
제13항에 있어서,

상기 화학식 3이 하기 화학식 3-1 내지 3-4 중 어느 하나로 표시되는 것인 함질소 화합물:

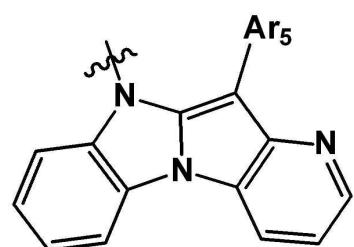
[화학식 3-1]



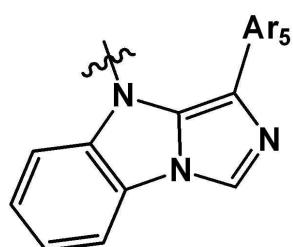
[화학식 3-2]



[화학식 3-3]



[화학식 3-4]



상기 화학식 3-1, 3-3 및 3-4에서,

Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는

비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 해테로아릴기이다.

### 청구항 16

제13항에 있어서,

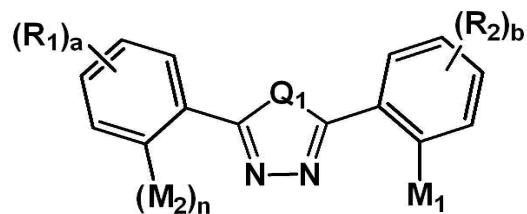
$Q_1$ 이  $NAr_1$ 이고,  $Ar_1$ 이 치환 또는 비치환된 페닐기인 것인 함질소 화합물.

### 청구항 17

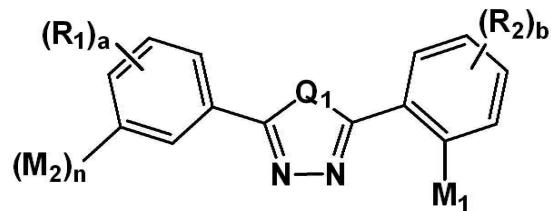
제13항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시되는 것인 함질소 화합물:

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



상기 화학식 1-1 및 1-2에서,

$Q_1$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $n$ ,  $a$  및  $b$ 는 청구항 13에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 18

제13항에 있어서,

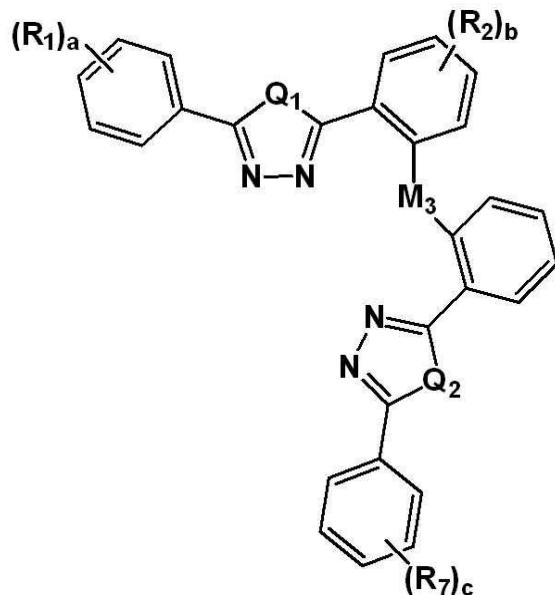
$a$ 가 0인 함질소 화합물.

### 청구항 19

제13항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-3으로 표시되는 것인 함질소 화합물:

[화학식 1-3]



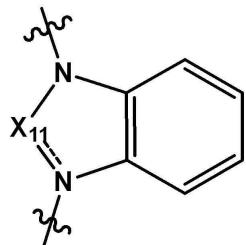
상기 화학식 1-3에서,

 $Q_1$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $a$  및  $b$ 는 청구항 13에서 정의한 바와 동일하고, $Q_2$ 는  $Q_1$ 의 정의와 동일하며, $Q_1$  및  $Q_2$ 는 서로 동일하거나 상이하고,

$R_7$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

 $c$ 는 0 이상 5 이하의 정수이고, $M_3$ 는 하기 화학식 4로 표시된다:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

 $X_{11}$ 은  $C=O$ , 또는  $CR_8$ 이고,

$R_8$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

청구항 20

제13항에 있어서,

b가 0 또는 1이고,

b가 1일 때, R<sub>2</sub>가 M<sub>1</sub>과 동일한 것인 함질소 화합물.

### 청구항 21

제13항에 있어서,

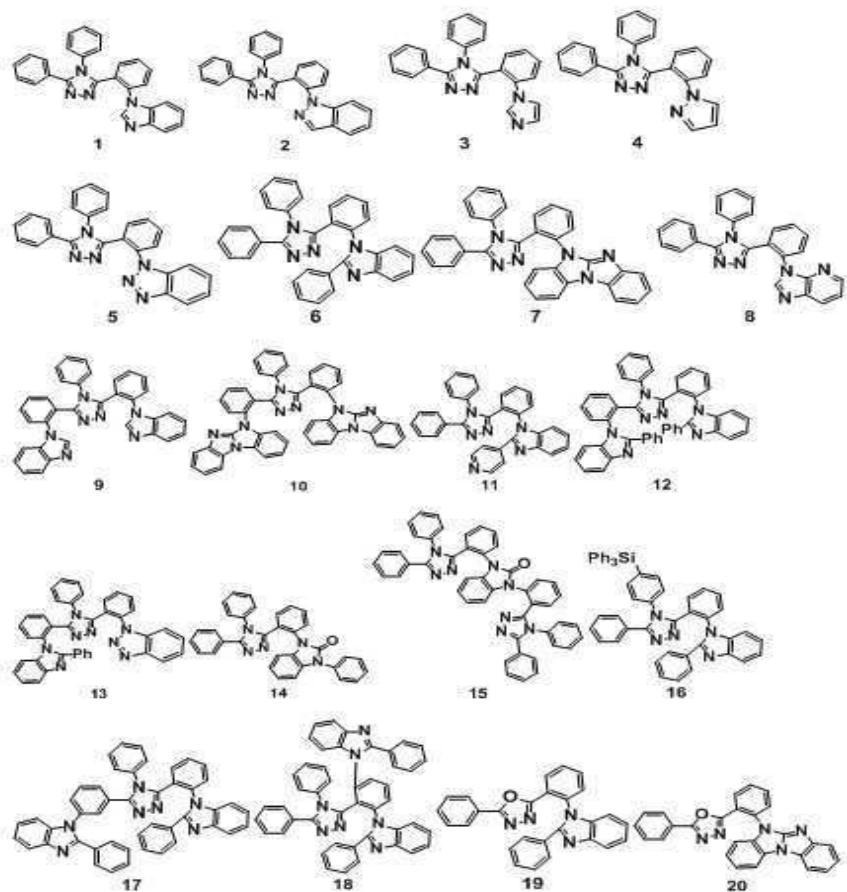
최저 삼중향 에너지 준위가 3.0eV 이상인 것인 함질소 화합물.

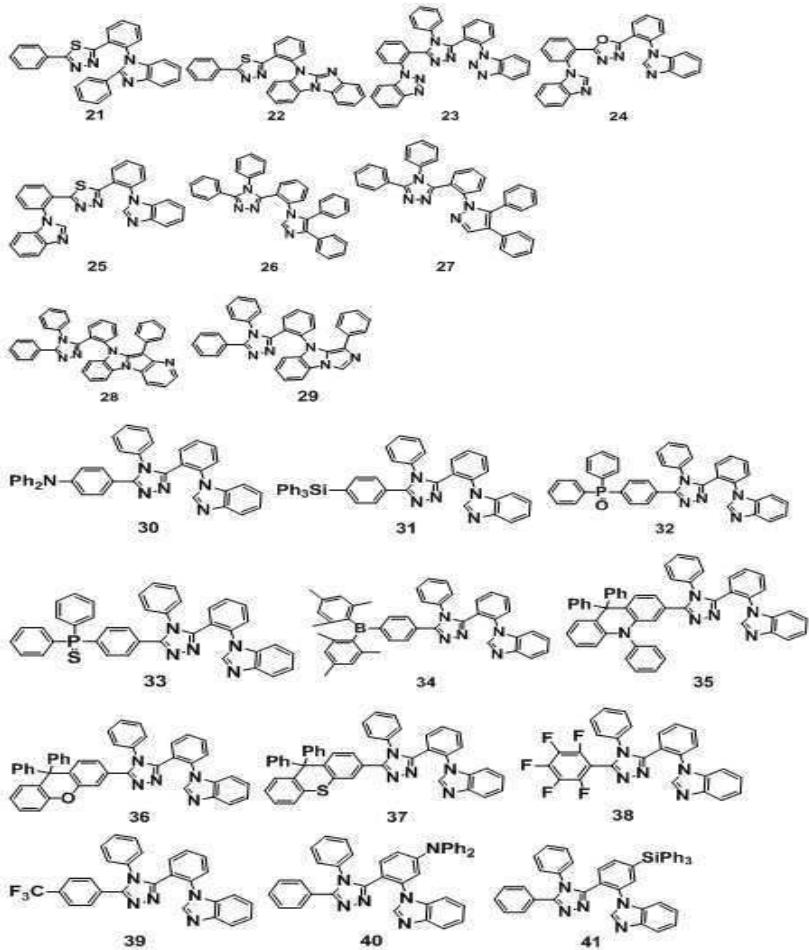
### 청구항 22

제13항에 있어서,

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

[화합물군 1]





## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001]

본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 함질소 화합물에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002]

최근, 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 표시 장치(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 왕성하게 이루어져 왔다. 유기 전계 발광 표시 장치는 액정 표시 장치 등과는 다르고, 제1 전극 및 제2 전극으로부터 주입된 정공 및 전자를 발광층에 있어서 재결합시킴으로써, 발광층에 있어서 유기 화합물을 포함하는 발광 재료를 발광시켜서 표시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

[0003]

유기 전계 발광 소자를 표시 장치에 응용함에 있어서는, 유기 전계 발광 소자의 저 구동 전압화, 고 발광 효율화 및 장수명화가 요구되고 있으며, 이를 안정적으로 구현할 수 있는 유기 전계 발광 소자용 재료 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

[0004]

본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 함질소 화합물을 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

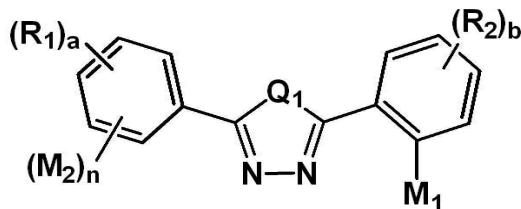
#### 과제의 해결 수단

[0005]

본 발명의 일 실시예는 제1 전극, 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층, 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역, 및 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고, 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0006]

[화학식 1]



[0007]

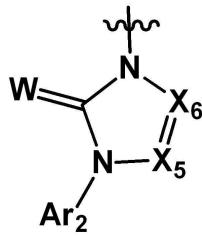
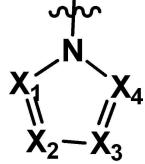
[0008]

화학식 1에서,  $Q_1$ 은  $NAr_1$ , 0 또는 S이고,  $Ar_1$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,  $R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 할로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 포스핀옥시기, 치환 또는 비치환된 포스핀설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, n은 0 또는 1이고,  $M_1$  및  $M_2$ 는 각각 독립적으로 하기 화학식 2 또는 3으로 표시된다:

[0009]

[화학식 2]

[화학식 3]



[0010]

[0011]

화학식 2 및 3에서,  $X_1$  내지  $X_6$ 는 각각 독립적으로  $CR_3$  또는 N이고,  $X_1$  내지  $X_4$  중 적어도 하나는 N이며,  $R_3$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있고, W는 O,  $NAr_3$ , 또는  $CAr_4Ar_5$ 이며,  $Ar_2$  내지  $Ar_5$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0012]

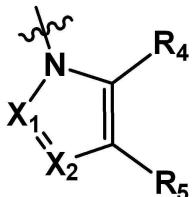
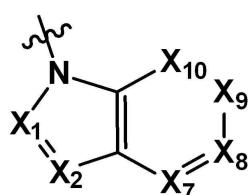
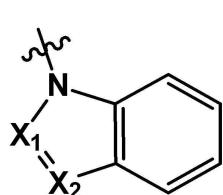
화학식 2가 하기 화학식 2-1 내지 2-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0013]

[화학식 2-1]

[화학식 2-2]

[화학식 2-3]



[0014]

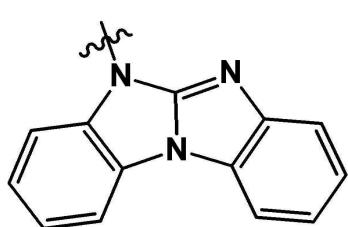
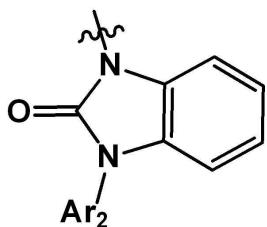
[0015]

화학식 2-1 내지 2-3에서,  $X_1$  및  $X_2$ 는 각각 독립적으로  $CR_3$  또는 N이고,  $X_1$  및  $X_2$  중 적어도 하나는 N이며,  $X_7$  내지  $X_{10}$ 은 각각 독립적으로  $CR_6$  또는 N이며,  $X_7$  내지  $X_{10}$  중 적어도 하나는 N이고,  $R_3$  내지  $R_6$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이다.

[0016] 화학식 3이 하기 화학식 3-1 내지 3-4 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0017] [화학식 3-1]

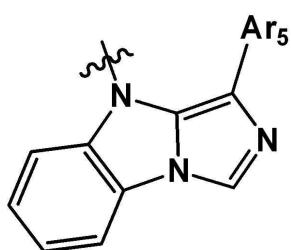
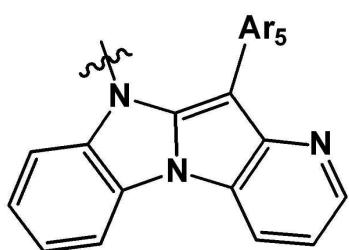
[화학식 3-2]



[0018]

[화학식 3-3]

[화학식 3-4]



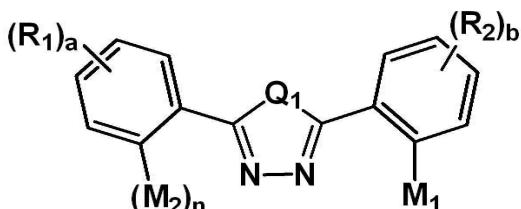
[0019]

[0021] 화학식 3-1, 3-3 및 3-4에서,  $\text{Ar}_2$  및  $\text{Ar}_5$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0022]  $\text{Q}_1$ 이  $\text{NAr}_1$ 이고,  $\text{Ar}_1$ 이 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다.

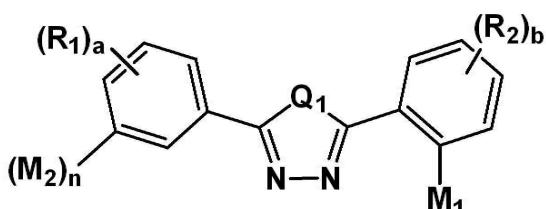
[0023] 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시될 수 있다.

[0024] [화학식 1-1]



[0025]

[화학식 1-2]



[0026]

[0028] 화학식 1-1 및 1-2에서,  $\text{Q}_1$ ,  $\text{R}_1$ ,  $\text{R}_2$ ,  $\text{M}_1$ ,  $\text{M}_2$ ,  $n$ ,  $a$  및  $b$ 는 전술한 바와 동일하다.

[0029]

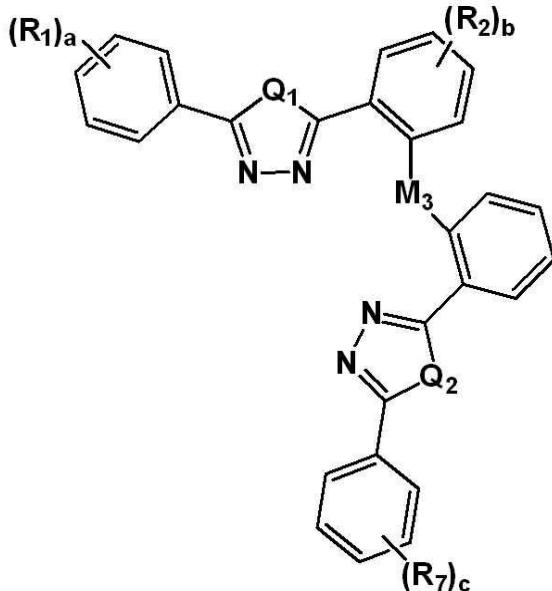
$a$ 가 0일 수 있다.

[0030]

화학식 1은 하기 화학식 1-3으로 표시될 수 있다.

[0031]

### [화학식 1-3]

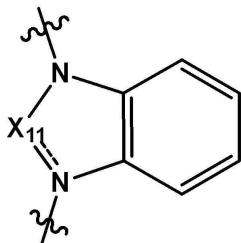


[0032]

[0033] 화학식 1-3에서,  $Q_1$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $a$  및  $b$ 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하고,  $Q_2$ 는  $Q_1$ 의 정의와 동일하며,  $Q_1$  및  $Q_2$ 는 서로 동일하거나 상이하고,  $R_7$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,  $c$ 는 0 이상 5 이하의 정수이고,  $M_3$ 는 하기 화학식 4로 표시된다.

[0034]

## [화학식 4]



[0035]

[0036] 화학식 4에서,  $X_{11}$ 은  $C=0$ , 또는  $CR_g$ 이고,  $R_g$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0037]      b가 0 또는 1이고, b가 1일 때,  $R_2$ 가  $M_1$ 과 동일한 것일 수 있다.

[0038]

화학식 1로 표시되는 할질소 화합물을은 최저 삼중형 에너지 준위가 3.0eV 이상인 것일 수 있다.

[0039]

발광층은 호스트 및 도편트를 포함하고, 호스트가 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0040]

도फ트는 일광 도프트일 수 있다.

[0041]

본 발명의 일 실시예는 상기 화학식 1로 표시되는 핵질소 화합물을 제공한다.

발명의 효과

[0042] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 효율이 우수하다.

[0043] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 유기 전계 발광 소자에 적용될 수 있으며, 고효율화에 기여할 수 있다.

## 도면의 간단한 설명

[0044]

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

[0045]

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.

[0046]

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.

[0047]

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.

[0048]

먼저, 도 1 내지 도 3을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.

[0049]

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.

[0050]

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.

[0051]

발광층(EML)은 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 포함한다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 1층 이상의 유기층 중 적어도 하나의 층이 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 포함할 수 있으며, 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)이 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 포함할 수도 있다.

[0052]

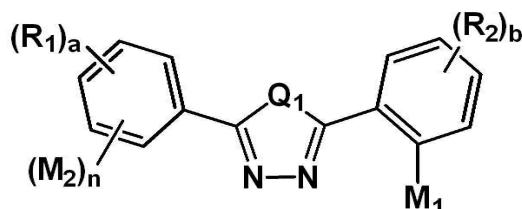
이하, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 자세히 설명한 후, 유기 전계 발광 소자(10) 각 층에 대해 설명하도록 한다.

[0053]

본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0054]

[화학식 1]



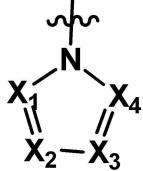
[0055]

화학식 1에서, Q<sub>1</sub>은 NAr<sub>1</sub>, O 또는 S이고, Ar<sub>1</sub>은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수

6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 할로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 포스핀옥시기, 치환 또는 비치환된 포스핀설파이드기, 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 형성할 수 있고, a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, n은 0 또는 1이고, M<sub>1</sub> 및 M<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 하기 화학식 2 또는 3으로 표시된다.

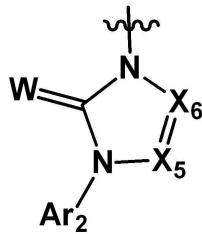
[0057]

[화학식 2]



[0058]

[화학식 3]



[0059]

화학식 2에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 CR<sub>3</sub> 또는 N이고, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub> 중 적어도 하나는 N이며, R<sub>3</sub>는 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0060]

화학식 3에서, X<sub>5</sub> 및 X<sub>6</sub>는 각각 독립적으로 CR<sub>3</sub> 또는 N이고, R<sub>3</sub>는 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있고, W는 0, NAr<sub>3</sub>, 또는 CAr<sub>4</sub>Ar<sub>5</sub>이며, Ar<sub>2</sub> 내지 Ar<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0061]

본 명세서에서,

는 연결되는 부위를 의미한다.

[0062]

본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 봉소기(보릴기), 포스핀기, 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, 폐닐기로 치환된 폐닐기로 해석될 수도 있다.

[0063]

본 명세서에서, "서로 결합하여 고리를 형성"한다는 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 각각 단환 또는 다환일 수 있다. 또한, 인접하는 기와 서로 결합하여 형성된 고리는 다른 고리와 연결되어 스페로 구조를 형성하는 것일 수도 있다.

[0064]

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.

[0065]

본 명세서에서, 할로겐 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.

[0066]

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 4 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.

[0067]

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 폐닐기, 나프탈기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 폐난트릴기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀸크페닐기, 섹시페닐기, 바이페닐렌기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0068]

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



[0069]

본 명세서에서, 할로알킬기, 알콕시기, 아랄킬기 및 알킬티오기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다.

[0070]

본 명세서에서, 아릴옥시기, 아랄킬기 및 아랄티오기 중 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다.

[0071]

본 명세서에서, 혜테로아릴기는 혜테로 원자로 O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 혜테로아릴기일 수 있다. 혜테로아릴기가 혜테로 원자를 2개 포함할 경우, 2개의 혜테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 혜테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하이다. 혜테로아릴기는 단환식 혜테로아릴기 또는 다환식 혜테로아릴기일 수 있다. 다환식 혜테로아릴기는 예를 들어, 2환 또는 3환 구조를 갖는 것일 수 있다. 혜테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라진기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 폐녹사진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라진노 피라진기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-혜테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카마졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨란기, 폐난트롤린기, 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 폐노티아진기, 디벤조실룰기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0072]

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

[0073]

본 명세서에서, 봉소기(보릴기)는 알킬 봉소기 및 아릴 봉소기를 포함한다. 봉소기의 예로는 트리메틸봉소기, 트리에틸봉소기, t-부틸디메틸봉소기, 트리페닐봉소기, 디페닐봉소기, 폐닐봉소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0074]

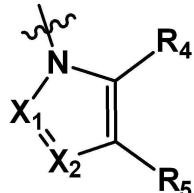
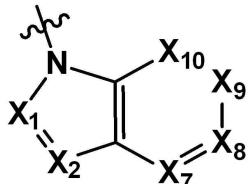
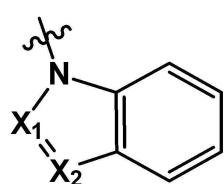
본 명세서에서, 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하 또는 2 이상 10 이하이다. 알케닐기의 예로는 비닐기, 1-부테닐기, 1-펜테닐기, 1,3-부타디에닐아릴기, 스티레닐기, 스티릴비닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0075]

본 명세서에서, 아미노기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아미노기는 알킬 아

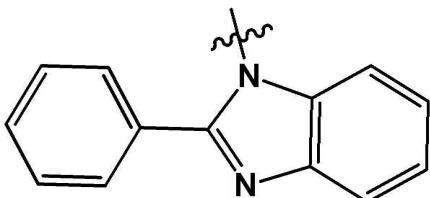
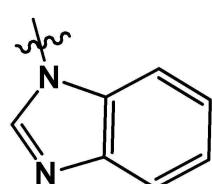
미노기 및 아릴 아미노기를 포함할 수 있다. 아미노기의 예로는 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 페닐아미노기, 디페닐아미노기, 나프틸아미노기, 9-메틸-안트라세닐아미노기, 트리페닐아미노기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

- [0077] 본 명세서에서, 포스핀 옥시기는 예를 들어, 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환된 것일 수 있다.
- [0078] 본 명세서에서, 포스핀 살파이드기는 예를 들어, 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환된 것일 수 있다.
- [0079] 화학식 1에서, a가 1일 경우, R<sub>1</sub>은 수소 원자가 아닐 수 있고, b가 1일 경우, R<sub>2</sub>는 수소 원자가 아닐 수 있다. a가 2 이상일 경우, 복수의 R<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, b가 2 이상일 경우, 복수의 R<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하다.
- [0080] 화학식 1에서, R<sub>1</sub>이 복수 개인 경우, 인접하는 2개의 R<sub>1</sub>은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있으며, 예를 들어 헤테로 고리를 형성할 수 있다.
- [0081] 화학식 2 및 3에서, R<sub>3</sub>가 복수 개인 경우, 인접하는 2개의 R<sub>3</sub>는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [0082] 화학식 2에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub> 중 N의 개수는 1, 2 또는 3일 수 있다.
- [0083] 화학식 2는 하기 화학식 2-1 내지 2-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.
- [0084] [화학식 2-1] [화학식 2-2] [화학식 2-3]



- [0085]
- [0086] 화학식 2-1에서, X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 CR<sub>3</sub> 또는 N이고, X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub> 중 적어도 하나는 N이며, R<sub>3</sub>은 수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.
- [0087] 화학식 2-1에서, R<sub>3</sub>은 수소 원자, 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로아릴기일 수 있다. 함질소 헤�테로아릴기는 예를 들어, 치환 또는 비치환된 피리딘기, 또는 치환 또는 비치환된 피리미딘기일 수 있다.
- [0088] 화학식 2-2에서, X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 CR<sub>3</sub> 또는 N이고, X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub> 중 적어도 하나는 N이며, X<sub>7</sub> 내지 X<sub>10</sub>은 각각 독립적으로 CR<sub>6</sub> 또는 N이며, X<sub>7</sub> 내지 X<sub>10</sub> 중 적어도 하나는 N이고, R<sub>3</sub> 및 R<sub>6</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이다.
- [0089] 화학식 2-3에서, X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 CR<sub>3</sub> 또는 N이고, X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub> 중 적어도 하나는 N이며, R<sub>3</sub> 내지 R<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이다.
- [0090] 화학식 2-1은 하기 화학식 2-1-1 내지 2-1-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

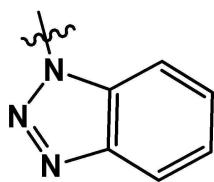
- [0091] [화학식 2-1-1] [화학식 2-1-2]



- [0092]

[0093]

[화학식 2-1-3]

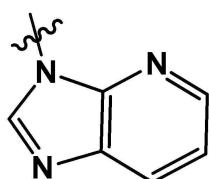


[0094]

화학식 2-2는 예를 들어, 하기 화학식 2-2-1로 표시될 수 있다.

[0096]

[화학식 2-2-1]



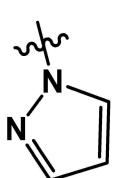
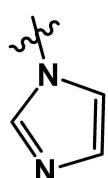
[0097]

화학식 2-3은 하기 화학식 2-3-1 내지 2-3-4 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0099]

[화학식 2-3-1]

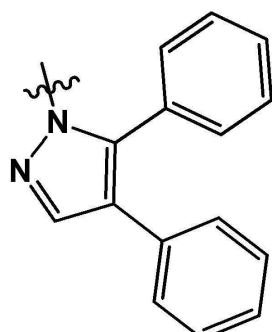
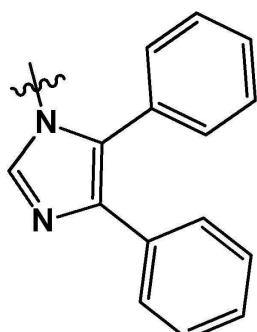
[화학식 2-3-2]



[0100]

[화학식 2-3-3]

[화학식 2-3-4]



[0102]

화학식 3에서, W는 O일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, W는 NAr<sub>3</sub>이고, Ar<sub>3</sub>가 Ar<sub>2</sub>와 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 또 다른 예로, 화학식 2에서, W는 CAr<sub>4</sub>Ar<sub>5</sub>이고, Ar<sub>4</sub> 및 Ar<sub>5</sub> 중 어느 하나는 Ar<sub>2</sub>와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

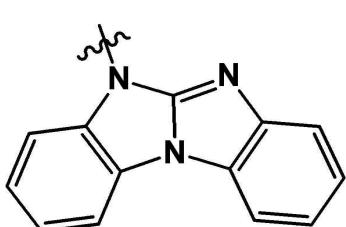
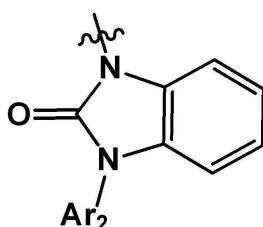
[0104]

화학식 3은 하기 화학식 3-1 내지 3-4 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0105]

[화학식 3-1]

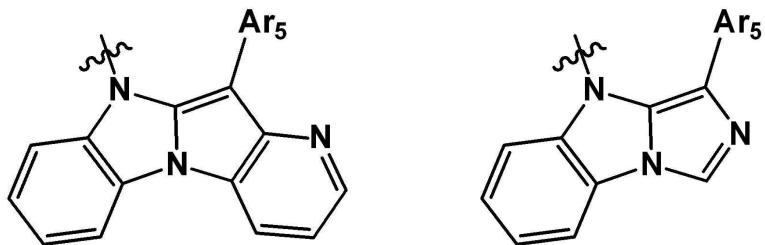
[화학식 3-2]



[0106]

[화학식 3-3]

[화학식 3-4]



[0108]

[0109] 화학식 3-1에서, Ar<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다. 화학식 3-1에서, Ar<sub>2</sub>는 예를 들어 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다.

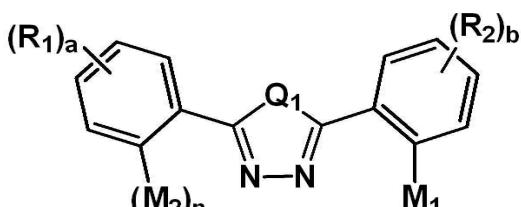
[0110] 화학식 3-3에서, Ar<sub>5</sub>는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이다. 화학식 3-3에서, Ar<sub>5</sub>는 예를 들어 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다.

[0111] 화학식 3-4에서, Ar<sub>5</sub>는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤�테로아릴기이다. 화학식 3-4에서, Ar<sub>5</sub>는 예를 들어 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다.

[0112] 화학식 1에서, Q<sub>1</sub>이 NAr<sub>1</sub>이고, Ar<sub>1</sub>이 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다. 예를 들어, Q<sub>1</sub>이 NAr<sub>1</sub>이고, Ar<sub>1</sub>이 실릴기로 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다. 예를 들어, Q<sub>1</sub>이 NAr<sub>1</sub>이고, Ar<sub>1</sub>이 트리페닐실릴기로 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 화학식 1에서, Q<sub>1</sub>이 0 또는 S일 수 있다.

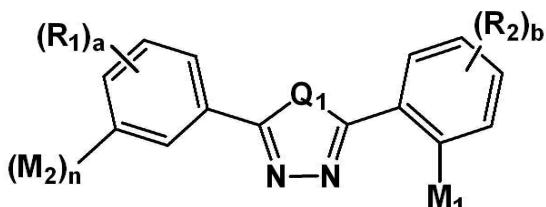
[0113] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시될 수 있다.

[0114]



[0115]

[화학식 1-1]



[0116]

[화학식 1-2]



[0117]

[0118] 화학식 1-1 및 1-2에서, Q<sub>1</sub>, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, M<sub>1</sub>, M<sub>2</sub>, n, a 및 b는 전술한 바와 동일하다.

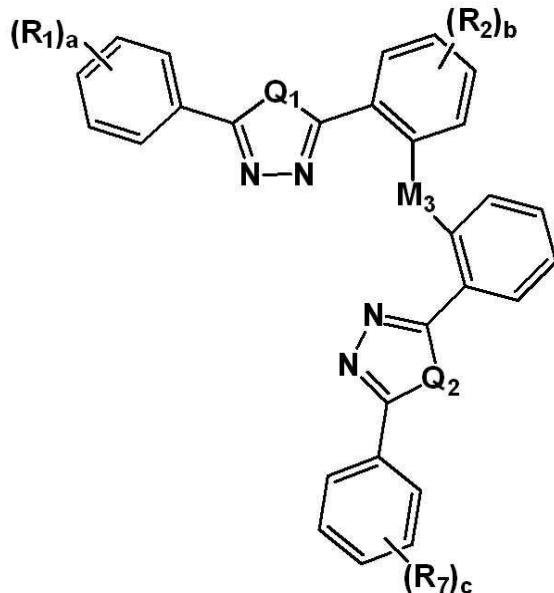
[0119] 화학식 1-1 및 1-2에서, n이 1일 때, M<sub>1</sub> 및 M<sub>2</sub>는 서로 동일한 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0120] 예를 들어, n이 1이고, M<sub>1</sub> 및 M<sub>2</sub>는 전술한 화학식 2-2-1로 표시되는 것일 수 있다. 또 다른 예로, n이 1이고, M<sub>1</sub> 및 M<sub>2</sub>는 전술한 화학식 2-2-2로 표시되는 것일 수 있다. n이 1이고, M<sub>1</sub> 및 M<sub>2</sub>는 전술한 화학식 3-2로 표시되는 것일 수 있다.

[0121] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-3으로 표시될 수 있다.

[0122]

[화학식 1-3]



[0123]

[0124]

화학식 1-3에서,  $Q_1$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $a$  및  $b$ 는 전술한 바와 동일하고,  $Q_2$ 는  $Q_1$ 의 정의와 동일하며,  $Q_1$  및  $Q_2$ 는 서로 동일하거나 상이하고,  $R_7$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,  $c$ 는 0 이상 5 이하의 정수이다.

[0125]

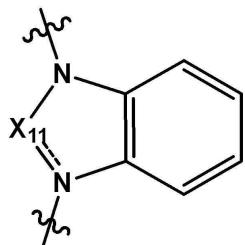
화학식 1-3에서,  $c$ 가 1일 경우,  $R_7$ 은 수소 원자가 아닐 수 있고,  $c$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_7$ 은 서로 동일하거나 상이하다. 이에 한정되는 것은 아니나,  $c$ 는 0일 수 있다.

[0126]

화학식 1-3에서,  $M_3$ 는 하기 화학식 4로 표시된다.

[0127]

[화학식 4]



[0128]

[0129]

화학식 4에서,  $X_{11}$ 은  $C=O$ , 또는  $CR_8$ 이고,  $R_8$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0130]

화학식 4에서,  $X_{11}$ 이  $C=O$ 인 경우,  $X_{11}$ 과 2개의 N은 모두 단일 결합을 통해 연결되고,  $X_{11}$ 이  $CR_8$ 인 경우, 2개의 N 중 하나의 N은  $CR_8$ 과 이중 결합을 통해 연결된다.

[0131]

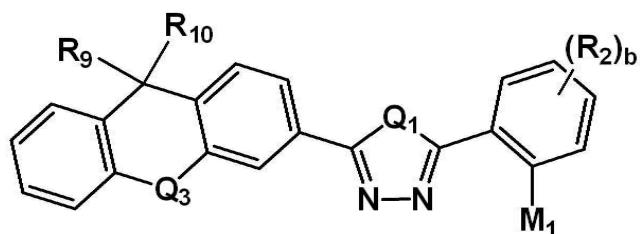
화학식 4에서,  $R_8$ 은 수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0132]

화학식 1에서  $a$ 는 0일 수 있다. 즉,  $M_2$ 가 치환될 수 있는 벤젠고리는  $M_2$ 로 1치환되거나 비치환된 구조를 갖는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며,  $a$ 는 1 이상이고,  $R_1$ 은 수소 원자 이외의 치환기일 수 있다. 예를 들어,  $R_1$ 은 아릴아민기, 아릴실릴기, 포스핀옥시기, 포스핀설파이드기, 아릴보릴기, 할로겐 원자, 또는 할로알킬기일 수 있다.

[0133] 화학식 1은 하기 화학식 1-4로 표시될 수 있다.

[0134] [화학식 1-4]



[0135]

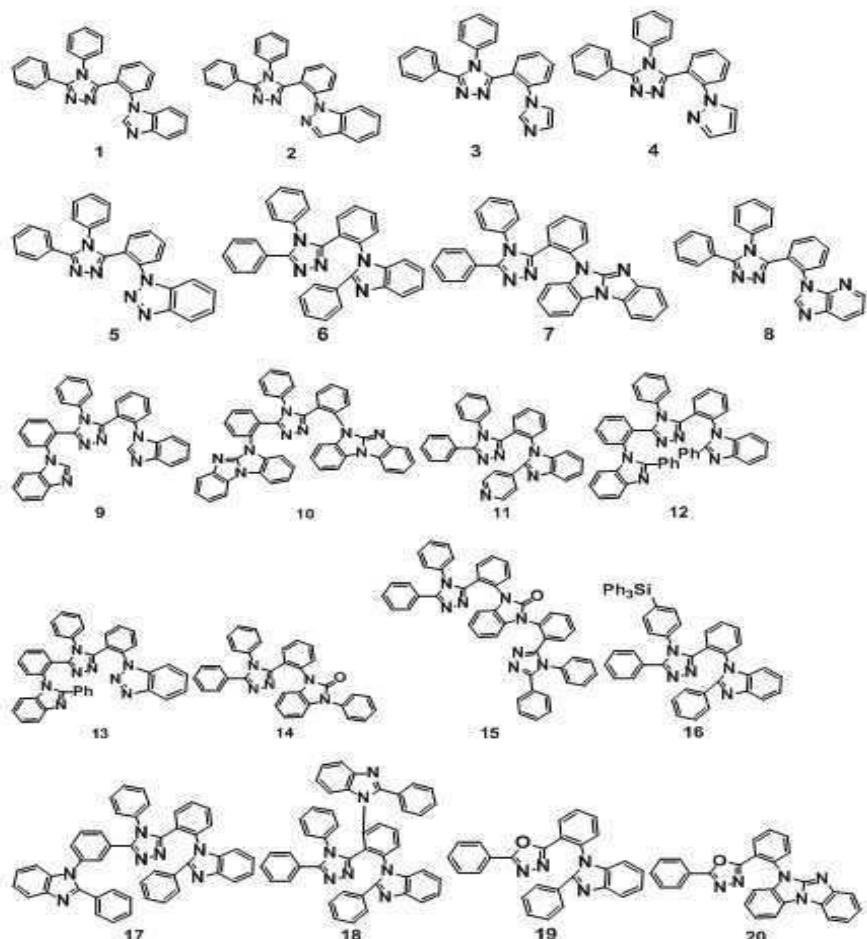
[0136] 화학식 1-4에서,  $Q_3$ 은 0, S 또는  $NR_{11}$ 이고,  $R_9$  내지  $R_{11}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,  $Q_1$ ,  $M_1$ ,  $R_2$  및 b는 전술한 바와 동일하다.

[0137] 화학식 1에서, b는 0일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, b가 1일 수 있다. b가 1일 경우,  $R_2$ 는  $M_1$ 과 동일한 것일 수 있다. 예를 들어, b가 1이고,  $R_2$  및  $M_1$ 은 전술한 화학식 2-2-1로 표시되는 것일 수 있다. 또 다른 예로, b가 1이고,  $R_2$  및  $M_1$ 은 전술한 화학식 2-2-2로 표시되는 것일 수 있다.

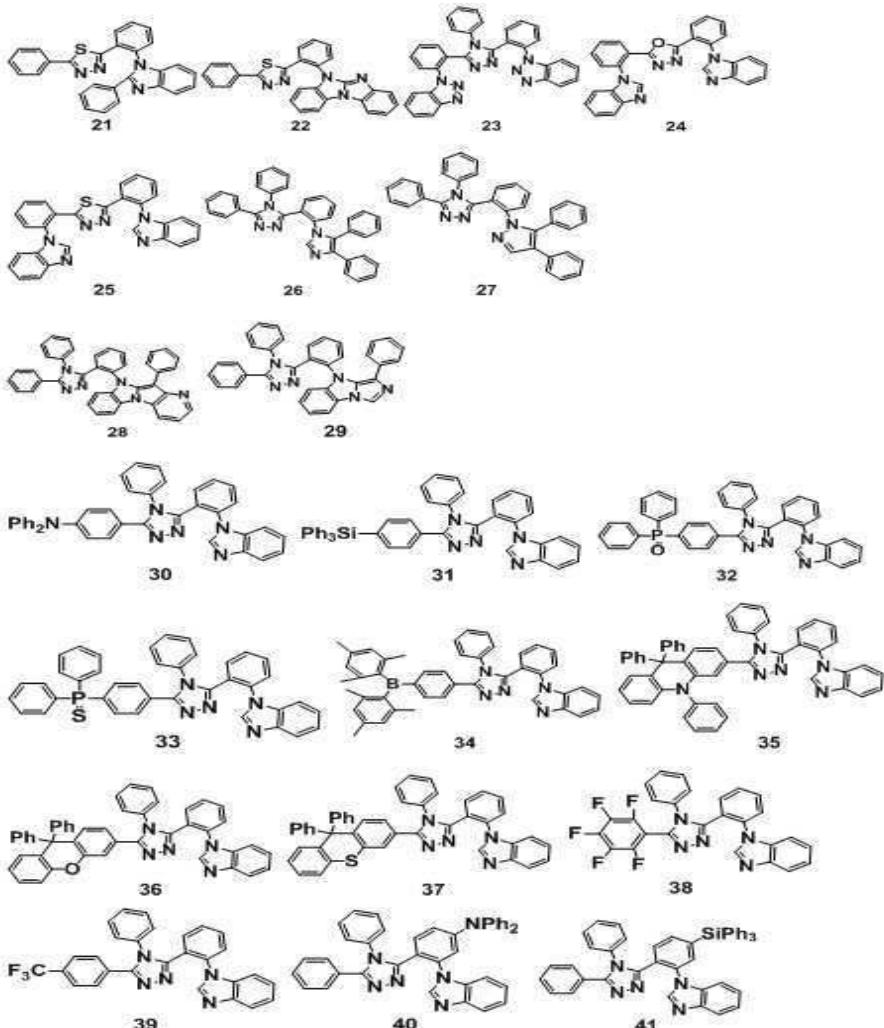
[0138] 또 다른 예로, b는 1 이상이고,  $R_2$ 는 수소 원자 이외의 치환기일 수 있다. 예를 들어,  $R_1$ 은 아릴아민기, 아릴실릴기, 포스핀옥시기, 포스핀설파이드기, 아릴보릴기, 할로겐 원자, 또는 할로알킬기일 수 있다.

[0139] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0140] [화합물군 1]



[0141]



[0142]

[0143] 상기 구조에서 Ph는 페닐기를 의미한다.

[0144]

본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 트리아졸(triazole), 옥사디아졸(oxadiazole) 또는 티아디아졸(thiadiazole) 골격을 가지며, 상기 골격에 치환되어 있는 벤젠 고리의 오르쏘(ortho) 위치에 전자 수용성 치환기를 위치시킨 구조를 가진다. 2종류의 함질소 5환 고리를 벤젠 고리 상에 오르쏘(ortho) 관계로 치환시킴에 따라 분자 구조가 뒤틀리게 되어 최저 삼중항 에너지 준위가 높아지게 된다. 이에 따라, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 인광 호스트 재료로 용이하게 적용될 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 유기 전계 발광 소자의 호스트 재료로 사용할 경우, 높은 전하 이동도를 가지게 하며, 이와 동시에 도편트의 최저 삼중항 에너지 준위를 가두는 것이 가능하게 된다.

[0145]

본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 최저 삼중항 에너지 준위(T1)가 3.0eV 이상인 것일 수 있다.

[0146]

다시 도 1 내지 도 3을 참조하여, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.

[0147]

이하에서는 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물과의 차이점을 위주로 구체적으로 설명하고, 설명되지 않은 부분은 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물에 따른다.

[0148]

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)가 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. 예를 들어, 제1 전극(EL1)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조

를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0149] 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.

[0150] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 베퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0151] 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.

[0152] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질과 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 베퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 베퍼층, 정공 수송층(HTL)/정공 베퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0153] 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스판 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0154] 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-MTADATA(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 sulfonicacid), PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyl diphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.

[0155] 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'-diphenylbenzidine), TAPC(4,4' -Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 등을 포함할 수도 있다.

[0156] 전자 저지층(EBL)은 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 전자 저지층(EBL)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, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), TAPC(4,4' -Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 또는 mCP 등을 포함할 수 있다. 또한, 전술한 바와 같이, 전자 저지층(EBL)은 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 포함할 수 있다.

[0157] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å일 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.

[0158] 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 아닙니다.

[0159] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 베퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 베퍼층은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 베퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

[0160] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)은 예를 들어 약 100Å 내지 약 1000Å 또는, 약 100Å 내지 약 300Å의 두께를 갖는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0161] 발광층(EML)은 전술한 바와 같이 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 포함할 수 있다.

[0162] 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함할 수 있다. 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물 이외 공지의 재료를 더 포함하는 것일 수 있다. 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 물질을 더 포함할 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0163] 발광층(EML)은 호스트 및 도편트를 포함할 수 있다. 호스트는 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 포함할 수 있고, 도편트는 인광 도편트일 수 있다. 즉, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 인광 호스트 재료로 사용할 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 열 활성 지연 형광용 재료로 사용할 수도 있다.

[0164] 발광층(EML)은 예를 들어, 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 적색 광 또는 녹색 광을 발광하는 층일 수도 있다.

[0165] 호스트는 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물 외에 당 기술분야에 알려진 일반적인 호스트 재료를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, Alq<sub>3</sub>(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(n-vinylcabazole), 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-carbazolyl)-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> (Octaphenylcyclotetrasiloxane), PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 더 포함할 수 있다.

[0166] 도편트는 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 이리듐(Ir), 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 로듐(Rh) 및 틲븀(Tm) 중 적어도 하나를 포함하는 금속 캐체를 포함할 수 있다. 예를 들어, FIRpic(Bis[2-(4,6-difluorophenyl)pyridinato-C2,N](picolinato)iridium(III)))를 포함할 수 있다. 도편트는 형광 도편트일 수도 있다. 형광 도편트는 예를 들어, 아릴아민 화합물, 또는 스티릴아민 화합물 등을 포함하는 것일 수 있다.

[0167] 전자 수송 영역(ETR)은 발광층(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 정공 저지층(HBL), 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0168] 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.

[0169] 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, 발광층(EML)으로부터 차례로 적층된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층(HBL)/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이

에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

[0170] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스판 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0171] 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, DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-ylphenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,08)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq<sub>2</sub>(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0172] 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 acetylacetone) 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.

[0173] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층(HBL)을 포함할 수 있다. 정공 저지층(HBL)은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), 또는 DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide) 등을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0174] 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)가 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.

[0175] 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.

[0176] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)이 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소 시킬 수 있다.

[0177] 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.

[0178] 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 전

극 또는 반투과형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 반사형 전극일 수 있다.

[0179] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하며, 이로 인해 고효율화 효과가 있다.

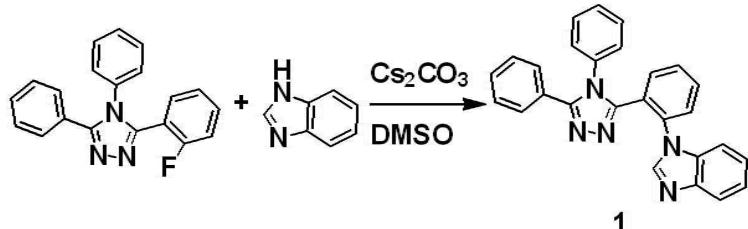
[0180] 이하, 구체적인 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돋기 위한 예시에 불과하며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0181] (합성 예)

[0182] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

### 1. 화합물 1의 합성

[0184] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물인 화합물 1은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



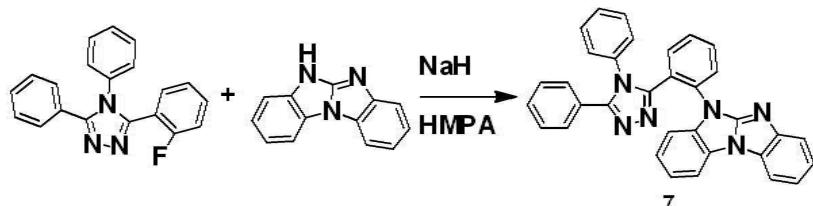
[0185]

[0186] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200mL의 삼구 플라스크에 3-(2-Fluorophenyl)-4,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole 4.62 g (14.6 mmol)과 Benzimidazole 1.73 g (14.6 mmol),  $\text{Cs}_2\text{CO}_3$  9.54 g (29.3 mmol), DMSO 44 mL를 더하여 160 °C에서 2시간 교반했다. 공랭 후, 물을 더하여 생성한 백색 침전을 여과하여 취했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 1을 5.36g(수율 89%) 얻었다.

[0187] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 1의 분자량은 413이었다. 또한  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ) 측정으로 측정된 화합물 1의 Chemical Shift ( $\delta$ ) 값은 8.04 (1H), 7.70–7.60 (3H), 7.48 (1H), 7.38 (1H), 7.29 (1H), 7.23–7.16 (5H), 7.06 (1H), 6.97 (1H), 6.82–6.73 (3H), 6.19 (2H)이었다.

### 2. 화합물 7의 합성

[0190] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물인 화합물 7은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



[0191]

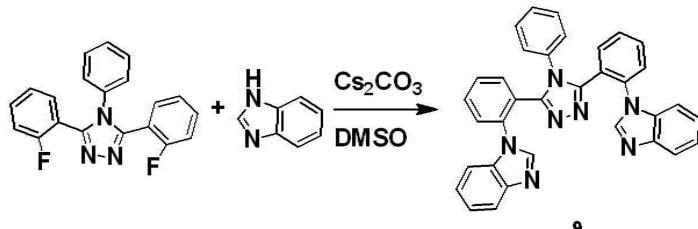
[0192] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200mL의 삼구 플라스크에 3-(2-Fluorophenyl)-4,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole 3.64 g (11.5 mmol)과 5H-Benzimidazolo[1,2-a]benzimidazole 2.38 g (11.5 mmol), NaH 0.703 g (29.3 mmol), HMPA 58 mL를 더하여 200 °C에서 12시간 교반했다. 공랭 후, 물을 더하여 생성한 백색 침전을 여과하여 취했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 7을 2.83g(수율 49%) 얻었다.

[0193] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 7의 분자량은 502이었다. 또한,  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ) 측정으로 측정된 화합물 7의 Chemical Shift ( $\delta$ )은 8.58–8.54 (3H), 8.28 (2H), 7.82–7.75 (2H), 7.68–7.46 (9H), 7.38 (2H), 7.30–7.19 (4H)이었다.

### 3. 화합물 9의 합성

[0196]

본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물인 화합물 9는 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



[0197]

[0198]

아르곤(Ar) 분위기 하, 200mL 삼구 플라스크에, 3,5-bis(2-fluorophenyl)-4-phenyl-4H-1,2,4-triazole 3.34 g (10.0 mmol) 과, Benzimidazole 2.36 g (20.0 mmol),  $\text{Cs}_2\text{CO}_3$  13.03 g (40.0 mmol), DMSO 60 mL를 더하여 160 °C에서 2시간 교반 했다. 공랭 후, 물을 더하여 생성한 백색침전을 여과하여 취했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 9를 4.29g(수율 81%) 얻었다.

[0199]

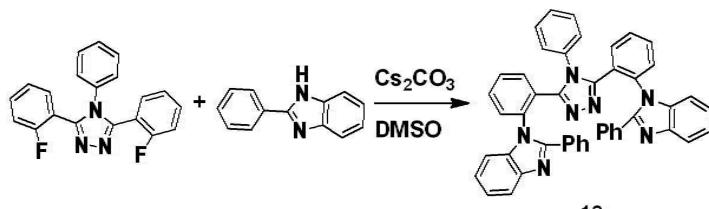
FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 9의 분자량은 529이었다. 또한,  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ) 측정으로 측정된 화합물 9의 Chemical Shift ( $\delta$ ) 값은 8.56 (2H), 8.08 (2H), 7.82-7.75 (4H), 7.68-7.19 (15H) 이었다.

[0201]

#### 4. 화합물 12의 합성

[0202]

본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물인 화합물 12는 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



[0203]

[0204]

아르곤(Ar) 분위기 하, 200mL의 삼구 플라스크에 3,5-bis(2-fluorophenyl)-4-phenyl-4H-1,2,4-triazole 3.34 g (10.0 mmol)과 2-Phenylbenzimidazole 3.88 g (20.0 mmol),  $\text{Cs}_2\text{CO}_3$  13.03 g (40.0 mmol), DMSO 60 mL를 더하여 160 °C에서 2시간 교반했다. 공랭 후, 물을 더하여 생성한 백색 침전을 여과하여 취했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 12를 6.27 g(수율 92%) 얻었다.

[0205]

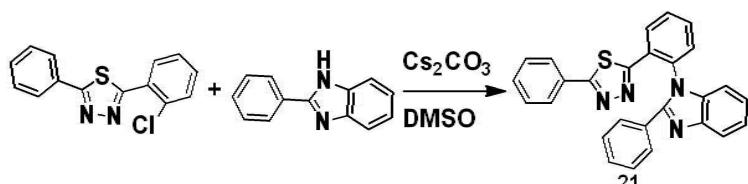
FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 12의 분자량은 681이었다. 또한,  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ) 측정으로 측정된 화합물 12의 Chemical Shift ( $\delta$ ) 값은 8.56 (2H), 8.28 (4H), 7.83-7.75 (6H), 7.68-7.46 (15H), 7.38 (2H), 7.28 (2H)이었다.

[0207]

#### 5. 화합물 21의 합성

[0208]

본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물인 화합물 21은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



[0209]

[0210]

아르곤(Ar) 분위기 하, 200mL 삼구 플라스크에 3-(2-Chlorophenyl)-4,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole 3.11 g (11.4 mmol) 과, 2-Phenylbenzimidazole 2.21 g (11.4 mmol),  $\text{Cs}_2\text{CO}_3$  7.43 g (22.8 mmol), DMSO 23 mL를 더하여 180 °C에서 12시간 교반했다. 공랭 후, 물을 더하여 생성한 백색 침전을 여과하여 취했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 21을 3.53g(수율 72%) 얻었다.

[0211]

FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 21의 분자량은 430이었다. 또한,  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ) 측정으로 측정된 화합물 21의 Chemical Shift ( $\delta$ ) 값은 8.56 (1H), 8.28 (2H), 8.03 (2H), 7.83-7.75 (3H), 7.66 (1H), 7.55-7.48 (8H),

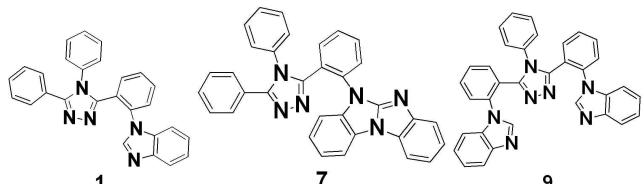
7.28 (1H)이었다.

[0212] 전술한 합성예는 일 예시이며, 반응 조건은 필요에 따라 변경될 수 있다. 또한, 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 당 기술분야에 알려져 있는 방법 및 재료를 이용하여 다양한 치환기를 가지도록 합성될 수 있다. 화학식 1로 표시되는 코어 구조에 다양한 치환체를 도입함으로써 유기 전계 발광 소자에 사용되기에 적합한 특성을 가질 수 있다.

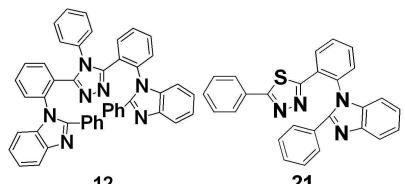
[0214] (소자 작성 예)

[0215] 상술한 화합물 1, 7, 9, 12 및 21을 발광층 호스트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 5의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0216] [실시예 화합물]



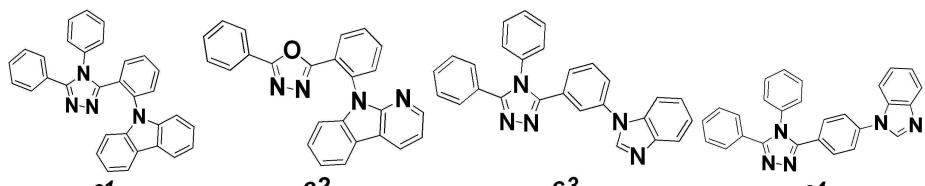
[0217]



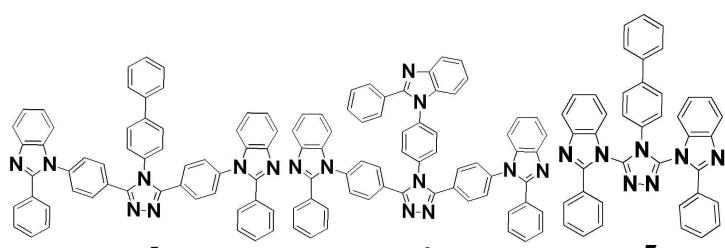
[0218]

[0219] 하기 비교예 화합물 c1 내지 c7을 발광층 호스트 재료로 사용하여 비교예 1 내지 7의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0220] [비교예 화합물]



[0221]



[0222]

[0224] 실시예 1 내지 5 및 비교예 1 내지 7의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm의 제1 전극을 형성하고, HAT-CN으로 10nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, NPB로 40nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, mCP로 10nm 두께의 전자 저지층을 형성하고, 실시예 화합물 또는 비교예 화합물에 Flrpic를 8% 도핑한 20nm 두께의 발광층을 형성하고, DPEPO로 10nm 두께의 정공 저지층을 형성하고, TPBi로 30nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 2nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al로 120nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 모두 진공 증착법으로 형성하였다.

표 1

[0225]	발광층 호스트 재료	최대 발광 효율
실시예 1	실시예 화합물 1	130%
실시예 2	실시예 화합물 7	120%
실시예 3	실시예 화합물 9	130%
실시예 4	실시예 화합물 12	110%
실시예 5	실시예 화합물 21	110%
비교예 1	비교예 화합물 c1	100%
비교예 2	비교예 화합물 c2	105%
비교예 3	비교예 화합물 c3	80%
비교예 4	비교예 화합물 c4	70%
비교예 5	비교예 화합물 c5	50%
비교예 6	비교예 화합물 c6	80%
비교예 7	비교예 화합물 c7	60%

[0226] 최대 발광 효율은 비교예 1을 기준으로 %로 표시하였다. 또한, 반감수명은 초기 휘도  $100\text{cd}/\text{m}^2$ 부터의 휘도 반감수명을 비교예 1을 기준으로 %로 나타내고 있다.

[0227] 상기 표 1을 참조하면, 실시예 1 내지 5는 비교예 1 내지 7과 비교할 때 고효율화되었다. 비교예 1 및 2의 경우, 트리아졸 또는 옥사디아졸에 치환하고 있는 페닐기의 오르쏘 위치에 카바졸 또는 카볼린이 치환되어 있어 최저 삼중향 에너지 준위가 낮아지기 때문에 발광 효율이 저하된다. 또한, 비교예 3 내지 6의 경우, 벤조이미다졸의 치환위치가 메타 또는 파라 위치이기 때문에 분자의 뒤틀림이 작아 최저 삼중향 에너지 준위가 낮아지며 발광 효율이 저하된다. 한편, 비교예 5 및 7의 경우, 분자 내에 바이페닐기가 포함되어 있어 최저 삼중향 에너지 준위가 낮아지며 결과적으로 발광 효율이 저하된다.

[0228] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 발광층에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 개선시킬 수 있다.

[0229] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 발광층에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 수명을 향상시킬 수 있다.

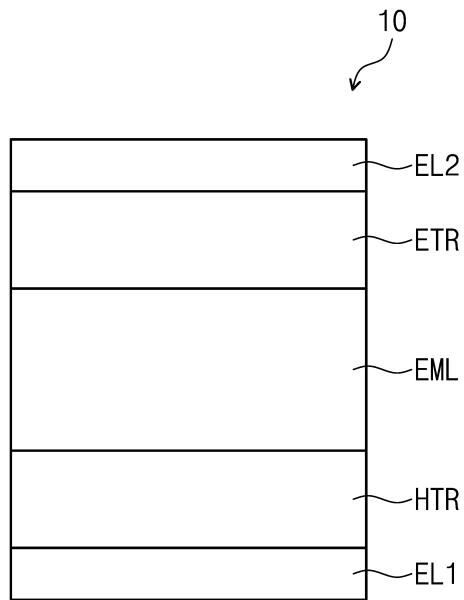
[0230] 이상, 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

### 부호의 설명

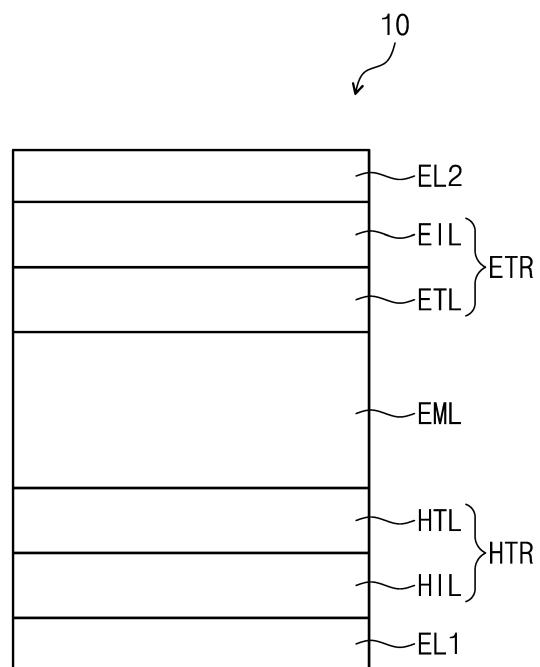
[0231]	10: 유기 전계 발광 소자	EL1: 제1 전극
	HTR: 정공 수송 영역	HIL: 정공 주입층
	HTL: 정공 수송층	EML: 발광층
	ETR: 전자 수송 영역	ETL: 전자 수송층
	EIL: 전자 주입층	EL2: 제2 전극

도면

도면1



도면2



도면3

