



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년06월08일

(11) 등록번호 10-2405134

(24) 등록일자 2022년05월30일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 487/04 (2006.01) C07D 487/14 (2006.01)

C07D 491/147 (2006.01) C07F 7/08 (2006.01)

H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07D 487/04 (2013.01)

C07D 487/14 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-0144162

(22) 출원일자 2017년10월31일

심사청구일자 2020년09월04일

(65) 공개번호 10-2019-0049984

(43) 공개일자 2019년05월10일

(56) 선행기술조사문헌

US20160285009 A1

US20150287931 A1

(73) 특허권자

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

미야자키, 유키

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초  
2-7 주식회사 삼성 요코하마 연구소내

(74) 대리인

특허법인 고려

전체 청구항 수 : 총 20 항

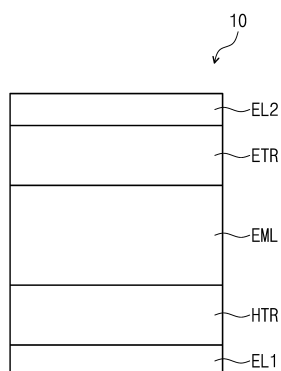
심사관 : 김영국

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

## (57) 요약

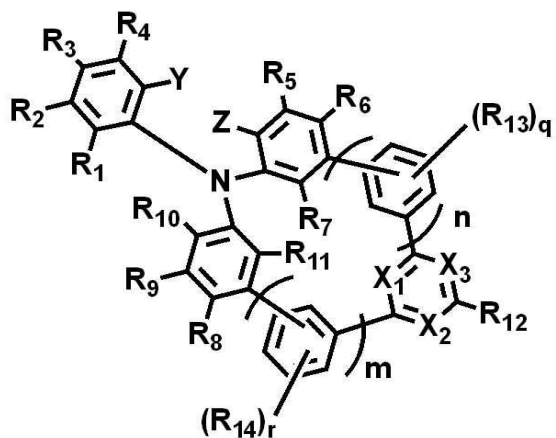
발광 효율을 향상시키는 합질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 본 발명에 따른 합질  
(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



소 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[화학식 1]



(52) CPC특허분류

*C07D 491/147* (2013.01)

*C07F 7/0816* (2013.01)

*H01L 51/0071* (2013.01)

*H01L 51/0073* (2013.01)

*H01L 51/0074* (2013.01)

*H01L 51/5016* (2013.01)

*H01L 51/5024* (2013.01)

*H01L 51/5048* (2013.01)

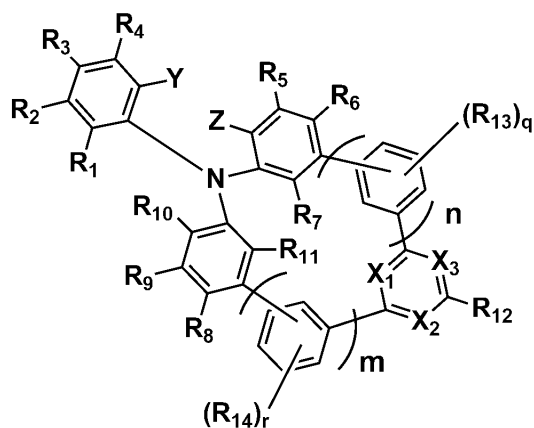
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

$X_1$ ,  $X_2$ , 및  $X_3$  중 적어도 2개는 N이고, 나머지는 CR<sub>15</sub> 이고,

Y 및 Z는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, OR<sub>16</sub>, SR<sub>17</sub>, CR<sub>18</sub>R<sub>19</sub>R<sub>20</sub>, 또는 SiR<sub>21</sub>R<sub>22</sub>R<sub>23</sub>이거나, 또는 서로 결합하여 고리를 형성하고,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, OR<sub>24</sub>, SR<sub>25</sub>, (C=O)R<sub>26</sub>, NR<sub>27</sub>R<sub>28</sub>, CR<sub>29</sub>R<sub>30</sub>R<sub>31</sub>, SiR<sub>32</sub>R<sub>33</sub>R<sub>34</sub>, 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,

R<sub>15</sub> 내지 R<sub>34</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,

n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2 이고,

q 및 r은 각각 독립적으로, 0 이상 4 이하의 정수이다.

#### 청구항 2

제 1항에 있어서,

상기  $X_1$ 은 N이고,  $X_2$  및  $X_3$  중 적어도 하나는 N인 함질소 화합물.

#### 청구항 3

제 1항에 있어서,

상기 n 및 m은 1인 함질소 화합물.

#### 청구항 4

제 1항에 있어서,

상기 m은 1이고, 상기 n은 1 또는 2인 함질소 화합물.

#### 청구항 5

제 1항에 있어서,

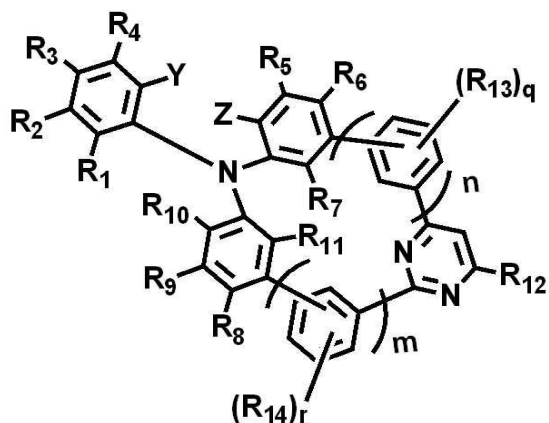
상기 R<sub>12</sub>는 치환 또는 비치환된 페닐기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기인 함질소 화합물.

#### 청구항 6

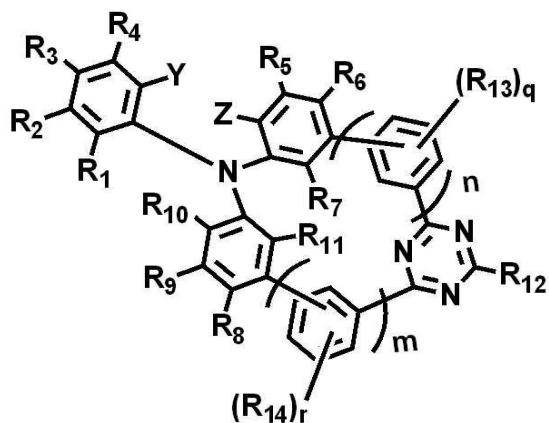
제 1항에 있어서,

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

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



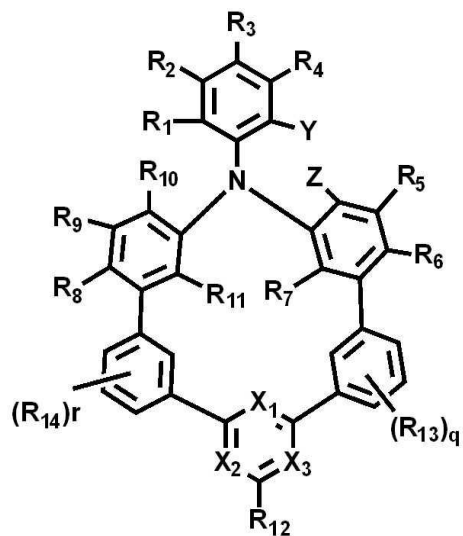
상기 화학식 1-1 및 화학식 1-2에서, Y, Z, n, m, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>34</sub>, q, 및 r은 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

#### 청구항 7

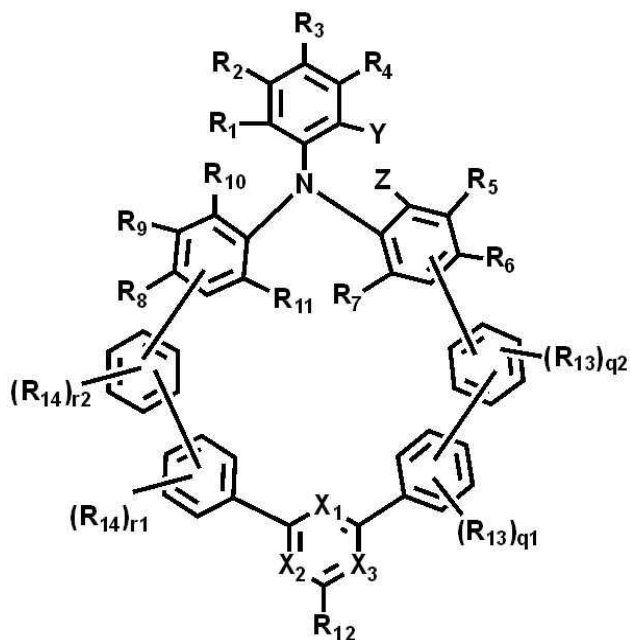
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-3 또는 화학식 1-4로 표시되는 함질소 화합물:

[화학식 1-3]



[화학식 1-4]



상기 화학식 1-4에서,  $q_1$ ,  $q_2$ ,  $r_1$ , 및  $r_2$ 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

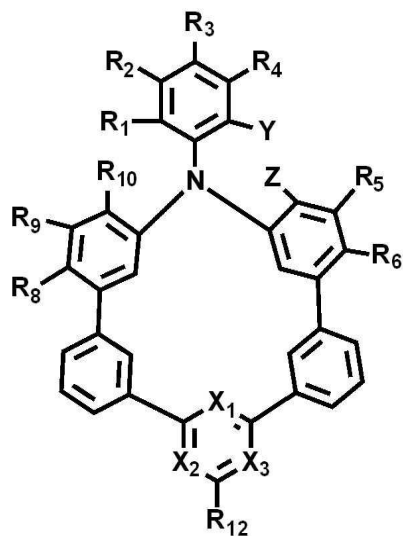
상기 화학식 1-3 및 화학식 1-4에서,  $X_1$  내지  $X_3$ ,  $Y$ ,  $Z$ ,  $R_1$  내지  $R_{11}$ ,  $q$ , 및  $r$ 은 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

#### 청구항 8

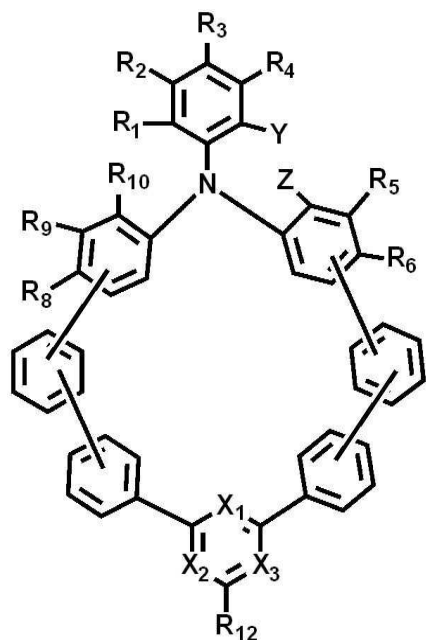
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-5 또는 화학식 1-6으로 표시되는 함질소 화합물:

[화학식 1-5]



[화학식 1-6]



상기 화학식 1-5 및 화학식 1-6에서,  $X_1$  내지  $X_3$ , Y, Z,  $R_1$  내지  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$ ,  $R_{10}$ , 및  $R_{12}$ 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

#### 청구항 9

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물은 최저 여기 일중항 에너지 레벨(S1)과 최저 여기 삼중항 에너지 레벨(T1)의 차이가 0.2eV 이하인 합질소 화합물.

#### 청구항 10

제 1항에 있어서,

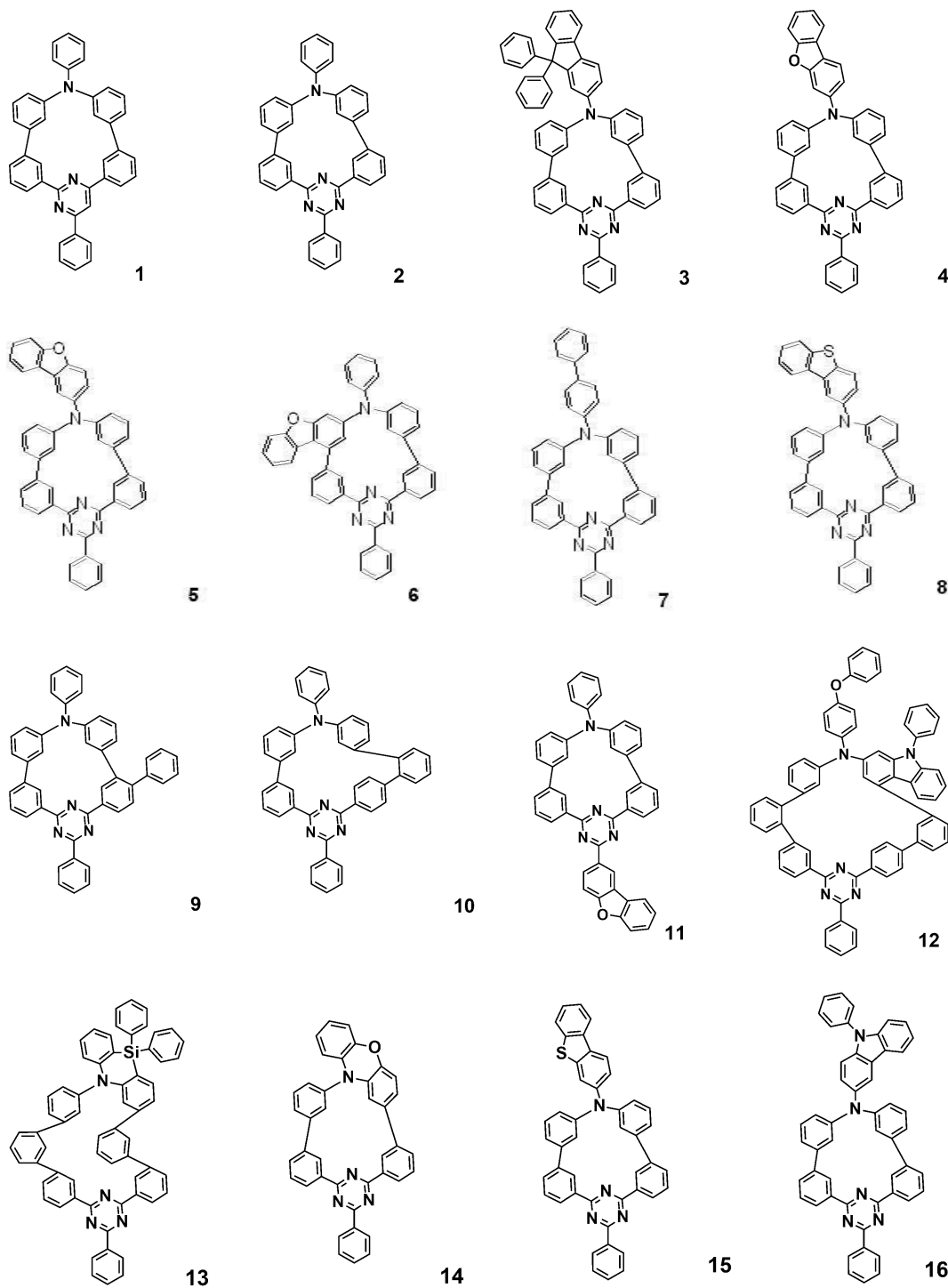
상기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물은 열활성 지연 형광 발광 재료인 합질소 화합물.

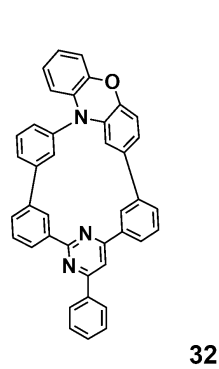
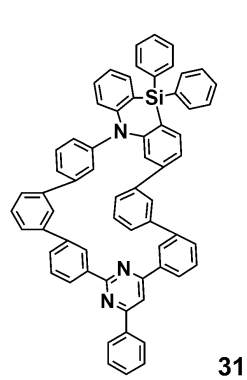
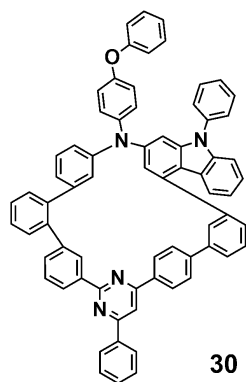
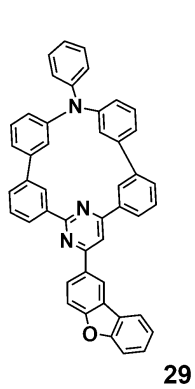
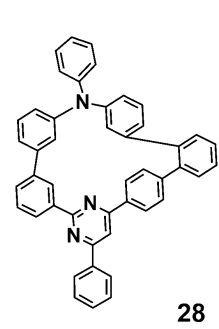
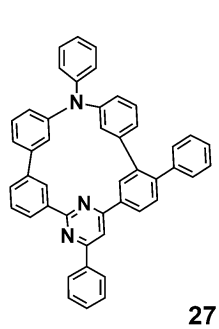
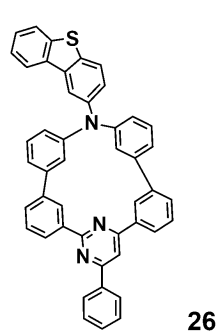
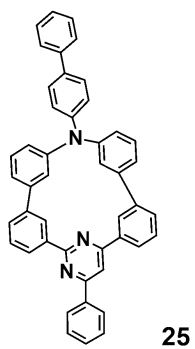
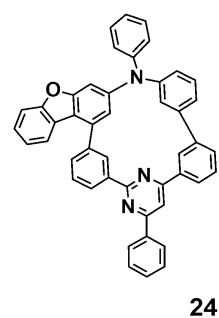
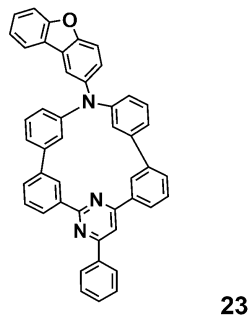
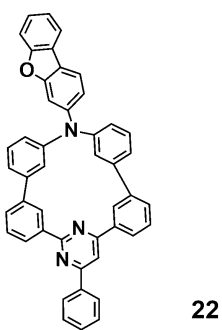
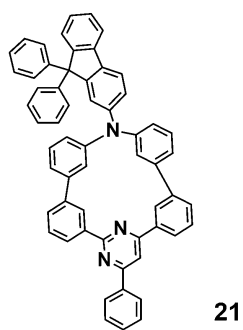
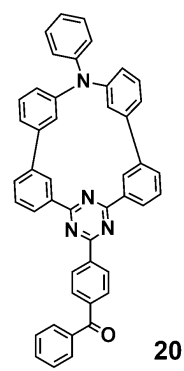
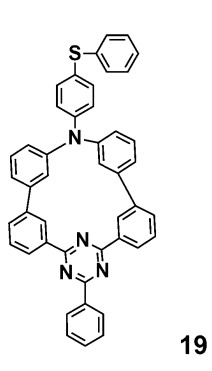
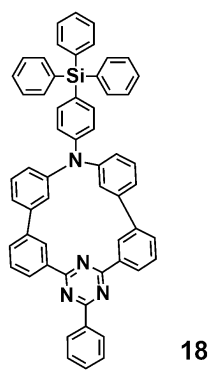
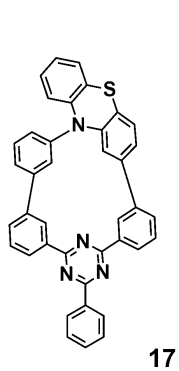
#### 청구항 11

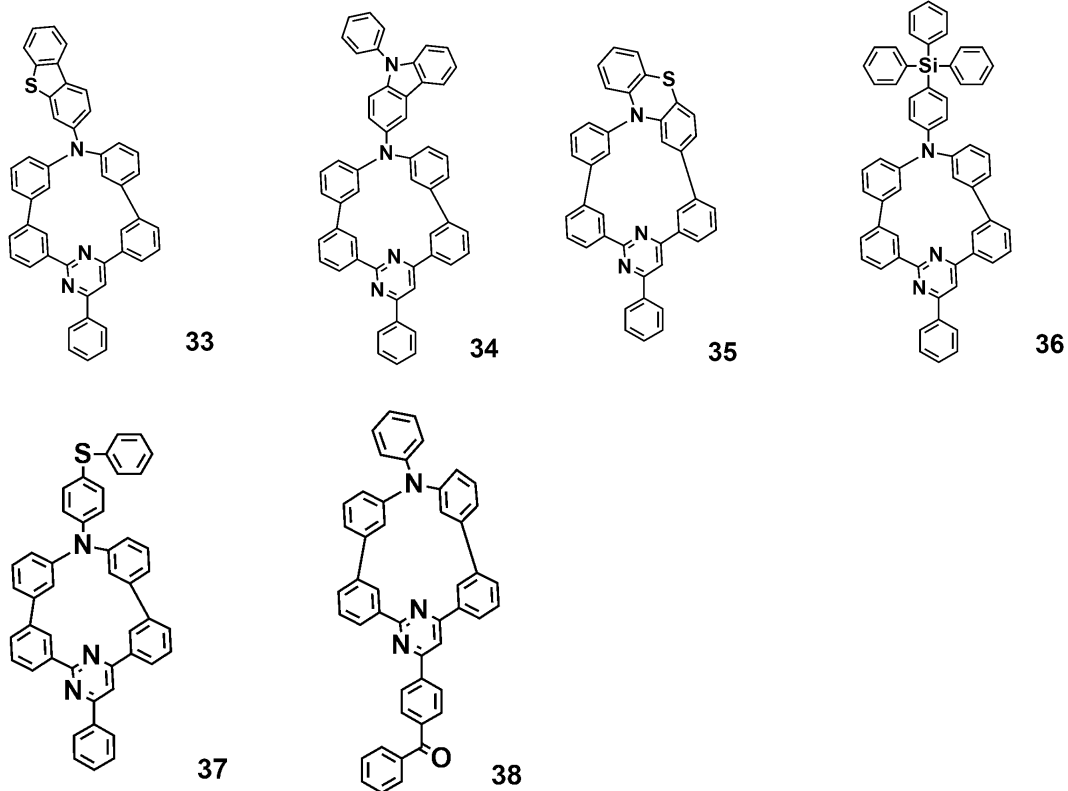
제 1항에 있어서,

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

[화합물군 1]







## 청구항 12

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역;

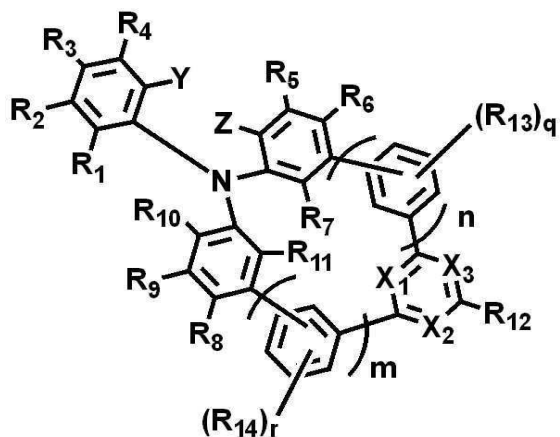
상기 정공 수송 영역 상에 배치되고 하기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물을 포함하는 발광층;

상기 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극; 을 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 포함하는 유기 전계 발광 소자;

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>, 및 X<sub>3</sub> 중 적어도 2개는 N이고, 나머지는 CR<sub>15</sub> 이고,

Y 및 Z는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{16}$ ,  $SR_{17}$ ,  $CR_{18}R_{19}R_{20}$ , 또는  $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ 이거나, 또는 서로 결합하여 고리를 형성하고,

$R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{24}$ ,  $SR_{25}$ ,  $(C=O)R_{26}$ ,  $NR_{27}R_{28}$ ,  $CR_{29}R_{30}R_{31}$ ,  $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ , 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,

$R_{15}$  내지  $R_{34}$ 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,

n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2 이고,

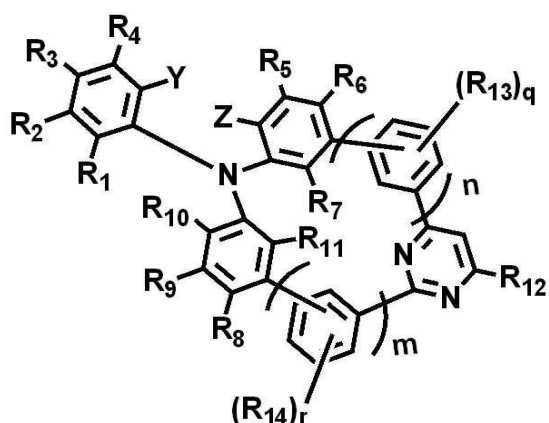
q 및 r은 각각 독립적으로, 0 이상 4 이하의 정수이다.

### 청구항 13

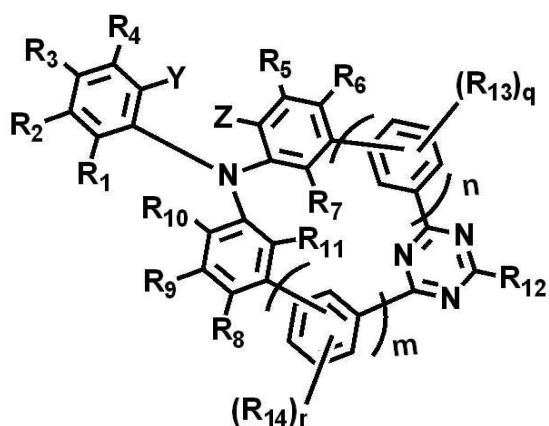
제 12항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 하기 화학식 1-1 또는 화학식 1-2로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



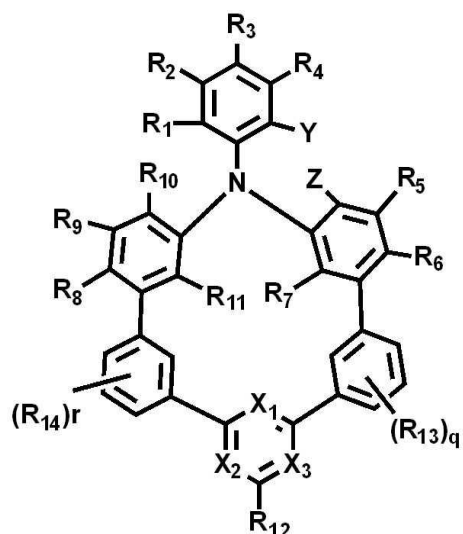
상기 화학식 1-1 및 화학식 1-2에서, Y, Z, n, m,  $R_1$  내지  $R_{34}$ , q, 및 r은 청구항 12에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 14

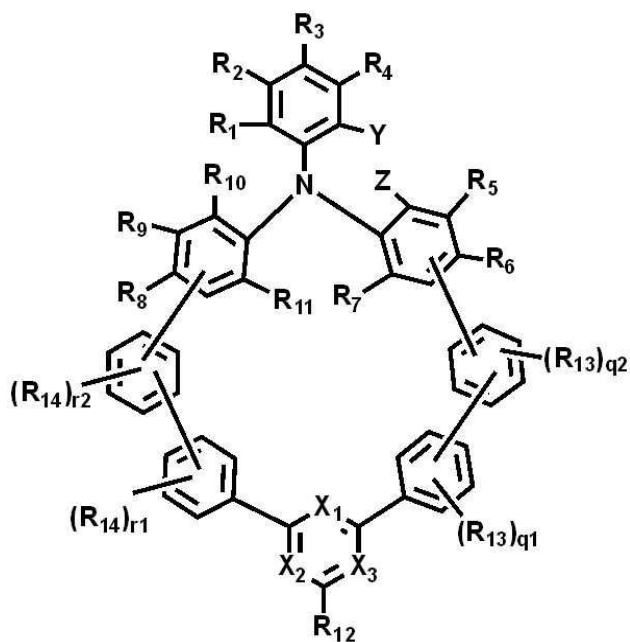
제 12항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-3 또는 화학식 1-4로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1-3]



[화학식 1-4]



상기 화학식 1-4에서, q1, q2, r1, 및 r2는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

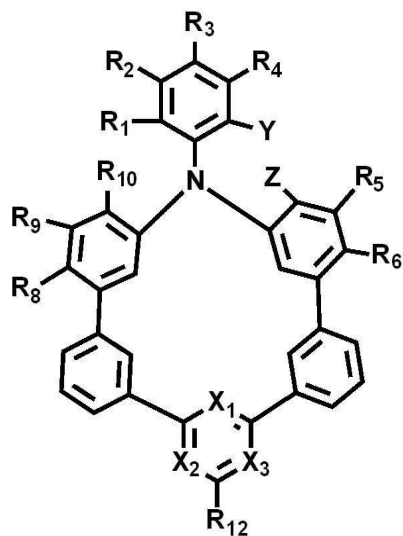
상기 화학식 1-3 및 화학식 1-4에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Y, Z, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>34</sub>, q, 및 r은 청구항 12에서 정의한 바와 동일하다.

#### 청구항 15

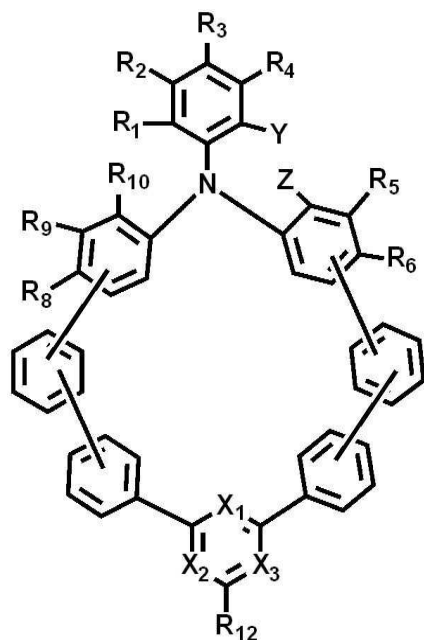
제 12항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-5 또는 화학식 1-6으로 표시되는 유기전 계 발광 소자:

[화학식 1-5]



[화학식 1-6]



상기 화학식 1-5 및 화학식 1-6에서,  $X_1$  내지  $X_3$ , Y, Z,  $R_1$  내지  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$ ,  $R_{10}$ , 및  $R_{12}$ 는 청구항 12에서 정의한 바와 동일하다.

#### 청구항 16

제 12에 있어서,

상기 발광층은 지연 형광을 방출하는 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 17

제 12항에 있어서,

상기 발광층은 청색광을 방출하는 열활성 지연 형광 발광층인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 18

제 12항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고,

상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물인 유기 전계 발광 소자.

### 청구항 19

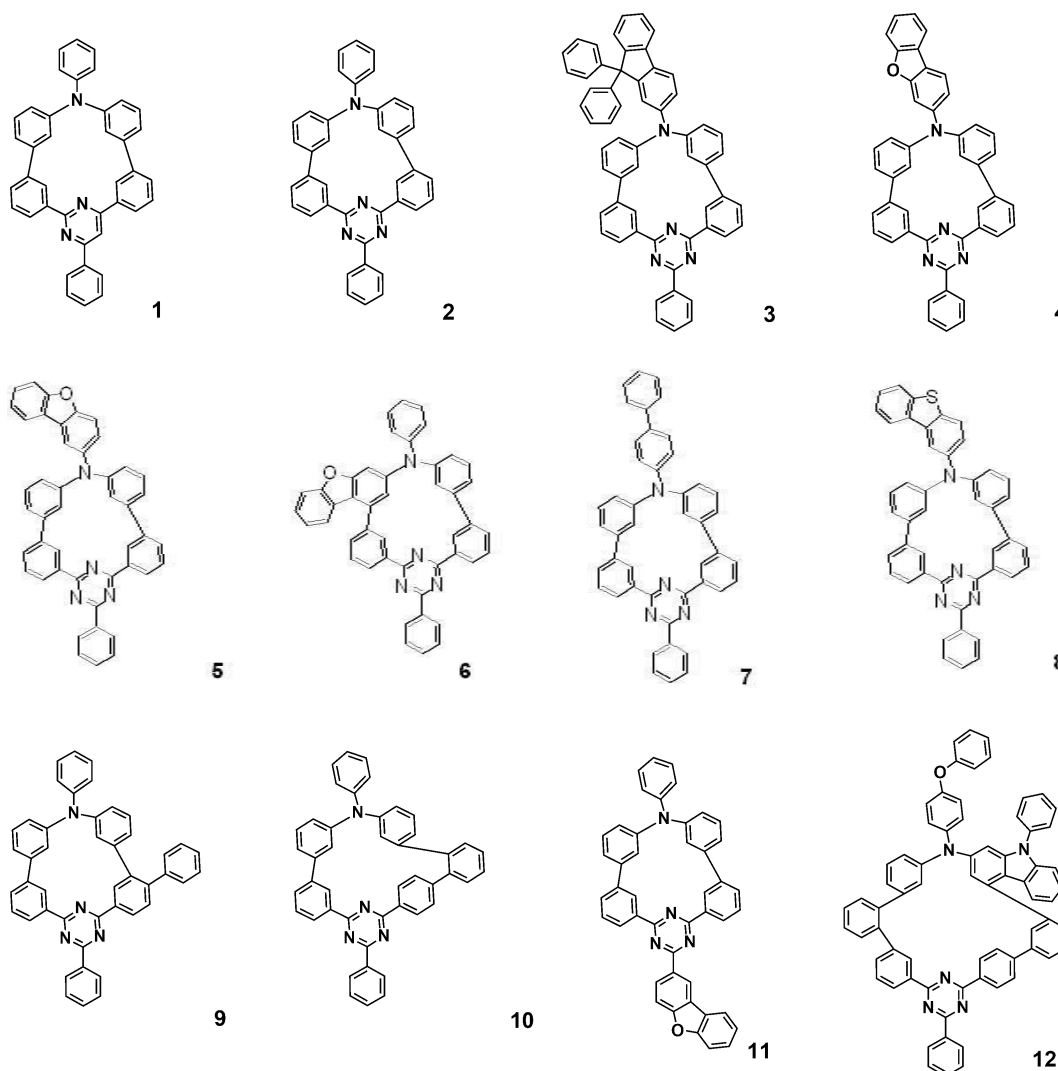
제 18항에 있어서,

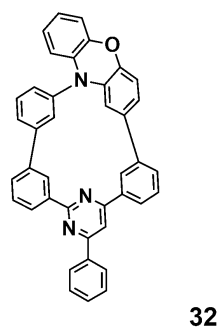
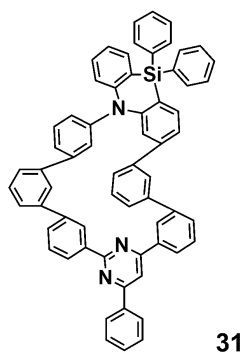
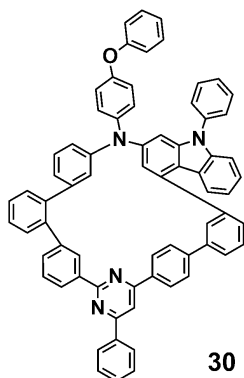
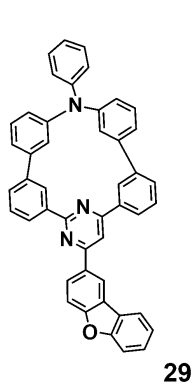
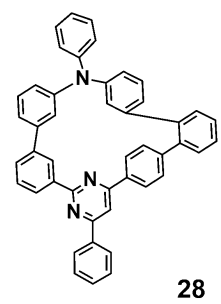
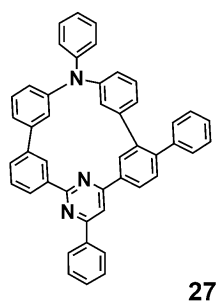
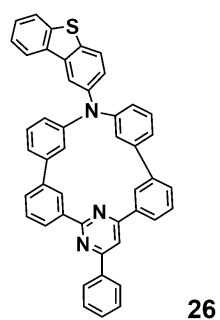
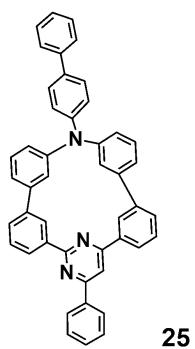
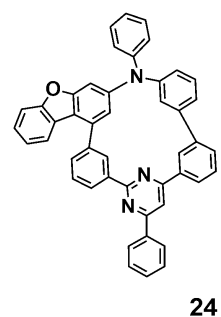
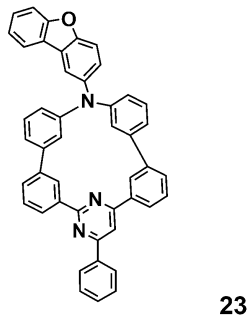
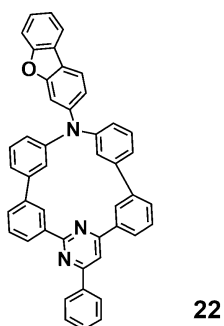
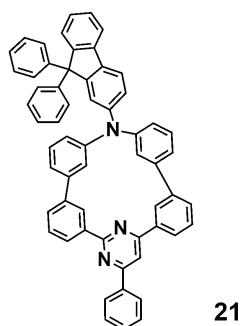
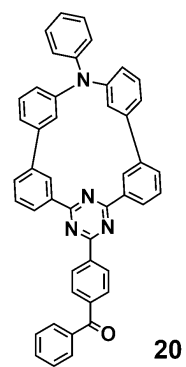
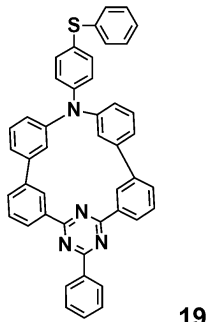
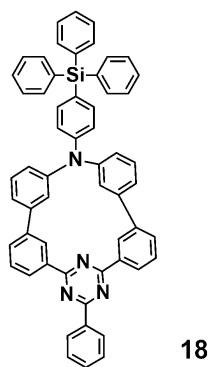
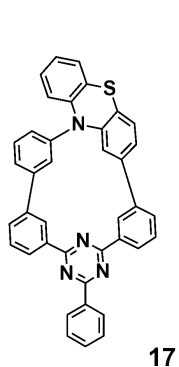
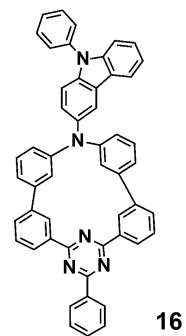
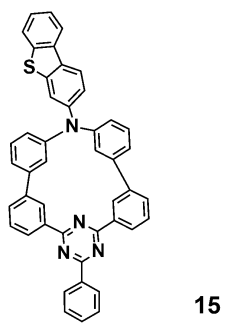
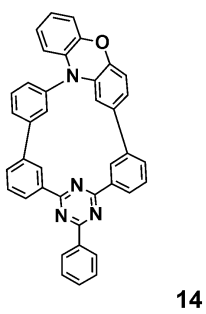
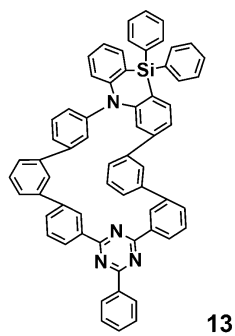
상기 호스트는 DPEPO(Bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide), CBP(4,4'-Bis(carbazol-9-yl)biphenyl), mCP(1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzene), PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzo[b,d]furan), TcTa(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), mCBP(3,3'-Di(9H-carbazol-9-yl)-1,1'-biphenyl), 및 T2T(2,4,6-tris(biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine) 중 적어도 하나를 포함하는 유기 전계 발광 소자.

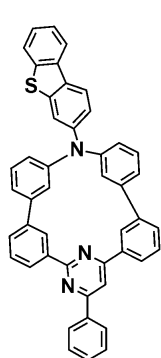
### 청구항 20

제 12항에 있어서, 상기 발광층은 하기 화합물군 1에 표시된 함질소 화합물들 중 적어도 하나를 포함하는 유기 전계 발광 소자:

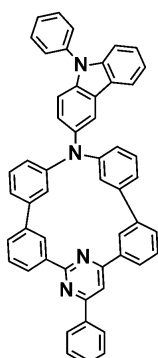
[화합물군 1]



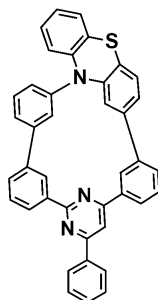




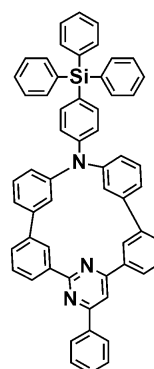
33



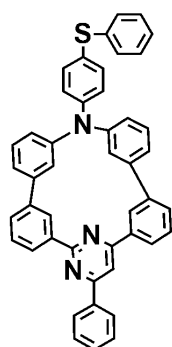
34



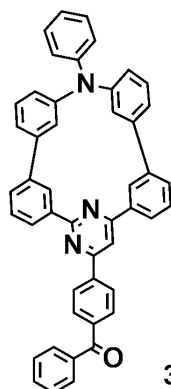
35



36



37



38

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 합질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 대한 것이며, 보다 상세하게는 지연 형광 발광 재료로 사용되는 합질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 대한 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 다르게, 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.

[0004] 특히, 최근에는 고효율 유기 전계 발광 소자를 구현하기 위해 삼중항 상태의 에너지를 이용하는 인광 발광이나, 삼중항 여기자의 충돌에 의해 일중항 여기자가 생성되는 현상(Triplet-triplet annihilation, TTA)를 이용한 지연 형광 발광에 대한 기술이 개발되고 있으며, 지연 형광 현상을 이용한 열 활성화 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 재료에 대한 개발이 진행되고 있다.

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

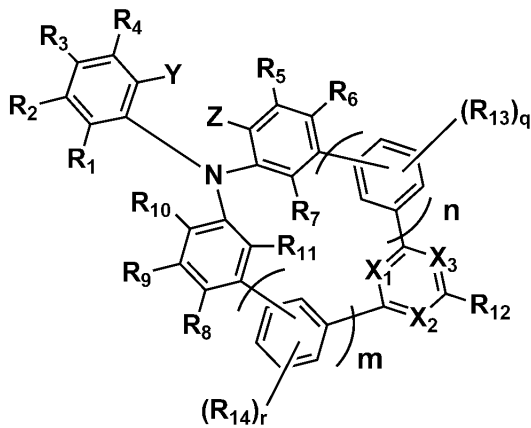
[0005] 본 발명의 목적은 발광 효율을 개선할 수 있는 유기 전계 발광 소자용 발광재료인 합질소 화합물을 제공하는 것이다.

[0006] 본 발명의 다른 목적은 합질소 화합물을 포함하여 발광 효율을 개선한 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0007] 일 실시예는 하기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 제공한다.

[0008] [화학식 1]



[0009]

[0010] 상기 화학식 1에서,  $X_1$ ,  $X_2$ , 및  $X_3$  중 적어도 2개는 N이고, 나머지는 CR<sub>15</sub> 이고, Y 및 Z는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, OR<sub>16</sub>, SR<sub>17</sub>, CR<sub>18</sub>R<sub>19</sub>R<sub>20</sub>, 또는 SiR<sub>21</sub>R<sub>22</sub>R<sub>23</sub>이거나, 또는 서로 결합하여 고리를 형성하고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, OR<sub>24</sub>, SR<sub>25</sub>, (C=O)R<sub>26</sub>, NR<sub>27</sub>R<sub>28</sub>, CR<sub>29</sub>R<sub>30</sub>R<sub>31</sub>, SiR<sub>32</sub>R<sub>33</sub>R<sub>34</sub>, 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, R<sub>15</sub> 내지 R<sub>34</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, n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2 이고, q 및 r은 각각 독립적으로, 0 이상 4 이하의 정수이다.

[0011] 상기  $X_1$ 은 N이고,  $X_2$  및  $X_3$  중 적어도 하나는 N일 수 있다.

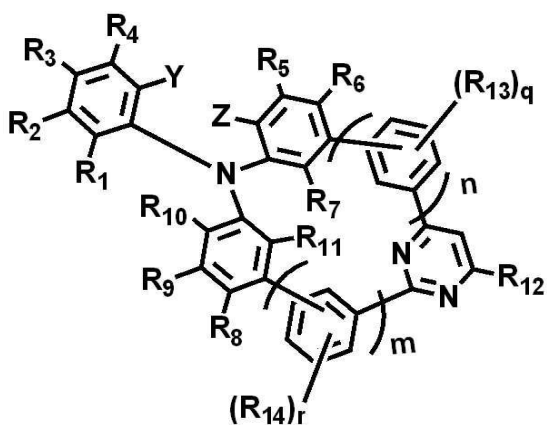
[0012] 상기 n 및 m은 1일 수 있다.

[0013] 상기 m은 1이고, 상기 n은 1 또는 2일 수 있다.

[0014] 상기 R<sub>12</sub>는 치환 또는 비치환된 페닐기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기일 수 있다.

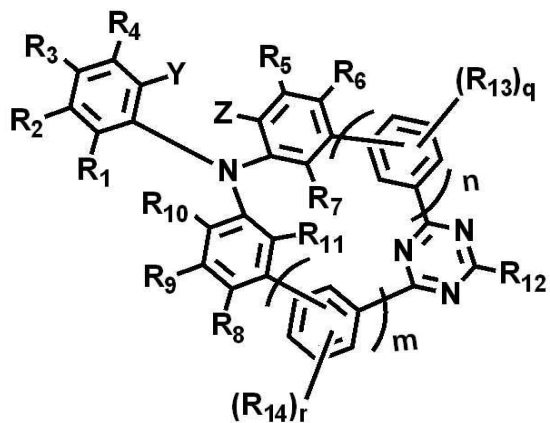
[0015] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 화학식 1-2로 표시되는 함질소 화합물일 수 있다.

[0016] [화학식 1-1]



[0017]

[0018] [화학식 1-2]

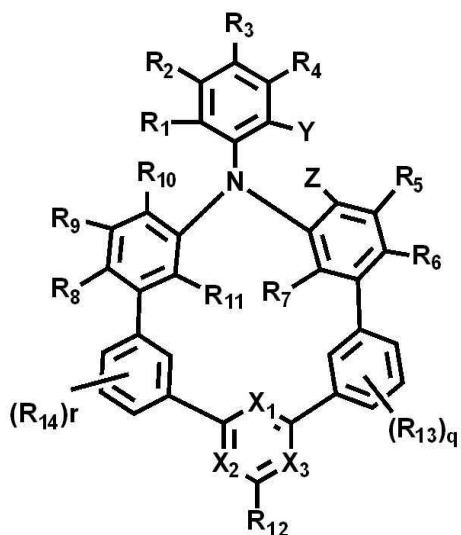


[0019]

[0020] 상기 화학식 1-1 및 화학식 1-2에서, Y, Z, n, m, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>34</sub>, q, 및 r은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

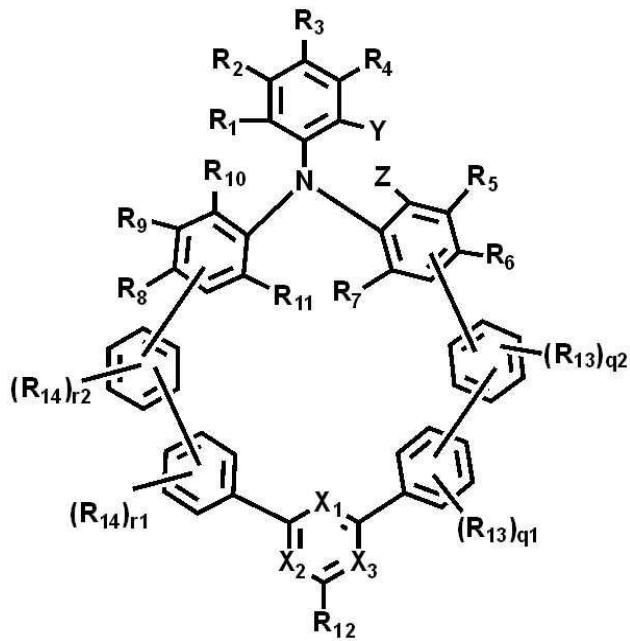
[0021] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-3 또는 화학식 1-4로 표시되는 함질소 화합물일 수 있다.

[0022] [화학식 1-3]



[0023]

[0024] [화학식 1-4]

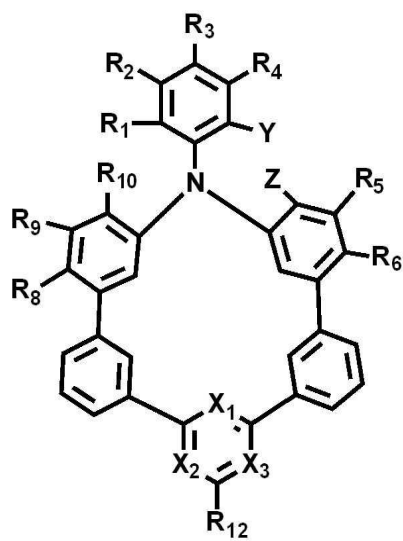


[0025]

[0026] 상기 화학식 1-4에서, q1, q2, r1, 및 r2는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, 상기 화학식 1-3 및 화학식 1-4에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Y, Z, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>34</sub>, q, 및 r은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

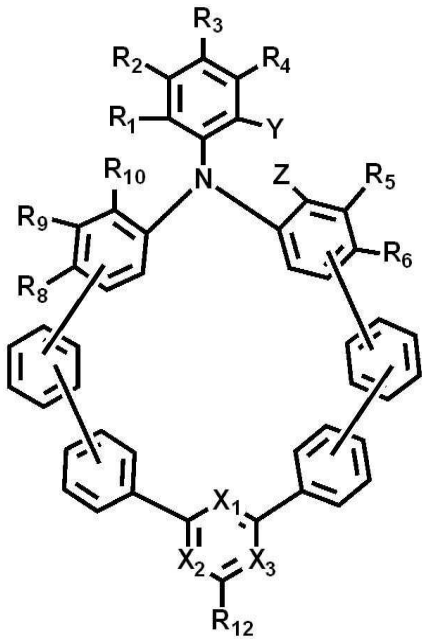
[0027] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-5 또는 화학식 1-6으로 표시되는 함질소 화합물일 수 있다.

[0028] [화학식 1-5]



[0029]

[0030] [화학식 1-6]



[0031]

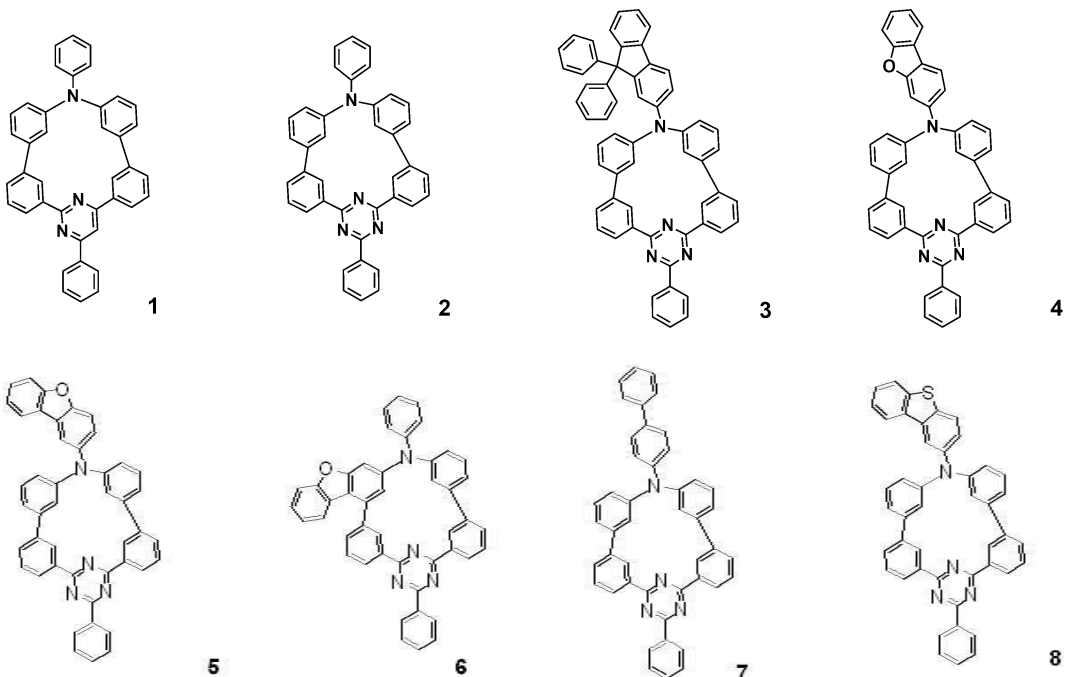
[0032] 상기 화학식 1-5 및 화학식 1-6에서,  $X_1$  내지  $X_3$ , Y, Z,  $R_1$  내지  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$ ,  $R_{10}$ , 및  $R_{12}$ 는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0033] 상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 최저 여기 일중항 에너지 레벨(S1)과 최저 여기 삼중항 에너지 레벨(T1)의 차이가 0.2eV 이하일 수 있다.

[0034] 상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 열활성 지연 형광 발광 재료일 수 있다.

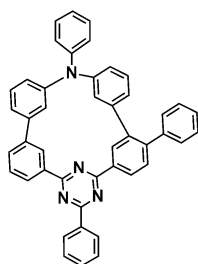
[0035] 상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나일 수 있다.

[0036] [화합물군 1]

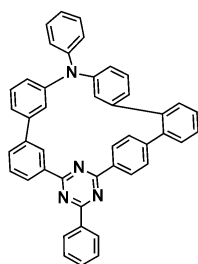


[0037]

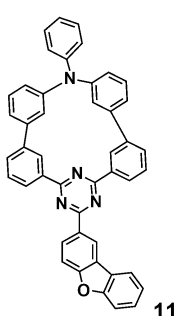
[0038]



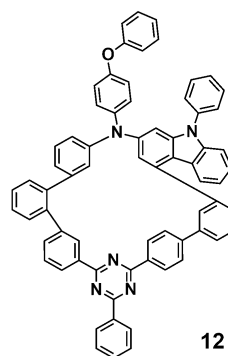
9



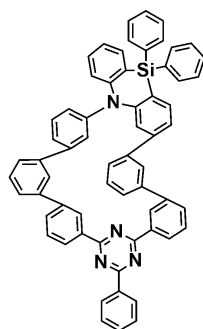
10



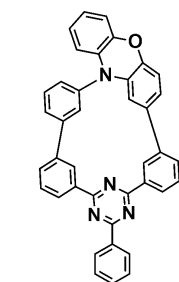
11



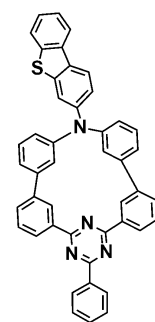
12



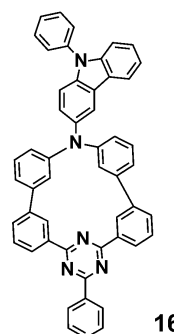
13



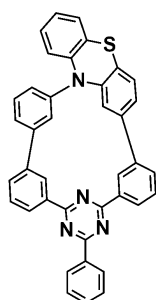
14



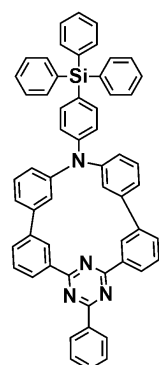
15



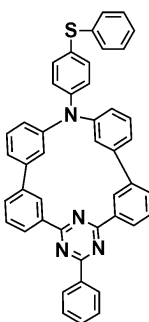
16



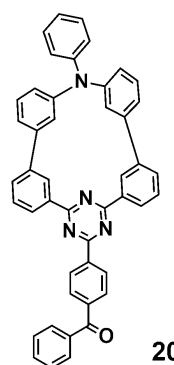
17



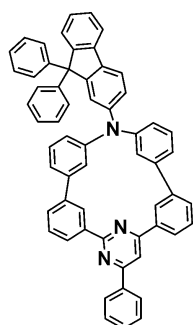
18



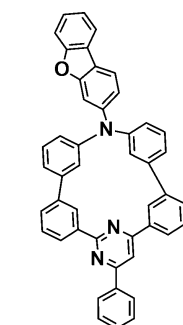
19



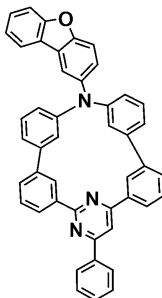
20



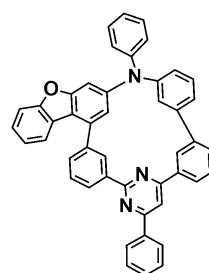
21



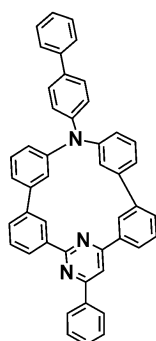
22



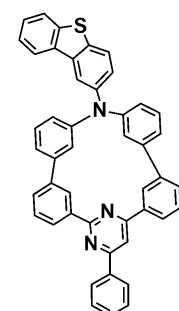
23



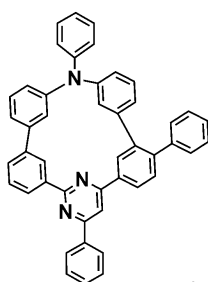
24



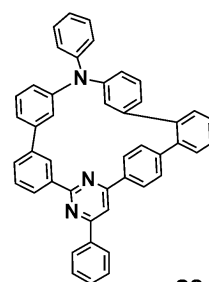
25



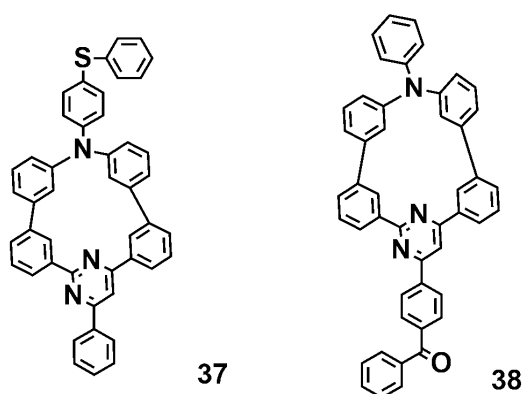
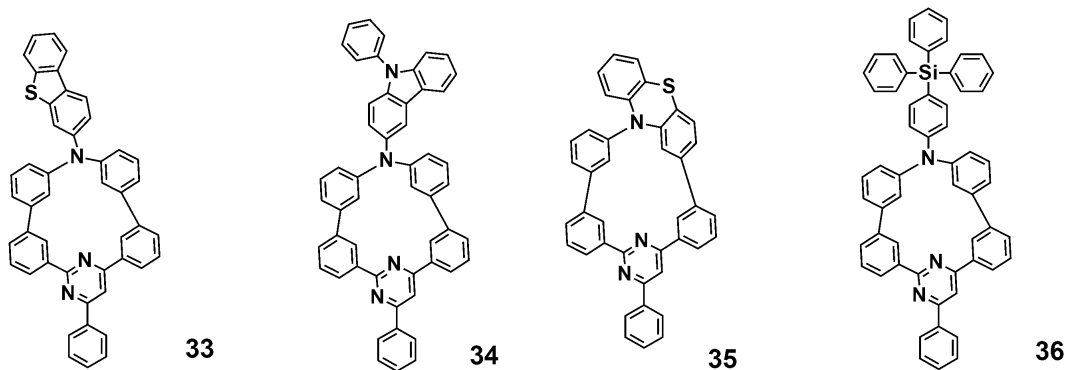
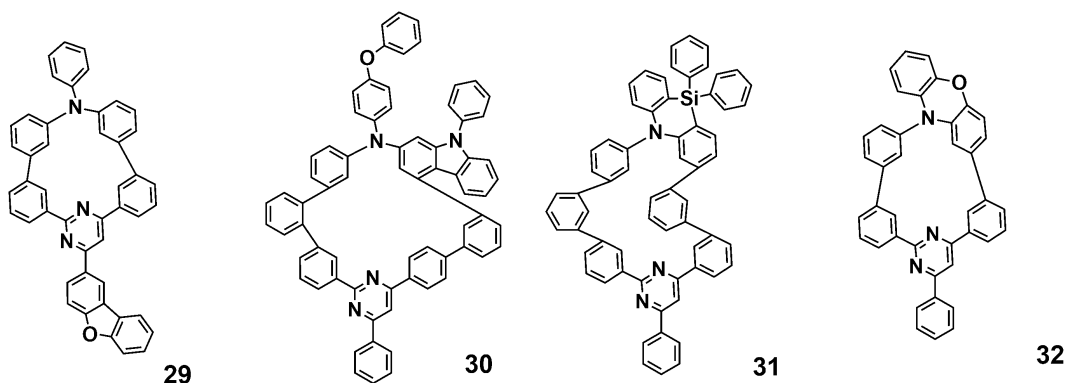
26



27



28



다른 실시예는 제1 전극; 상기 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역; 상기 정공 수송 영역 상에 배치되고 상술한 일 실시예의 합질소 화합물을 포함하는 발광층; 상기 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역; 및 상기 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극; 을 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 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

상기 발광층은 지연 형광을 방출하는 것일 수 있다.

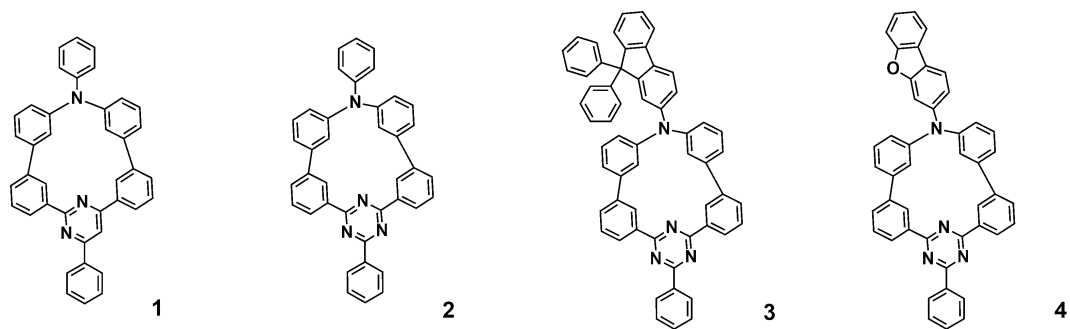
상기 발광층은 청색광을 방출하는 열활성 지연 형광 발광층일 수 있다.

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물일 수 있다.

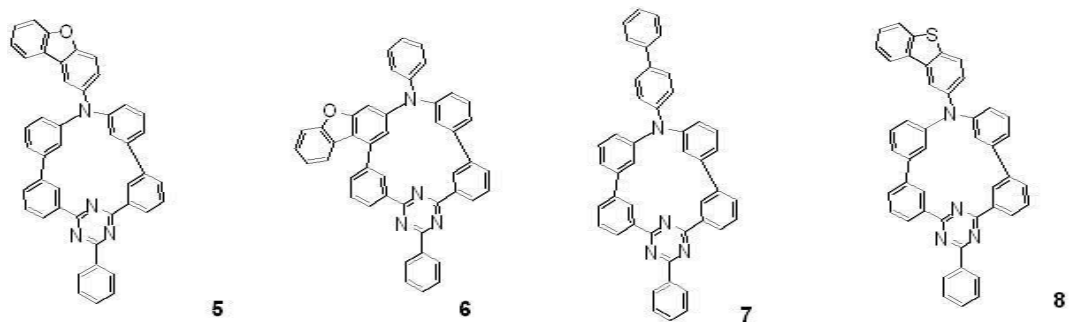
상기 호스트는 DPEPO(Bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide), CBP(4,4'-Bis(carbazol-9-yl)biphenyl), mCP(1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzene), PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzo[b,d]furan), TcTa(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), mCBP(3,3'-Di(9H-carbazol-9-yl)-1,1'-biphenyl), 및 T2T(2,4,6-tris(biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine) 중 적어도 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0052] 상기 발광층은 하기 화합물군 1에 표시된 합질소 화합물들 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

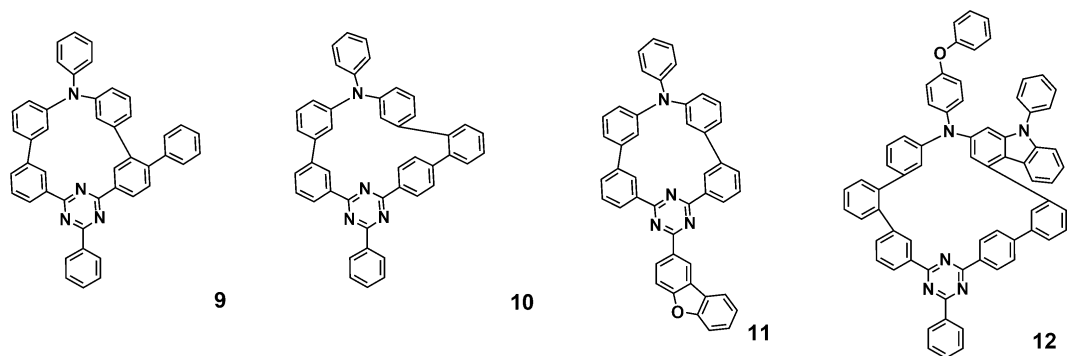
[화합물군 1]



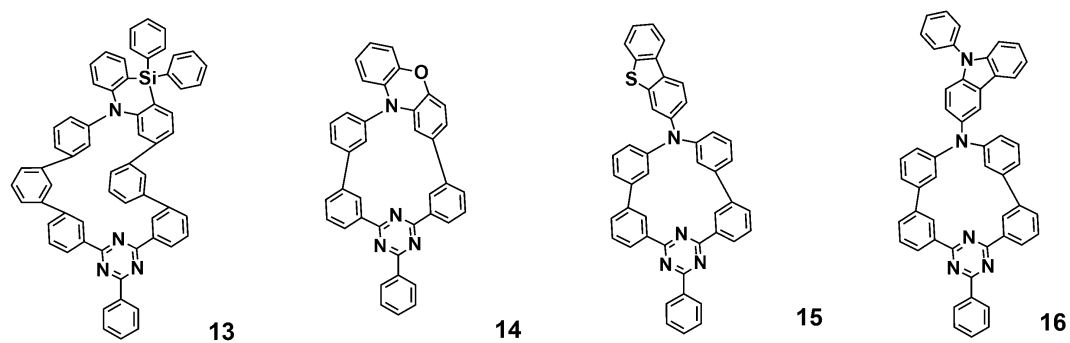
[0054]



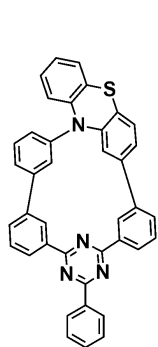
[0055]



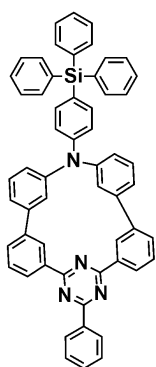
[0056]



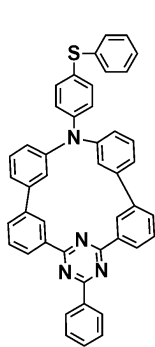
[0057]



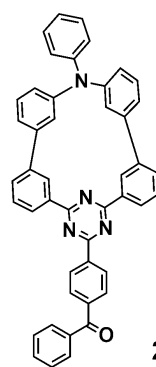
17



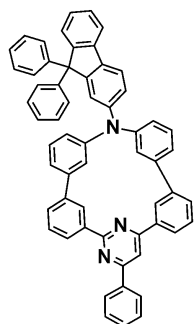
18



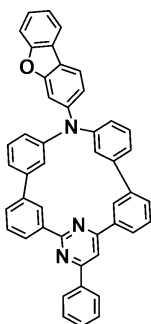
19



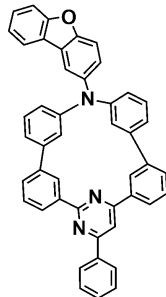
20



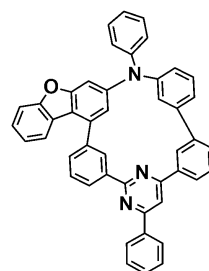
21



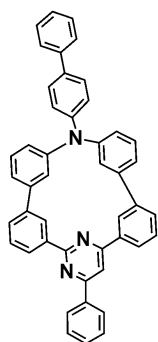
22



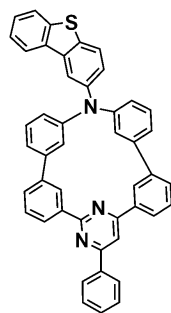
23



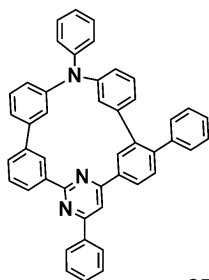
24



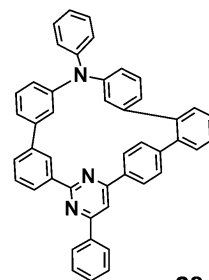
25



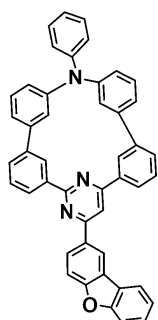
26



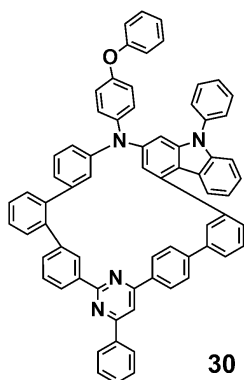
27



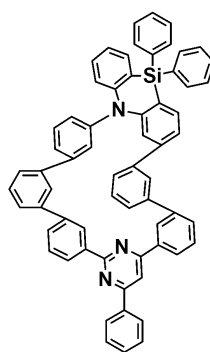
28



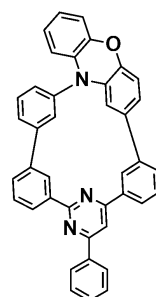
29



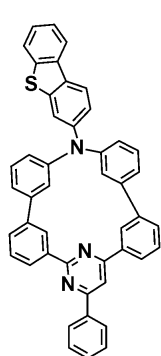
30



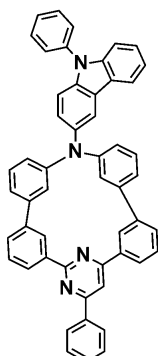
31



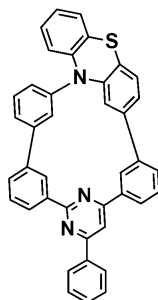
32



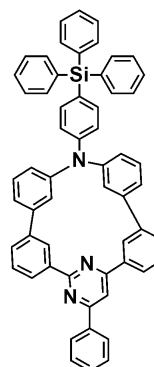
33



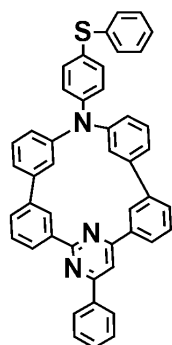
34



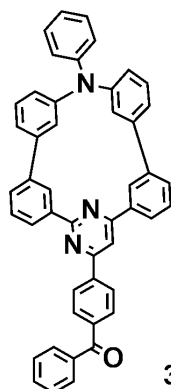
35



36



37



38

### 발명의 효과

일 실시예의 합질소 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 개선할 수 있다.

일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 발광층에 일 실시예의 합질소 화합물을 포함하여 고효율을 구현할 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

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

본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

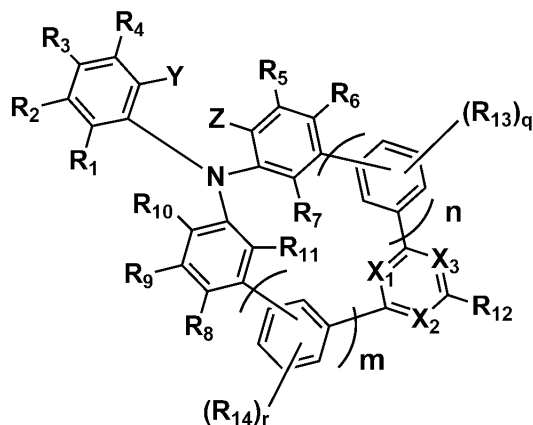
각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로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

본 출원에서, "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.

본 명세서에서, \* 는 연결되는 위치를 의미한다.

- [0071] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로젠 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.
- [0072] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0073] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 50 이하, 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-트리카코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0074] 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, 쿼터페닐기, 쿼크페닐기, 섹시페닐기, 트리페닐에닐기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0075] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수도 있다.
- [0076] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 이종 원소로 O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 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, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴놀살린기, 폐녹사진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라지노 피라진기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨란기, 페난트롤린기, 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 페노티아진기, 디벤조실롤기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0077] 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.
- [0078] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0079] 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. 이하에서는 일 실시예에 따른 함질소 화합물에 대하여 설명한다.
- [0080] 일 실시예의 함질소 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0081] [화학식 1]



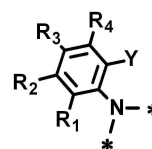
[0082]

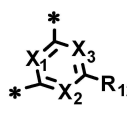
[0083] 화학식 1에서,  $X_1$ ,  $X_2$ , 및  $X_3$  중 적어도 2개는 N이고, 나머지는  $CR_{15}$  이다. Y 및 Z는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{16}$ ,  $SR_{17}$ ,  $CR_{18}R_{19}R_{20}$ , 또는  $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ 이거나, 또는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 화학식 1에서,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{24}$ ,  $SR_{25}$ ,  $(C=O)R_{26}$ ,  $NR_{27}R_{28}$ ,  $CR_{29}R_{30}R_{31}$ ,  $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ , 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 형성할 수 있다. 또한,  $R_{15}$  내지  $R_{34}$ 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 형성할 수 있다.

[0084] 화학식 1에서, n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2 이고, q 및 r은 각각 독립적으로, 0 이상 4 이하의 정수이다.

[0085] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 함질소 화합물은 고리 내에 질소 원자를 포함하는 환상(環狀)의 분자 구조를 갖는 것일 수 있다. 일 실시예의 함질소 화합물은 아릴아민기(aryl amine group) 및 방향족 고리에서 2개 또는 3개의 질소원자를 포함하는 아진기(azine group)를 포함하는 환상 분자 구조를 갖는 화합물일 수 있다. 환상의 일 실시예의 함질소 화합물에서 아릴아민기의 질소원자와 아진기 사이에는 복수 개의 치환 또는 비치환된 아릴렌기가 배치될 수 있다. 치환 또는 비치환된 아릴렌기는 아릴아민기의 질소 원자와 아진을 연결하는 연결기(linker)일 수 있다.

[0086] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 함질소 화합물에서, 아릴아민기에 해당하는 부분은 전자 공여



부(electron donor)이고, 아진기에 해당하는 는 전자 수용부(electron acceptor)일 수 있다. 하지만 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0087] 화학식 1에서 Y 및 Z는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{16}$ ,  $SR_{17}$ ,  $CR_{18}R_{19}R_{20}$ , 또는  $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ 일 수 있다. 예를 들어, Y 및 Z는 수소 원자일 수 있다. 또한,  $R_{16}$  내지  $R_{23}$ 은 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0088] 한편, Y 및 Z가 각각 독립적으로  $CR_{18}R_{19}R_{20}$  또는  $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ 인 경우  $R_{18}$ ,  $R_{19}$ ,  $R_{20}$  중 이웃하는 두 개의 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성하거나, 또는  $R_{21}$ ,  $R_{22}$ ,  $R_{23}$  중 이웃하는 두 개의 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 또한, Y와 Z는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 예를 들어, Y와 Z의 이웃하는 치환기들은

서로 결합하여 헤테로 고리를 형성할 수 있다.

[0089] 화학식 1의  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{24}$ ,  $SR_{25}$ ,  $(C=O)R_{26}$ ,  $NR_{27}R_{28}$ ,  $CR_{29}R_{30}R_{31}$ ,  $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ , 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. 예를 들어,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자,  $OR_{24}$ ,  $SR_{25}$ ,  $(C=O)R_{26}$ ,  $NR_{27}R_{28}$ ,  $CR_{29}R_{30}R_{31}$ ,  $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ , 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0090] 한편,  $R_{24}$  내지  $R_{34}$ 는 서로 이웃하는 치환기들과 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 예를 들어,  $R_{24}$  내지  $R_{34}$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다. 구체적으로  $R_{24}$  내지  $R_{34}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 메틸기, 또는 페닐기일 수 있다.

[0091] 한편, 화학식 1에서  $R_1$  내지  $R_{14}$ 에서 인접하는 치환기들을 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 예를 들어,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 에서 인접하는 치환기들을 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란, 또는 치환 또는 비치환된 카바졸 등을 형성할 수 있다.

[0092] 화학식 1에서  $R_{12}$ 는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 예를 들어,  $R_{12}$ 는 비치환된 페닐기일 수 있다. 또한, 화학식 1에서  $R_{12}$ 는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기일 수 있으며, 예를 들어,  $R_{12}$ 는 비치환된 디벤조퓨란기일 수 있다.

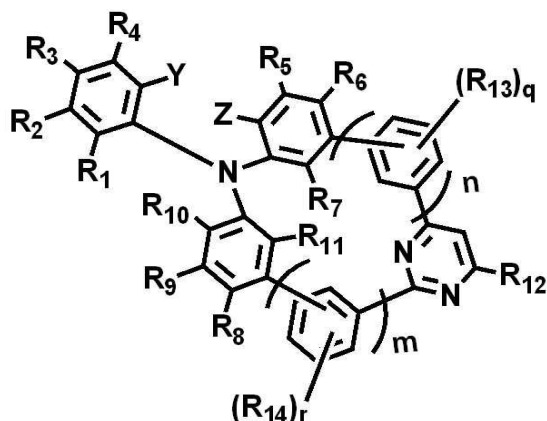
[0093] 한편, 화학식 1에서  $q$  및  $r$ 은 각각 독립적으로, 0 이상 4 이하의 정수일 수 있으며,  $q$  및  $r$ 이 2 이상의 정수인 경우 각각 복수의  $R_{13}$ 과 복수의  $R_{14}$ 는 동일하거나 서로 상이할 수 있다.

[0094] 상기 화학식 1에서  $X_1$  내지  $X_3$  중 적어도 두 개는 N일 수 있다. 예를 들어,  $X_1$ 은 N이고,  $X_2$  및  $X_3$  중 적어도 하나는 N일 수 있다. 구체적으로,  $X_1$  및  $X_2$ 가 N이고  $X_3$ 은  $CR_{15}$ 일 수 있으며,  $X_1$  및  $X_3$ 이 N이고  $X_2$ 가  $CR_{15}$ 일 수 있으며, 또는  $X_1$  내지  $X_3$ 은 모두 N일 수 있다. 즉, 화학식 1에서  $X_1$  내지  $X_3$ 을 포함하는 헤테로 고리는 피리미딘(pyrimidine), 또는 트리아진(triazine)일 수 있다.

[0095] 화학식 1에서  $X_1$  내지  $X_3$  중 두 개가 N이고, 나머지가  $CR_{15}$ 인 경우  $R_{15}$ 는 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{24}$ ,  $SR_{25}$ ,  $CR_{26}R_{27}R_{28}$ ,  $SiR_{29}R_{30}R_{31}$ , 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. 구체적으로  $R_{15}$ 는 수소 원자일 수 있다.

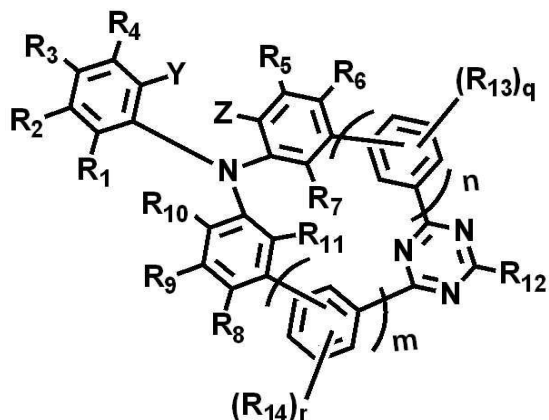
[0096] 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물은 하기 화학식 1-1 또는 화학식 1-2로 표시될 수 있다. 화학식 1-1은  $X_1$  및  $X_2$ 가 N인 경우이고, 화학식 1-2는  $X_1$  내지  $X_3$ 이 모두 N인 경우를 나타낸 것이다.

[0097] [화학식 1-1]



[0098]

[0099] [화학식 1-2]



[0100]

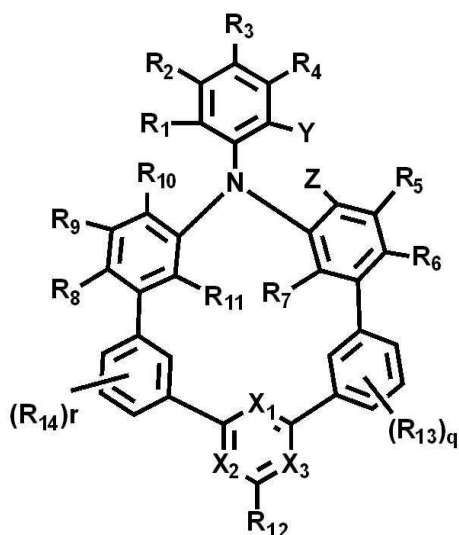
[0101] 화학식 1-1 및 화학식 1-2에서, Y, Z, n, m, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>34</sub>, q, 및 r은 화학식 1에 대한 설명에서 정의한 바와 동일하다.

[0102] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 함질소 화합물에서 n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, n 및 m은 모두 1이거나, 또는 n 및 m 중 어느 하나는 1이고 나머지는 2일 수 있으며, n 및 m이 모두 2일 수 있다.

[0103] 화학식 1에서 n 및 m이 모두 1인 경우 일 실시예의 함질소 화합물은 5개의 고리가 연결된 환상 화합물일 수 있다. 또한, n 및 m 중 어느 하나가 1이고 나머지가 2인 경우 일 실시예의 함질소 화합물은 6개의 고리가 연결된 환상 화합물일 수 있으며, n 및 m이 모두 2인 경우 일 실시예의 함질소 화합물은 7개의 고리를 갖는 환상 화합물일 수 있다.

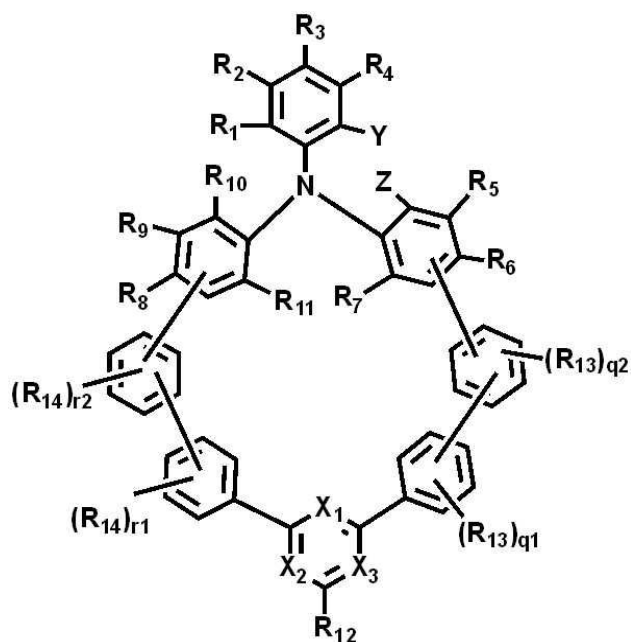
[0104] 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 하기 화학식 1-3 또는 화학식 1-4로 표시될 수 있다. 화학식 1-3은 n 및 m이 모두 1인 경우를 나타낸 것이고, 화학식 1-4는 n 및 m이 모두 2인 경우를 나타낸 것이다.

[0105] [화학식 1-3]



[0106]

[0107] [화학식 1-4]



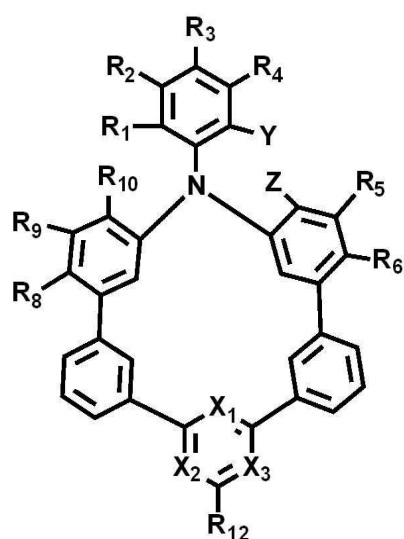
[0108]

[0109] 상기 화학식 1-3 및 화학식 1-4에서, q1, q2, r1, 및 r2는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. 또한, 상기 화학식 1-3 및 화학식 1-4에서 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Y, Z, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>34</sub>, q, 및 r은 화학식 1에 대한 설명에서 정의한 바와 동일하다.

[0110] 한편, 화학식 1-3 및 화학식 1-4에서 q1, q2, r1, 및 r2가 각각 독립적으로 2 이상의 정수인 경우 복수의 R<sub>13</sub> 또는 복수의 R<sub>14</sub>는 서로 동일하거나 또는 서로 상이할 수 있다.

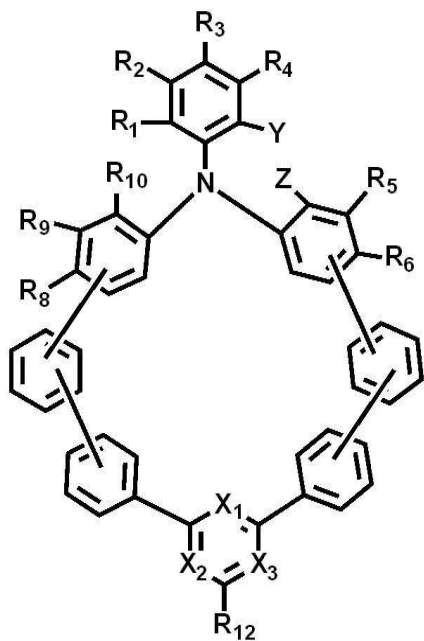
[0111] 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 하기 화학식 1-5 또는 화학식 1-6으로 표시될 수 있다. 화학식 1-5는 n 및 m이 모두 1인 경우를 나타낸 것이고, 화학식 1-6은 n 및 m이 모두 2인 경우를 나타낸 것이다. 또한, 화학식 1-5는 q 및 r이 0인 경우를 나타낸 것이고, 화학식 1-6은 q1, q2, r1, 및 r2가 모두 0인 경우를 나타낸 것이다. 또한, 화학식 1-5 및 화학식 1-6은 R<sub>7</sub>과 R<sub>11</sub>이 모두 수소 원자인 경우를 나타낸 것이다.

[0112] [화학식 1-5]



[0113]

[0114] [화학식 1-6]

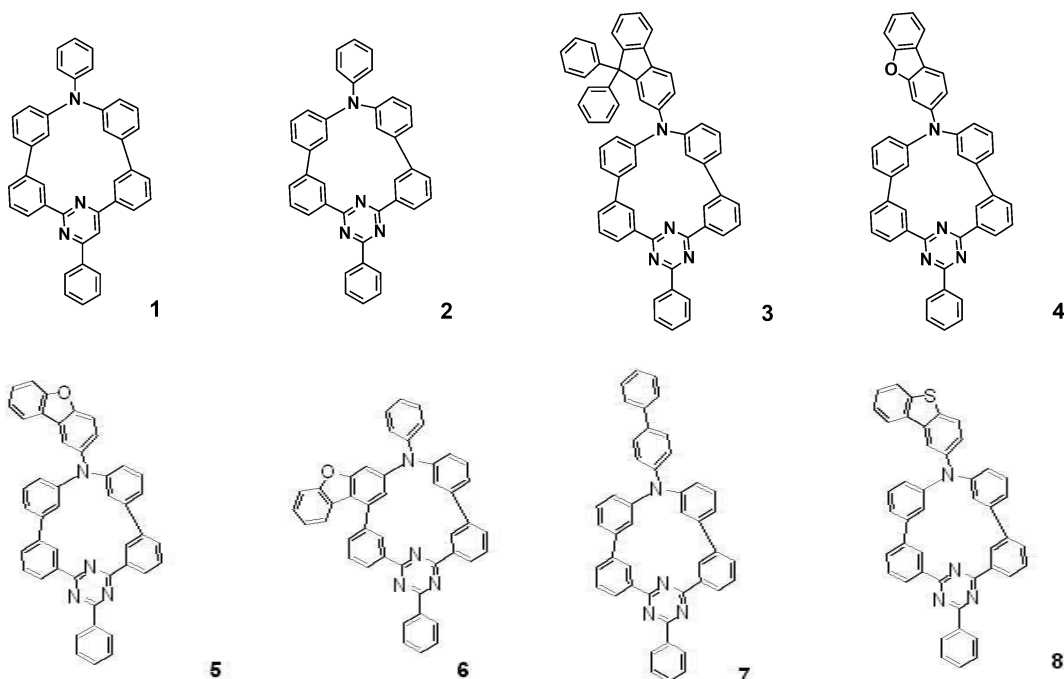


[0115]

[0116] 상기 화학식 1-5 및 화학식 1-6에서,  $X_1$  내지  $X_3$ , Y, Z,  $R_1$  내지  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$ ,  $R_{10}$ , 및  $R_{12}$ 는 화학식 1에 대한 설명에서 정의한 바와 동일하다.

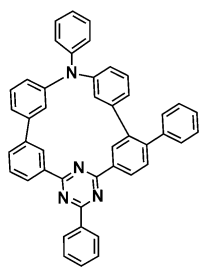
[0117] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 함질소 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0118] [화합물군 1]

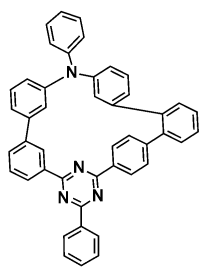


[0119]

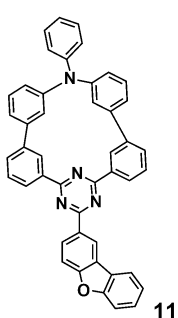
[0120]



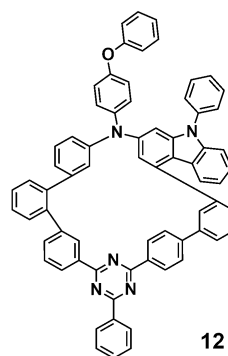
9



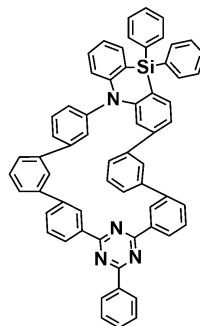
10



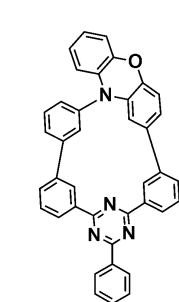
11



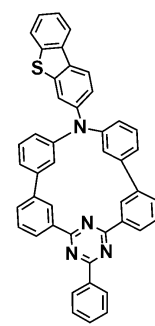
12



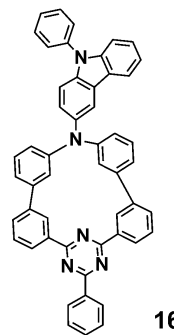
13



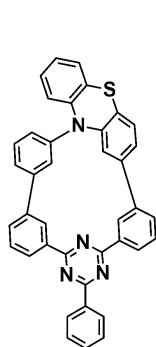
14



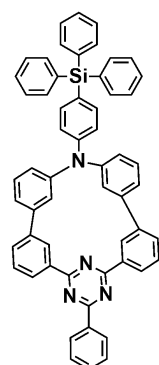
15



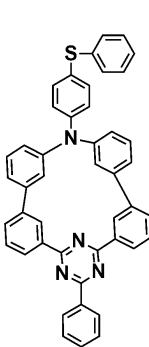
16



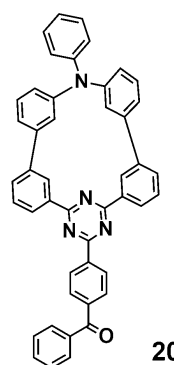
17



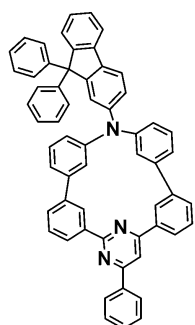
18



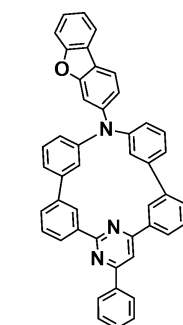
19



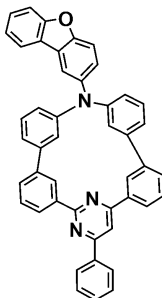
20



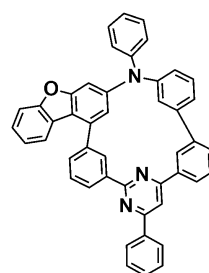
21



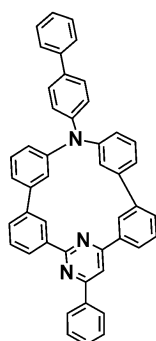
22



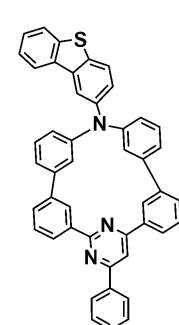
23



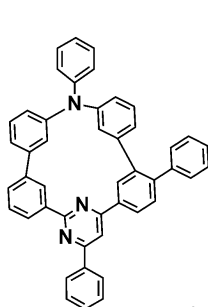
24



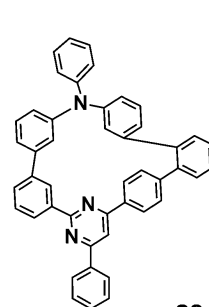
25



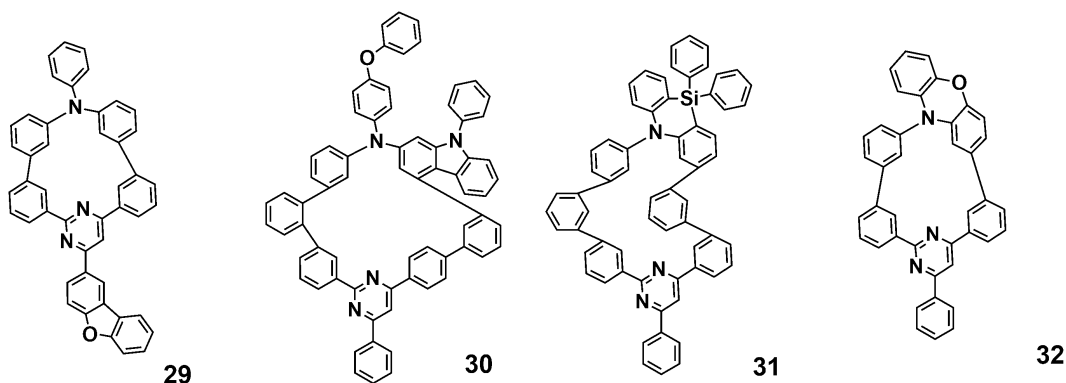
26



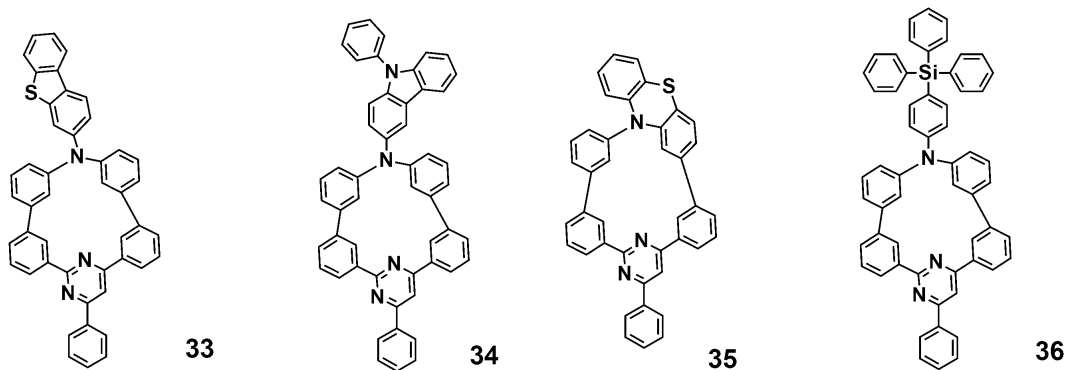
27



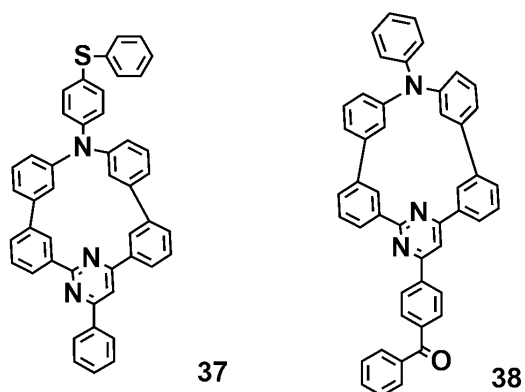
28



[0126]



[0127]



[0128]

[0129]

일 실시예의 함질소 화합물은 복수 개의 방향족 고리가 서로 연결되어 포함된 환상의 분자 구조를 가짐으로써 우수한 내열성과 내화학적성을 가질 수 있다. 또한, 일 실시예의 함질소 화합물은 환상의 분자 구조에서 전자공여 성기인 아릴아민기와 전자수용성기인 아진기를 포함하여 최저 여기 일중항 에너지 레벨(S1)과 최저 여기 삼중항 에너지 레벨(T1)의 차이가 작은 발광 재료를 구현할 수 있다.

[0130]

일 실시예의 함질소 화합물은 최저 여기 일중항 에너지 레벨(S1)과 최저 여기 삼중항 에너지 레벨(T1)의 차이 ( $\Delta E_{ST}$ )가 0.2eV 이하일 수 있다. 일 실시예의 함질소 화합물은 지연 형광 발광 재료로 사용될 수 있다. 구체적으로, 일 실시예의 함질소 화합물은 작은  $\Delta E_{ST}$  값을 가짐으로써 열활성 지연 형광 발광(TADF, Thermally Activated Delayed Fluorescence) 재료로 사용될 수 있다.

[0131]

상술한 일 실시예의 함질소 화합물은 유기 전계 발광 소자에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 개선시킬 수 있다. 일 실시예의 함질소 화합물은 유기 전계 발광 소자의 마주하는 전극들 사이에 배치되는 발광층의 재료로 사용되어 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 개선할 수 있다. 구체적으로, 일 실시예의 함질소 화합물은 열활성 지연 형광 도펀트로 발광층에 포함되어 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 보다 개선할 수 있으며, 특히 청색광을 발광하는 발광층에 사용되어 청색광의 발광 효율을 보다 개선할 수 있다.

[0132]

이하에서는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다. 이하에서는 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물에 대하여는 구체적으로 설명하지 않으며, 설명되지 않은 부분은 상술한

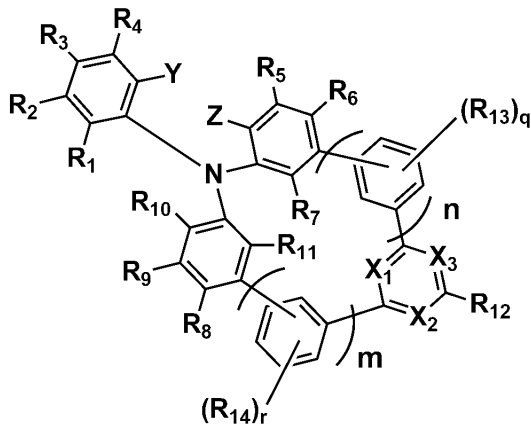
본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물의 설명에 따른다.

- [0133] 도 1 내지 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 1 내지 도 3을 참조하면, 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 순차적으로 적층된 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함할 수 있다.
- [0134] 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)은 서로 마주하고 배치되며, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에는 복수의 유기층들이 배치될 수 있다. 복수의 유기층들은 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 및 전자 수송 영역(ETR)을 포함할 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 발광층(EML)에 상술한 일 실시예의 합질소 화합물을 포함할 수 있다.
- [0135] 한편, 도 2는 도 1과 비교하여, 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL) 및 전자 수송층(ETL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 또한, 도 3은 도 1과 비교하여 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 및 전자 저지층(EBL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL), 전자 수송층(ETL), 및 정공 저지층(HBL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다.
- [0136] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 금속 합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제1 전극(EL1)은 애노드(anode)일 수 있다.
- [0137] 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) 등으로 이루어질 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 예시된 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 복수의 층을 포함하는 것일 수 있다.
- [0138] 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.
- [0139] 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.
- [0140] 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 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0141] 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.
- [0142] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 정공 주입층(HIL)은 공지의 정공 주입 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 정공 주입층(HIL)은 트리페닐아민 함유 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-이소프로필-4'-메틸디페닐요오드늄테트라키스(펜타플루오로페닐)붕산염(PPBI), N, N'-디페닐-N, N'-비스-[4-(페닐-m-톨릴-아미노)-페닐]-페닐-4, 4'-디아민(DNTPD), 구리 프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, 4, 4', 4''-트리스(3-메틸 페닐 페닐아미노)트리페닐아민(m-MTDATA), N, N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(NPB), N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민( $\alpha$ -NPD), 4,4',4''-트리스{N,N 디페닐 아미노} 트리페닐아민(TDATA), 4,4',4''-트리스(N,N-2-나프틸 페닐아미노)트리페닐아민(2-TNATA), 폴리아닐린/도데실 벤젠 설폰산(PANI/DBSA), 폴리(3,4-에틸렌다이옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트)(PEDOT/PSS), 폴리아닐린/캄페실폰산(PANI/CSA), 폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트)(PANI/PSS), 또는 HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0143] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 정공 수송층(HTL)은 공지의 정공 수송 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 정공 수송층(HTL)은 1,1-비스[(디-4-트릴아미노)페닐]시클로헥산(TAPC), N-페닐카르바졸(N-Phenyl carbazole), 폴리비닐카르바졸(Polyvinyl carbazole) 등의 카르바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 4,4',4''-트리스(N-카르바졸릴)트리페닐아민(TCTA), 또는 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(NPB), N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민( $\alpha$ -NPD) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0144] 전자 저지층(EBL)은 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 예를 들어, N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 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'-diphenyl-benzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTDP(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 합질소 화합물을 포함할 수 있다.
- [0145] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å 일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å 이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å 일 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.
- [0146] 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 퀸온(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 퀸온 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0147] 앞서 언급한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 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.
- [0148] 한편, 정공 수송 영역(HTR)은 전자 저지층(EBL)을 더 포함하고, 전자 저지층(EBL)은 정공 수송층(HTL)과 발광층(EML) 사이에 배치될 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.
- [0149] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)의 두께는 예를 들어, 약 100Å 내지 약 300Å 인 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.
- [0150] 발광층(EML)은 적색광, 녹색광, 청색광, 백색광, 황색광, 시안광 중 하나를 발광하는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 형광 발광 물질 또는 인광 발광 물질을 포함할 수 있다.
- [0151] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 형광 발광층일 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 청색광을 방출하는 형광 발광층일 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)에서 방출된 광 중 일부는 열활성 지연 형광 발광(Thermally Activated Delayed Fluorescence)에 의한 것일 수 있다. 구체적으로, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 열활성 지연 형광 발광하는 발광 성분을 포함하는 것일 수 있으며, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 열활성 지연 형광 발광하는 청색광 발광층일 수 있다.
- [0152] 한편, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함하는 것이 수 있다. 도펀트는 일 실시예의 합질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 이때, 발광층(EML)은 예를 들어 100 Å 이상 600 Å 이하의 두께를 갖는 것일 수 있다.

[0153] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 상술한 일 실시예의 함질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 하기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 발광층(EML)에 포함하여 형광 발광하는 것일 수 있다.

[0154] [화학식 1]



[0155]

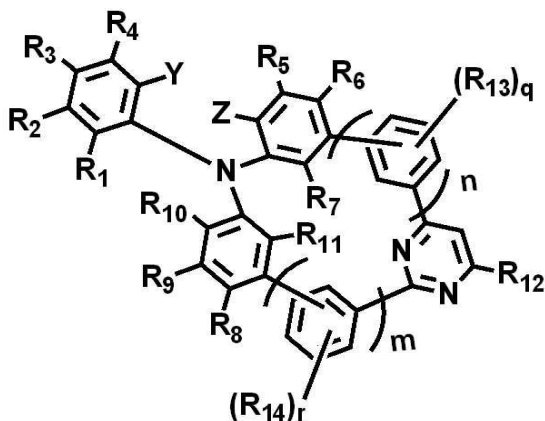
[0156] 화학식 1에서,  $X_1$ ,  $X_2$ , 및  $X_3$  중 적어도 2개는 N이고, 나머지는  $CR_{15}$  이다. Y 및 Z는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{16}$ ,  $SR_{17}$ ,  $CR_{18}R_{19}R_{20}$ , 또는  $SiR_{21}R_{22}R_{23}$ 이거나, 또는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 화학식 1에서,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자,  $OR_{24}$ ,  $SR_{25}$ ,  $(C=O)R_{26}$ ,  $NR_{27}R_{28}$ ,  $CR_{29}R_{30}R_{31}$ ,  $SiR_{32}R_{33}R_{34}$ , 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 형성할 수 있다. 또한,  $R_{15}$  내지  $R_{34}$ 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 형성할 수 있다.

[0157] 화학식 1에서, n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2 이고, q 및 r은 각각 독립적으로, 0 이상 4 이하의 정수이다.

[0158] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에 사용된 화학식 1로 표시된 함질소 화합물에 대한 설명에서 있어서,  $X_1$  내지  $X_3$ , Y, Z,  $R_1$  내지  $R_{34}$ , n, m, q, 및 r에 대하여는 상술한 일 실시예의 함질소 화합물에 대한 설명과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

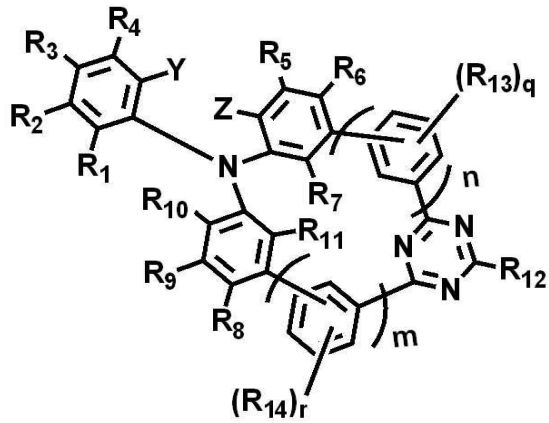
[0159] 또한, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 하기 화학식 1-1 또는 화학식 1-2로 표시되는 함질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0160] [화학식 1-1]



[0161]

[0162] [화학식 1-2]

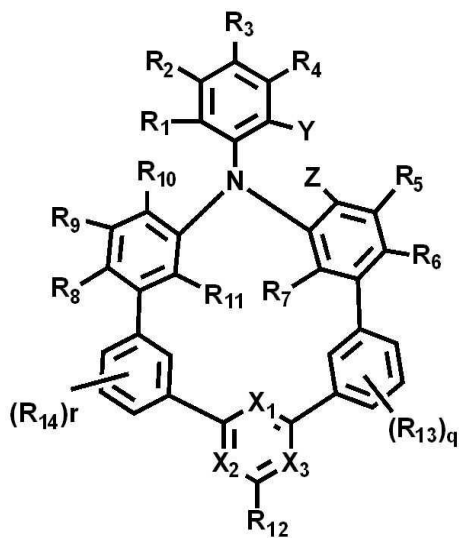


[0163]

[0164] 화학식 1-1 및 화학식 1-2에서, Y, Z, n, m, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>34</sub>, q, 및 r은 화학식1에 대한 설명에서 정의한 바와 동일하다.

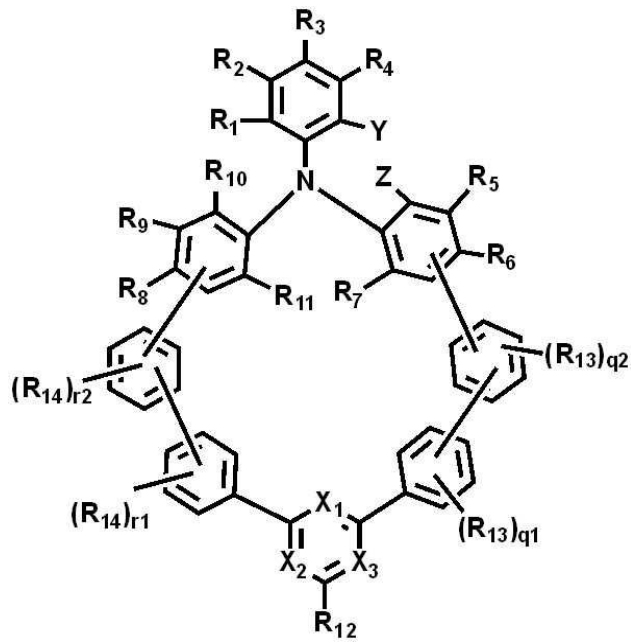
[0165] 또한, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 하기 화학식 1-3 내지 화학식 1-6 중 어느 하나로 표시되는 함질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0166] [화학식 1-3]



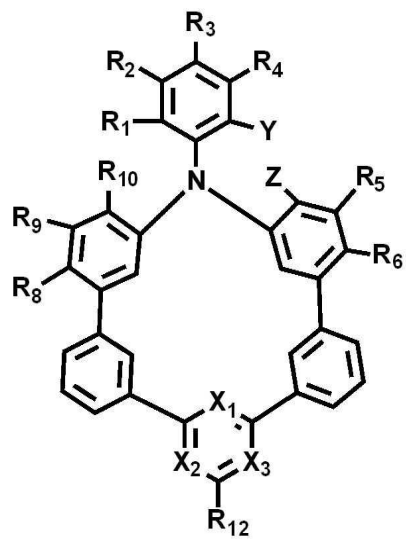
[0167]

[0168] [화학식 1-4]



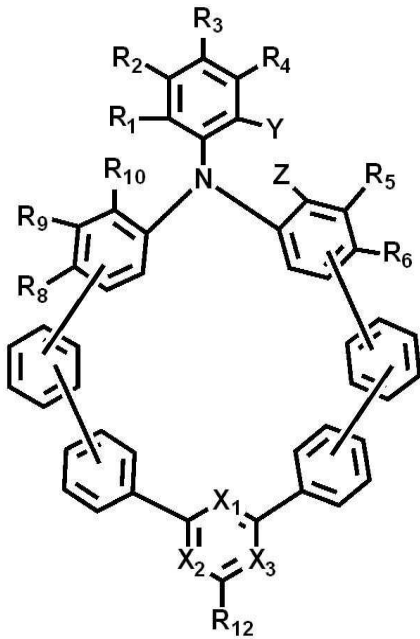
[0169]

[0170] [화학식 1-5]



[0171]

[0172] [화학식 1-6]



[0173]

[0174] 상기 화학식 1-3 및 화학식 1-4에서, q1, q2, r1, 및 r2는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. 또한, 상기 화학식 1-3 내지 화학식 1-6에서 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Y, Z, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>34</sub>, q, 및 r은 화학식 1에 대한 설명과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

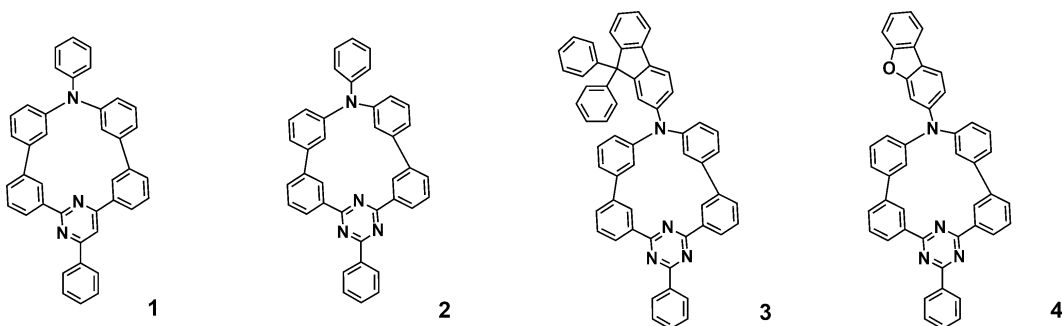
[0175]

일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 발광층(EML)에 포함하여 지연 형광 발광하는 것일 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 상기 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 함질소 화합물을 발광층(EML)에 포함하고 열활성 지연 형광 발광하는 것일 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 열활성 지연 형광 발광용 도펀트 물질로 포함하는 것일 수 있다.

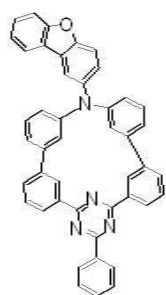
[0176]

일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나를 발광층(EML)에 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나를 발광층(EML)의 도펀트 재료로 포함할 수 있다. 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나의 함질소 화합물은 열활성 지연 형광 도펀트 재료로서 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)에 포함될 수 있다.

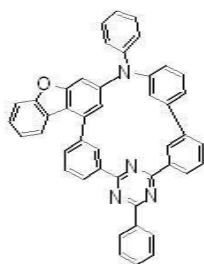
[0177] [화합물군 1]



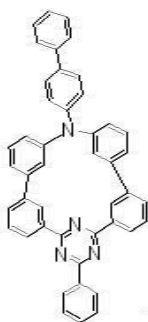
[0178]



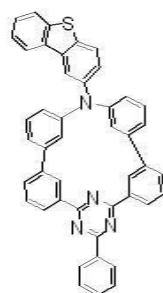
5



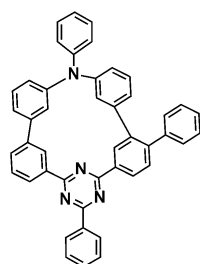
6



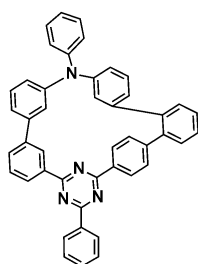
7



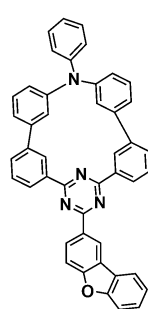
8



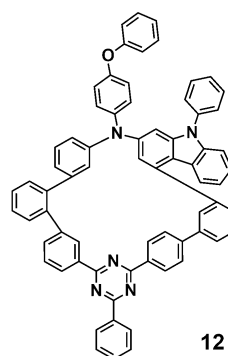
9



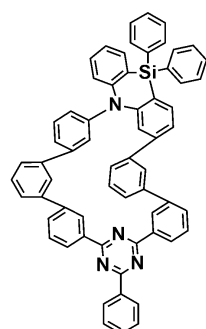
10



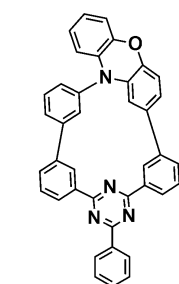
11



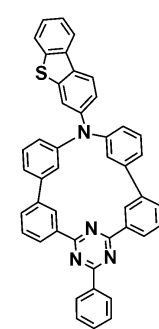
12



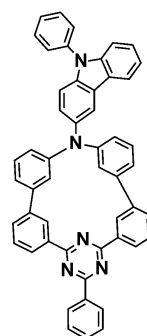
13



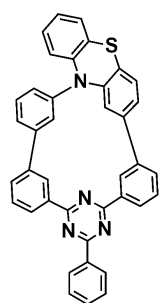
14



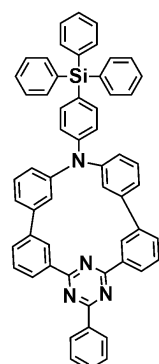
15



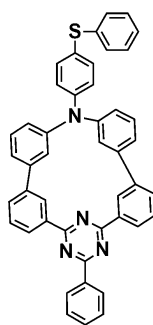
16



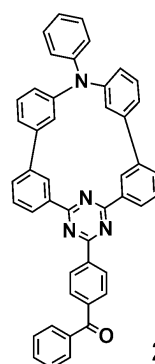
17



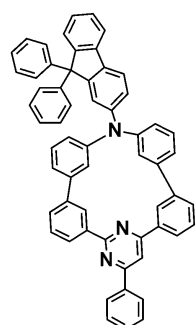
18



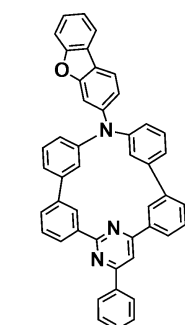
19



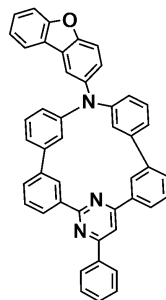
20



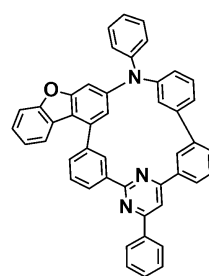
21



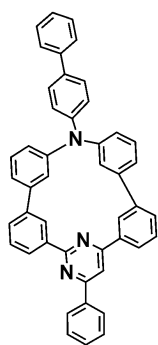
22



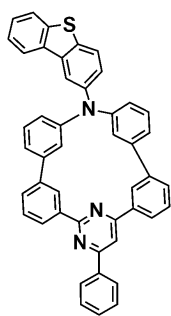
23



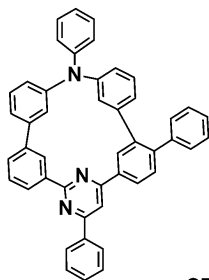
24



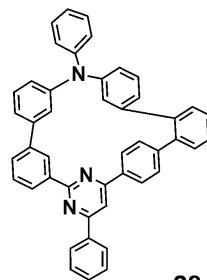
25



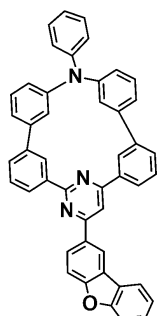
26



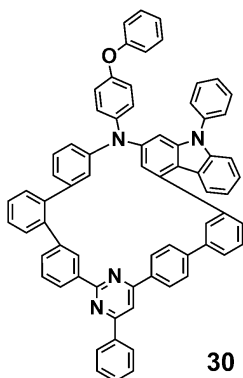
27



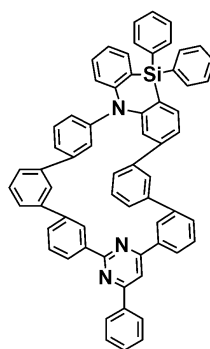
28



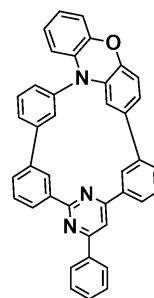
29



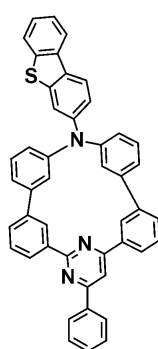
30



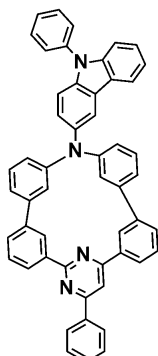
31



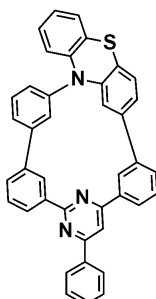
32



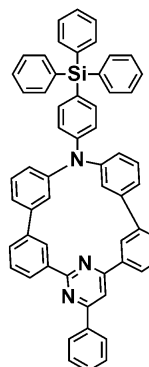
33



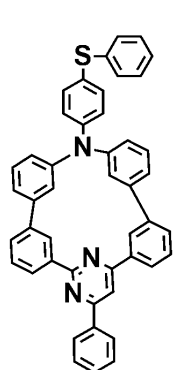
34



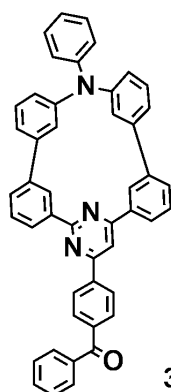
35



36



37



38

한편, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자에서 발광층(EML)은 일 실시예의 함질소 화합물을 열활성 지연 형광 도펀트로 포함하며, 이와 함께 열활성 지연 형광 호스트 재료를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예에서 발광층(EML)은 호스트 재료로, DPEPO(Bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide), CBP(4,4'-Bis(carbazol-9-yl)biphenyl), mCP(1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzene), PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzo[b,d]furan), TcTa(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), mCBP(3,3'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), 및 T2T(2,4,6-tris(biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 또한, 일 실시예의 유기

전계 발광 소자에서 발광층(EML)은 공지의 호스트 재료로 Alq<sub>3</sub>(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), PVK(poly(n-vinylcabazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), 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), CP1 (Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO<sub>3</sub> (Hexaphenylcyclotrisiloxane), 또는 DPSiO<sub>4</sub> (Octaphenylcyclotetra siloxane) 등을 더 포함할 수 있다.

[0189] 일 실시예에서 발광층(EML)은 상술한 일 실시예의 합질소 화합물 이외에 공지의 지연 형광 발광 도펀트를 더 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 도펀트로 ACRSA(10-phenyl-10H, 10'H-spiro[acridine-9,9' '-anthracene]-10'-one), 4CzPN(3,4,5,6-Tetra-9H-carbazol-9-yl-1,2-benzenedicarbonitrile), 4CzIPN(2,4,5,6-Tetra-9H-carbazol-9-yl-isophthalonitrile), DMAC-DPS(Bis[4-9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine)phenyl]sulfone), 및 PSZ-TRZ(2-phenoxazine-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 또한, 발광층(MEL)은 공지의 도펀트 재료로, 스티릴 유도체(예를 들어, 1, 4-bis[2-(3-N-ethylcarbazoryl)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-BDAVB), 페릴렌 및 그 유도체(예를 들어, 2, 5, 8, 11-Tetra-tert-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체(예를 들어, 1, 1-dipyrene, 1, 4-dipyrenylbenzene, 1, 4-Bis(N, N-Diphenylamino)pyrene) 등을 더 포함할 수 있다.

[0190] 한편, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 청색광을 방출하는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 450nm 이상 490nm 이하의 파장 영역의 광을 방출하는 것일 수 있다.

[0191] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 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.

[0192] 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.

[0193] 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, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

[0194] 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.

[0195] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 예를 들어 전자 수송 영역(ETR)은 Alq<sub>3</sub>(Tris(8-hydroxyquinolino)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-phenylbenzoimidazolyl-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), Beq2(beryllumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0196] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함하는 경우 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 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0197] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 예를 들어, LiF, LiQ(Lithium quinolate), Li<sub>2</sub>O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI, KI와 같은 할로젠화

금속 등이 사용될 수 있으나 실시예가 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.

[0198] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함하는 경우 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.

[0199] 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) 및 Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0200] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 도전성을 갖는다. 제2 전극(EL2)은 금속 합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제2 전극(EL2)은 캐소드(cathode)일 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.

[0201] 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 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 예시된 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.

[0202] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)이 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소시킬 수 있다.

[0203] 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)으로부터 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.

[0204] 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.

[0205] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 상술한 일 실시예의 합질소 화합물을 발광층에 포함하여 개선된 발광 효율을 가질 수 있다. 구체적으로, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 일 실시예의 합질소 화합물을 발광층의 도펀트 물질로 포함하여 발광층이 열활성 지연 형광 발광 성분의 광을 방출하도록 함으로써 개선된 발광 효율을 나타낼 수 있다.

[0206] 이하에서는, 실시예 및 비교예를 참조하면서, 본 발명의 일 실시 형태에 따른 합질소 화합물 및 일 실시예의 합질소 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 대해서 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 나타내는 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 일 예시이며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0207] [실시예]

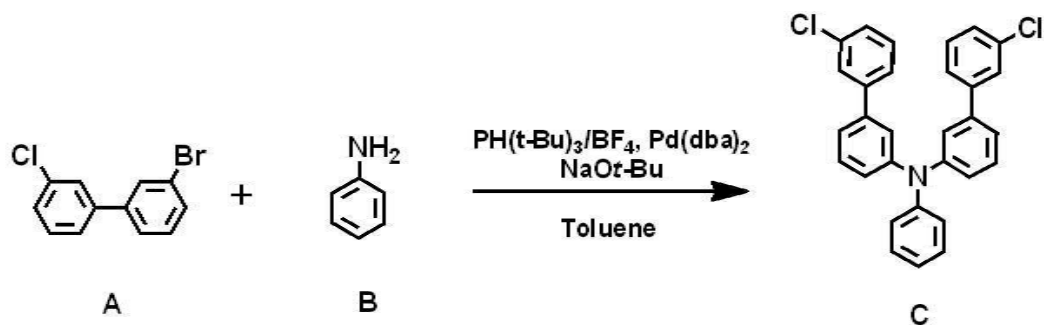
[0208] 1. 합질소 화합물의 합성

[0209] 먼저, 본 실시 형태에 따른 합질소 화합물의 합성 방법에 대해서, 화합물 1, 화합물 2, 화합물 3, 화합물 4, 및 화합물 11의 합성 방법을 예시하여 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 설명하는 합질소 화합물의 합성법은 일 실시예로서, 본 발명의 실시형태에 따른 합질소 화합물의 합성법이 하기의 실시예에 한정되지 않는다.

[0210] (화합물 1의 합성)

[0211] 일 실시예에 따른 합질소 화합물 1은 예를 들어 하기 반응식 1-1 내지 반응식 1-3의 단계를 수행하여 합성될 수 있다.

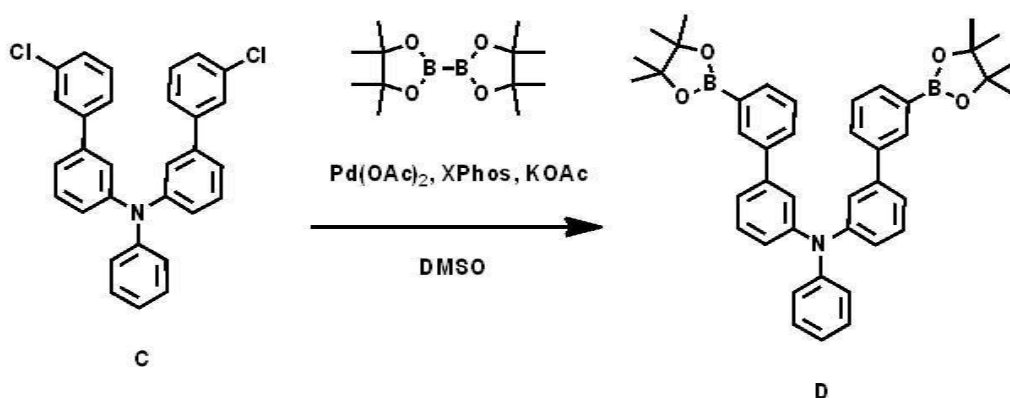
[0212] [반응식 1-1]



[0213]

[0214] 상기의 반응식 1-1의 공정에 의해 화합물 C를 합성하였다. 반응식 1-1을 참조하면, 아르곤(Ar) 분위기 하 500mL의 3구 플라스크에, 화합물 A 6.3g, 화합물 B 1.1g,  $\text{Pd}(\text{dba})_2$  0.27g,  $\text{PH}(\text{t-Bu})_3/\text{BF}_4$  0.14g,  $\text{NaOt-Bu}$  2.3g을 추가하여, 200mL의 톨루엔(toluene)용매 중에서 15시간 동안 가열 환류하였다. 공랭 후, 물을 추가하여 유기층을 분취하고, 용매를 유거 하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피(silicagel chromatography, toluene/Hexane혼합 용매 사용)로 정제 후, 헥산(Hexane)으로 재결정을 시행하여, 백색 고체 목적물 4.6g(수율 83%)를 얻었다. FAB-MS로 측정 된 목적물의 분자량은 466이었다. 이로부터, 목적물이 화합물 C인 것을 확인하였다.

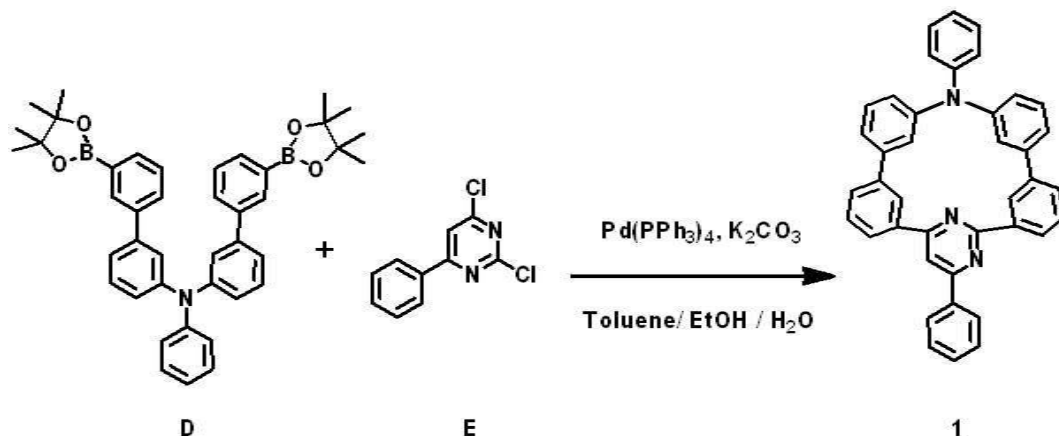
[0215] [반응식 1-2]



[0216]

[0217] 다음으로, 반응식 1-2의 공정으로 화합물 C로부터 화합물 D를 합성하였다. 아르곤 분위기 하, 300mL의 3구 플라스크에, 화합물 C 3.0g, 화합물 Bis(Pinacolate)diboron 5.0g,  $\text{Pd}(\text{OAc})_2$  0.15g, XPhos 0.32g, KOAc 2.6g을 추가하여, 60 mL의 DMSO 용매 중에서 15시간 동안 가열 환류 하였다. 공랭 후, 물을 추가하여 유기층을 분취하고, 용매를 유거 하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피(톨루엔 사용)로 정제 후, 헥산으로 재결정을 시행하여 백색고체의 목적물 4.0g(수율87%)을 얻었다. FAB-MS로 측정 된 목적물의 분자량은 689였으며, 이로부터 목적물이 화합물 D인 것을 확인하였다.

[0218] [반응식 1-3]

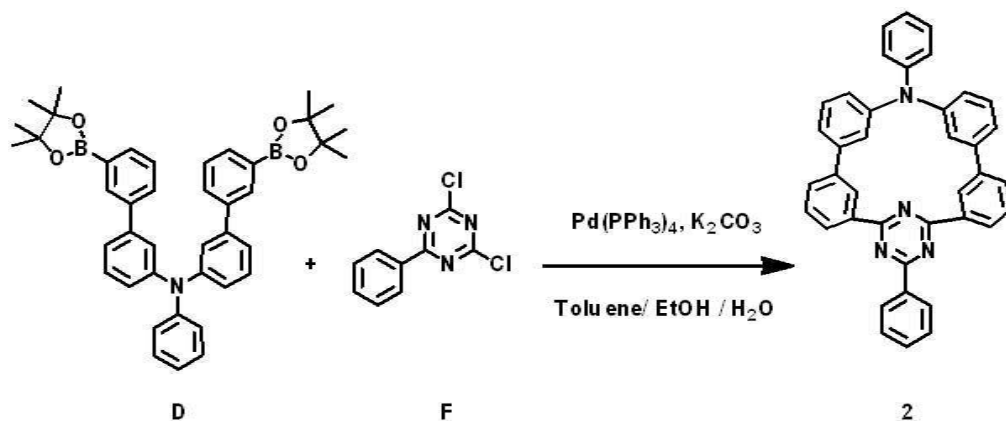


[0219]

[0220] 이후 반응식 1-3의 공정으로 화합물 1을 합성하였다. 아르곤 분위기 하, 300mL의 3구 플라스크에 화합물 D 1.4g, 화합물 E 0.5g, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.26g, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 0.92g을 추가하여, 100mL의 톨루엔, 5mL의 에탄올(Ethanol), 10mL의 증류수 혼합 용매 중에서 15시간 동안 가열 환류 하였다. 공랭 후, 물을 추가하여 유기층을 분취하고, 용매를 유거 하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 크로마토그래피(톨루엔/헥산 혼합 용매 사용)로 정제 후, 헥산으로 재결정을 시행하여 백색 고체 목적물 0.61g(수율 50%)를 얻었다. FAB-MS로 측정 된 목적물의 분자량은 550이었다. 이로부터, 목적물이 화합물 1인 것을 확인하였다.

[0221] (화합물 2의 합성)

[0222] [반응식 2]



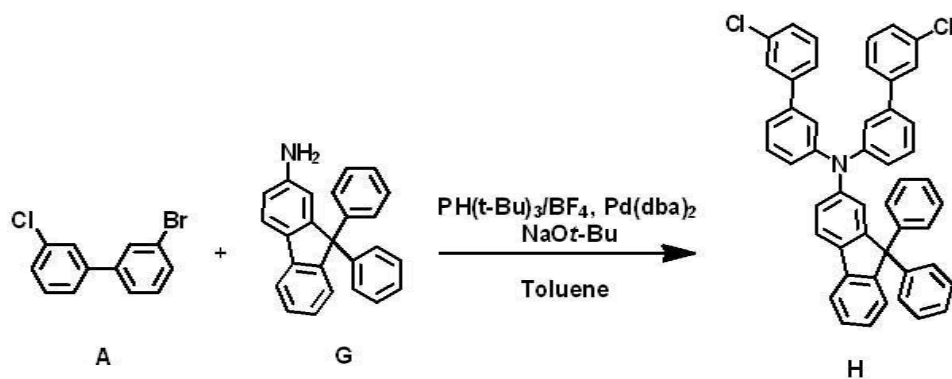
[0223]

[0224] 일 실시예에 따른 함질소 화합물 2는 예를 들어 상기의 반응식 2에 의해 합성될 수 있다. 화합물 2의 합성 방법에 있어서, 화합물 E를 대신하여 화합물 F를 사용한 것을 제외하고는 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법으로 수행하여 목적 생성물인 화합물 2 0.63(수율 73%)을 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정 된 목적물의 분자량은 551이었다. 이로부터, 목적물이 화합물 2인 것을 확인하였다.

[0225] (화합물 3의 합성)

[0226] 일 실시예에 따른 함질소 화합물 3은 예를 들어 하기 반응식 3-1 내지 반응식 3-3의 단계를 수행하여 합성될 수 있다.

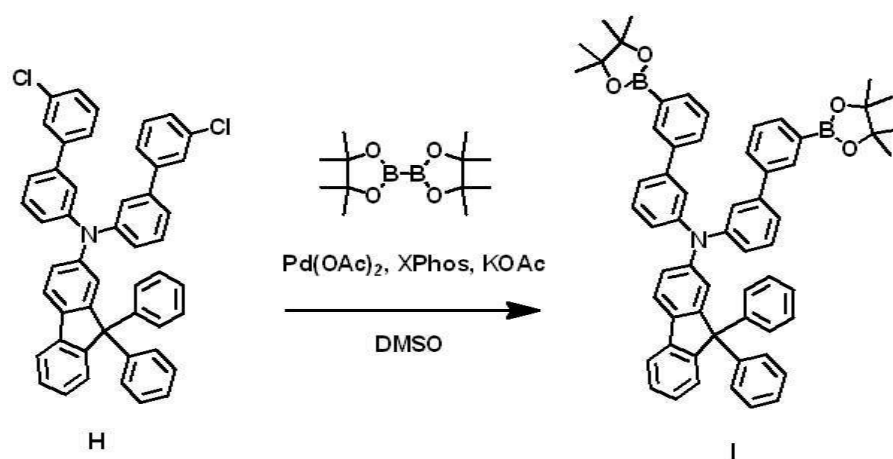
[0227] [반응식 3-1]



[0228]

[0229] 반응식 3-1의 공정에 의해 화합물 H를 합성하였다. 화합물 H의 합성에 있어서, 화합물 B를 대신하여 화합물 G를 사용한 것을 제외하고는 반응식 1-1의 화합물 C의 합성 방법과 동일한 방법으로 수행하여 목적 생성물인 화합물 H 6.4g(수율 78%)을 얻었다. FAB-MS로 측정된 화합물 H의 분자량은 707이었다.

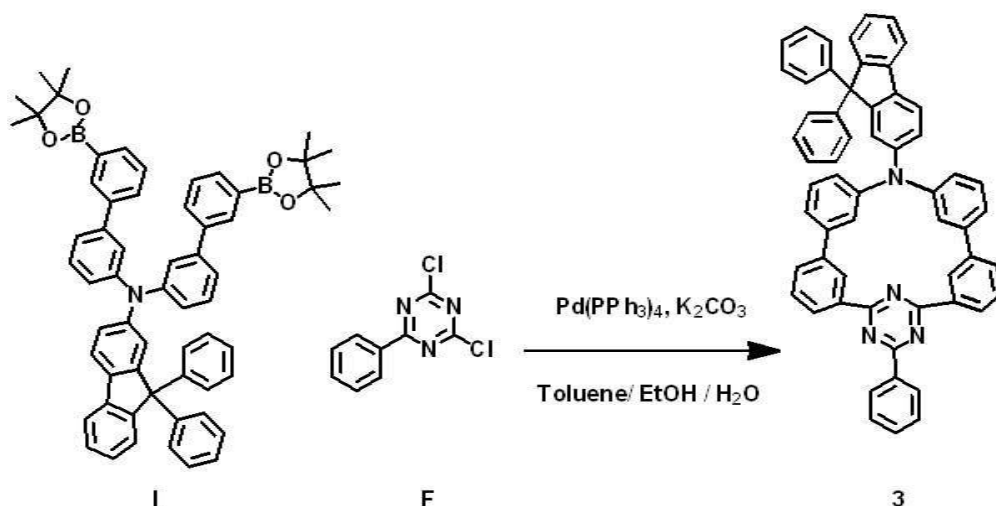
[0230] [반응식 3-2]



[0231]

[0232] 다음으로, 반응식 3-2의 공정으로 화합물 H로부터 화합물 I를 합성하였다. 화합물 I의 합성에 있어서, 화합물 C를 대신하여 화합물 H를 사용한 것을 제외하고는 반응식 1-2의 화합물 D의 합성 방법과 동일한 방법으로 수행하여 목적 생성물인 화합물 I 3.4g(수율 91%)을 얻었다. FAB-MS로 측정된 화합물 I의 분자량은 890이었으며, 이로부터 목적물이 화합물 I인 것을 확인하였다.

[0233] [반응식 3-3]



[0234]

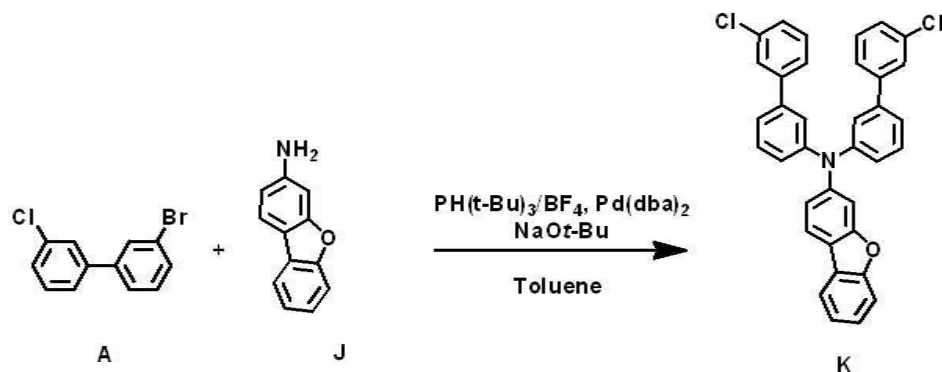
[0235] 이후 반응식 3-3의 공정으로 화합물 3을 합성하였다. 화합물 3의 합성에 있어서, 화합물 D를 대신하여 화합물 I

를 사용한 것을 제외하고는 반응식 1-3의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법으로 수행하여 목적 생성물인 화합물 3 0.74g(수율 43%)을 얻었다. FAB-MS로 측정된 화합물 3의 분자량은 778이었으며, 이로부터 목적물이 화합물 3인 것을 확인하였다.

[0236] (화합물 4의 합성)

[0237] 일 실시예에 따른 합질소 화합물 4는 예를 들어 하기 반응식 4-1 내지 반응식 4-3의 단계를 수행하여 합성될 수 있다.

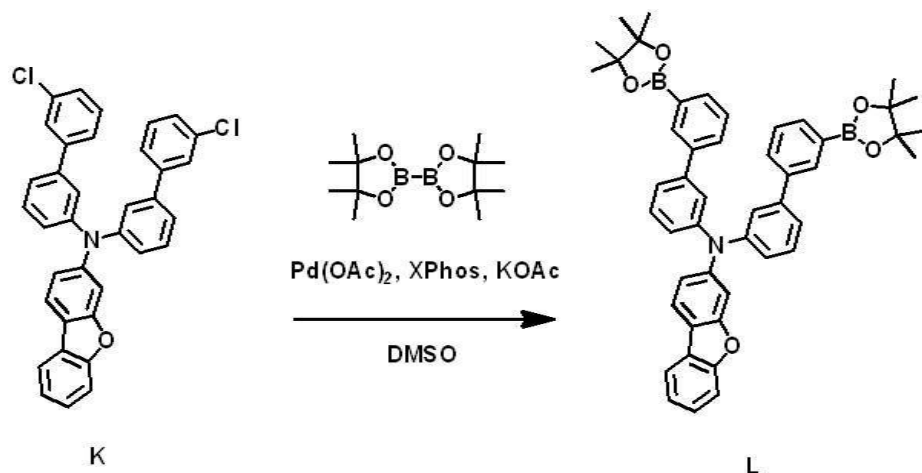
[0238] [반응식 4-1]



[0239]

[0240] 반응식 4-1의 공정에 의해 화합물 K를 합성하였다. 화합물 K의 합성에 있어서, 화합물 B를 대신하여 화합물 J를 사용한 것을 제외하고는 반응식 1-1의 화합물 C의 합성 방법과 동일한 방법으로 수행하여 목적 생성물인 화합물 K 6.2g(수율 95%)을 얻었다. FAB-MS로 측정된 화합물 K의 분자량은 557이었다.

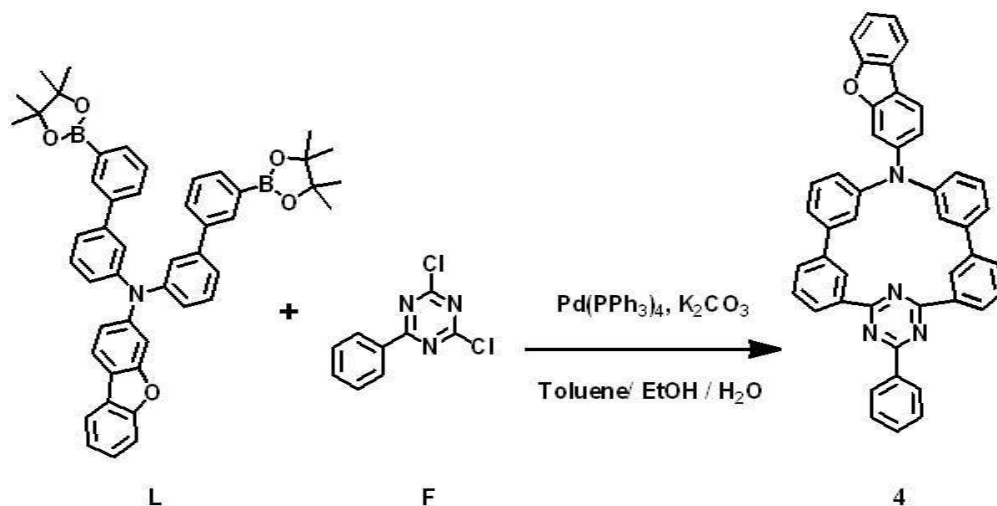
[0241] [반응식 4-2]



[0242]

[0243] 다음으로, 반응식 4-2의 공정으로 화합물 K로부터 화합물 L을 합성하였다. 화합물 L의 합성에 있어서, 화합물 C를 대신하여 화합물 K를 사용한 것을 제외하고는 반응식 1-2의 화합물 D의 합성 방법과 동일한 방법으로 수행하여 목적 생성물인 화합물 L 3.7g(수율 93%)을 얻었다. FAB-MS로 측정된 화합물 L의 분자량은 740이었으며, 이로부터 목적물이 화합물 L인 것을 확인하였다.

[0244] [반응식 4-3]

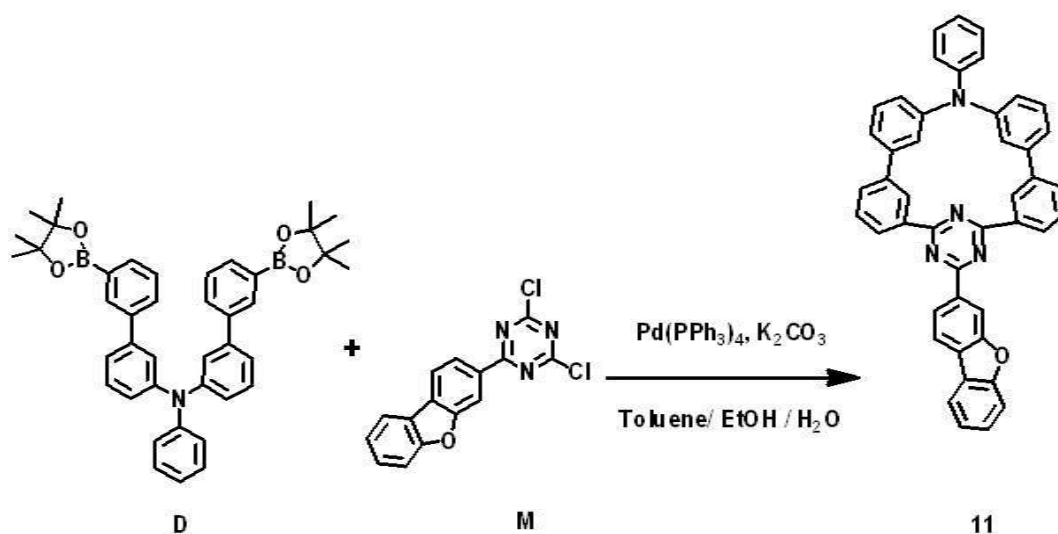


[0245]

[0246] 이후 반응식 4-3의 공정으로 화합물 4를 합성하였다. 화합물 4의 합성에 있어서, 화합물 D를 대신하여 화합물 L을 이용하고 화합물 E를 대신하여 화합물 F를 사용한 것을 제외하고는 반응식 1-3의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법으로 수행하여 목적 생성물인 화합물 4 0.51g(수율 36%)을 얻었다. FAB-MS로 측정된 화합물 4의 분자량은 641이었으며, 이로부터 목적물이 화합물 4인 것을 확인하였다.

[0247] (화합물 11의 합성)

[0248] [반응식 5]



[0249]

[0250] 일 실시예에 따른 함질소 화합물 11은 상기의 반응식 5에 의해 합성될 수 있다. 화합물 11의 합성 방법에 있어서, 화합물 E를 대신하여 화합물 M을 사용한 것을 제외하고는 반응식 1-3의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법으로 수행하여 목적 생성물인 화합물 11 0.42g(수율 41%)을 얻었다. FAB-MS로 측정된 목적물의 분자량은 641이었으며, 이로부터 목적물이 화합물 11인 것을 확인하였다.

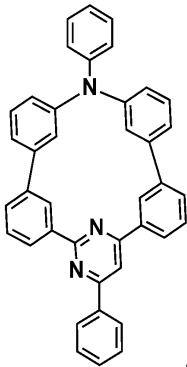
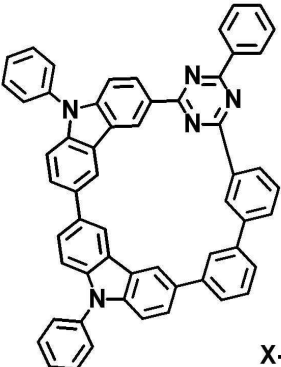
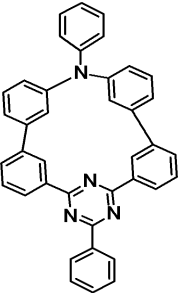
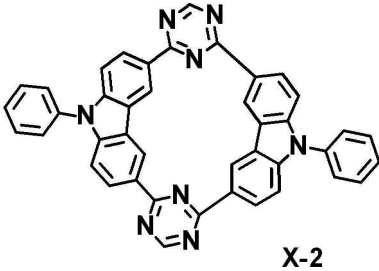
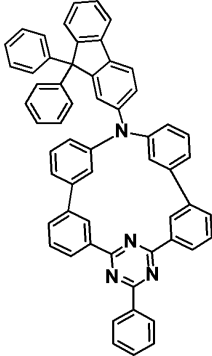
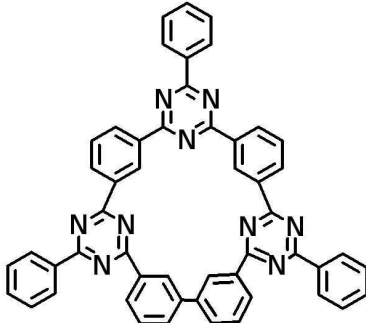
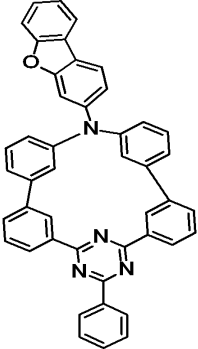
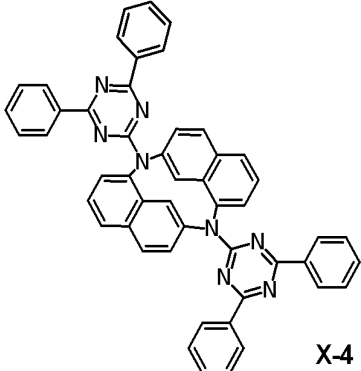
[0251] 2. 함질소 화합물의 에너지 레벨 계산

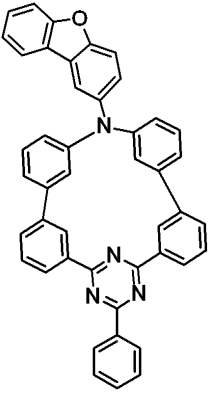
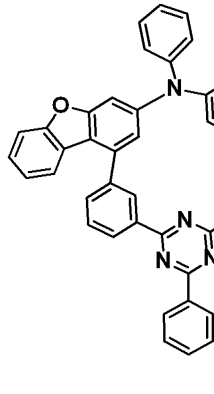
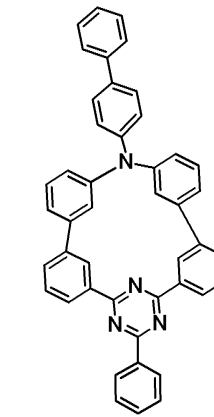
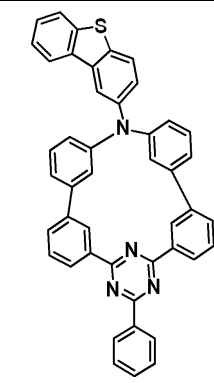
[0252] 일 실시예의 함질소 화합물과 비교예 화합물에 대한 최저 여기 일중항 에너지 레벨(S1 에너지 레벨)과 최저 여기 삼중항 에너지 레벨(T1 에너지 레벨)을 비경험적 분자 궤도법으로 계산하여 나타내었다.

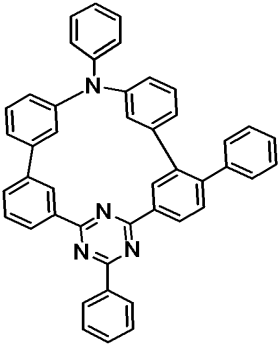
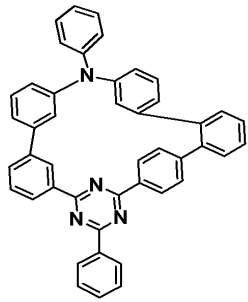
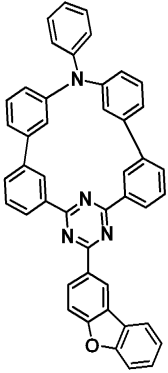
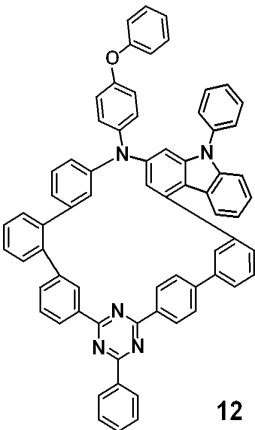
[0253] 표 1은 에너지 레벨 계산에 사용된 실시예 화합물들과 비교예 화합물들을 나타낸 것이고, 표 2는 표 1에 개시된 화합물들에 대한 S1 에너지 레벨, T1 에너지 레벨, 및  $\Delta E_{ST}$ (S1 에너지 레벨과 T1 에너지 레벨의 차이, S1-T1)를 나타낸 것이다. 표 2에서 표시한 에너지 레벨은 Gaussian사 제품인 Gaussian 09를 이용하여 범함수 B3LYP, 기저함수 6-31G(d)를 이용하여 계산하였다.

표 1

[0254]

|           |  |             |  |
|-----------|--|-------------|--|
| 실시예 화합물 1 | <br>1   | 비교예 화합물 X-1 | <br>X-1   |
| 실시예 화합물 2 | <br>2   | 비교예 화합물 X-2 | <br>X-2   |
| 실시예 화합물 3 | <br>3  | 비교예 화합물 X-3 | <br>X-3  |
| 실시예 화합물 4 | <br>4 | 비교예 화합물 X-4 | <br>X-4 |

|                  |  |  |  |
|------------------|--|--|--|
| <p>실시예 화합물 5</p> |  <p>5</p>   |  |  |
| <p>실시예 화합물 6</p> |  <p>6</p>   |  |  |
| <p>실시예 화합물 7</p> |  <p>7</p>  |  |  |
| <p>실시예 화합물 8</p> |  <p>8</p> |  |  |

|            |   |  |  |
|------------|---|--|--|
| 실시예 화합물 9  |  <p style="text-align: right;"><b>9</b></p>    |  |  |
| 실시예 화합물 10 |  <p style="text-align: right;"><b>10</b></p>   |  |  |
| 실시예 화합물 11 |  <p style="text-align: right;"><b>11</b></p>  |  |  |
| 실시예 화합물 12 |  <p style="text-align: right;"><b>12</b></p> |  |  |

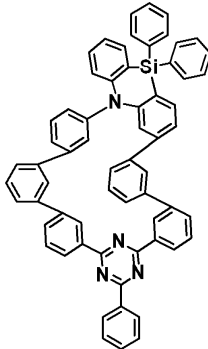
|            |  |  |  |
|------------|--|--|--|
| 실시예 화합물 13 |  <p style="text-align: center;"><b>13</b></p> |  |  |
|------------|--|--|--|

표 2

| 화합물         | S1 에너지 레벨 | T1 에너지 레벨 | $\Delta E_{ST}$ |
|-------------|-----------|-----------|-----------------|
| 실시예 화합물 1   | 2.96      | 2.90      | 0.06            |
| 실시예 화합물 2   | 2.86      | 2.79      | 0.07            |
| 실시예 화합물 3   | 2.81      | 2.75      | 0.06            |
| 실시예 화합물 4   | 2.86      | 2.79      | 0.07            |
| 실시예 화합물 5   | 2.85      | 2.78      | 0.07            |
| 실시예 화합물 6   | 2.78      | 2.63      | 0.15            |
| 실시예 화합물 7   | 2.84      | 2.78      | 0.06            |
| 실시예 화합물 8   | 2.85      | 2.78      | 0.07            |
| 실시예 화합물 9   | 2.76      | 2.70      | 0.06            |
| 실시예 화합물 10  | 2.83      | 2.75      | 0.06            |
| 실시예 화합물 11  | 2.85      | 2.78      | 0.07            |
| 실시예 화합물 12  | 2.52      | 2.50      | 0.02            |
| 실시예 화합물 13  | 2.98      | 2.98      | 0.00            |
| 비교예 화합물 X-1 | 3.06      | 2.76      | 0.30            |
| 비교예 화합물 X-2 | 3.18      | 2.78      | 0.40            |
| 비교예 화합물 X-3 | 3.88      | 2.97      | 0.91            |
| 비교예 화합물 X-4 | 2.71      | 2.16      | 0.55            |

[0255] 표 2를 참조하면, 실시예 화합물들은 비교예 화합물들에 비하여 작은  $\Delta E_{ST}$  값을 갖는 것을 확인할 수 있다. 실시예 화합물 1 내지 실시예 화합물 13의 경우  $\Delta E_{ST}$ 가 0.2eV 이하의 값을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 이와 비교하여 비교예 화합물 X-1 내지 비교예 화합물 X-4에서는 모두  $\Delta E_{ST}$ 가 0.2eV 보다 큰 값을 나타내어 실시예 화합물들과 차이를 보였다.

[0257] 따라서, 실시예 화합물들의 경우 비교예 화합물들과 상이한 환상 구조를 가짐으로써 비교예 화합물들에 비하여 효과적으로 HOMO와 LUMO 준위가 분리되어 있어 작은  $\Delta E_{ST}$  값을 나타내는 것을 알 수 있다.

[0258] 3. 함질소 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 제작 및 평가

[0259] (유기 전계 발광 소자의 제작)

[0260] 일 실시예의 함질소 화합물을 발광층에 포함하고, 발광층은 지연 형광 발광 성분을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자를 아래의 방법으로 제조하였다. 예를 들어, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 일 실시예의 함질소 화합물을 형광 도펀트로 포함하는 경우를 예시적으로 설명한다.

[0261] 상술한 화합물 1, 화합물 2, 화합물 3, 화합물 4, 및 화합물 11의 함질소 화합물을 발광층 재료로 사용하여 실시예 1 내지 실시예 5의 유기 전계 발광 소자를 제작하였고, 상기의 표 1에서의 비교예 화합물 X-1 내지 비교예 화합물 X-4를 발광층 재료로 사용하여 비교예 1 내지 비교예 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0262] 유리 기판 상에 두께 1500Å의 ITO를 패터닝한 후, 초순수로 세척하고 UV 오존 처리를 10분간 실시하였다. 그 후, 100Å 두께로 HAT-CN을 증착하고, α-NPD를 두께 800Å로 증착하고, mCP를 50Å 두께로 증착하여 정공 수송

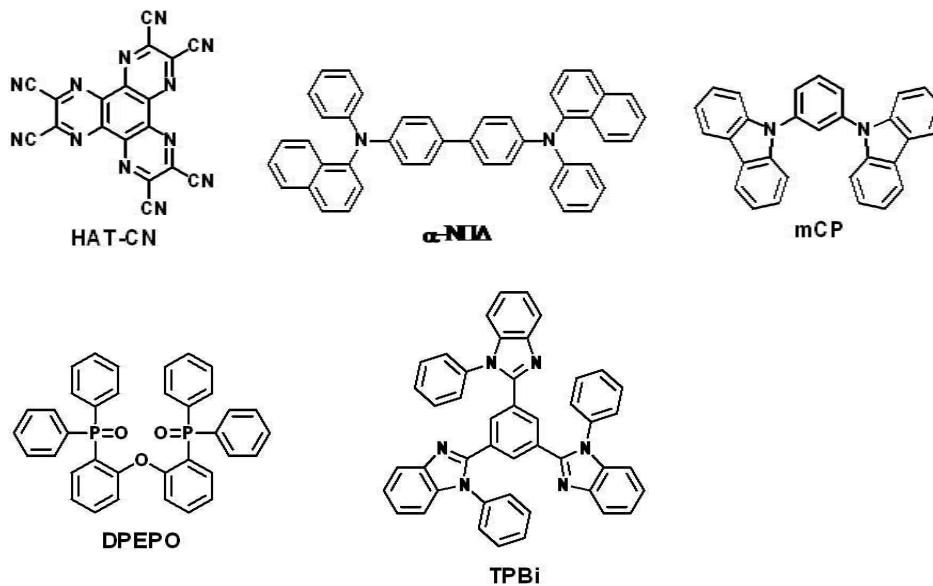
영역을 형성하였다.

[0263] 다음으로, 발광층 형성시 일 실시예의 함질소 화합물 또는 비교예 화합물과DPEPO를 18:82의 비율로 공증착하여 두께 200Å의 층을 형성하였다. 즉, 공증착하여 형성된 발광층은 실시예 1 내지 실시예 5에서는 각각 DPEPO와 화합물 1, 화합물 2, 화합물 3, 화합물 4, 및 화합물 11을 혼합하여 증착하였고, 비교예 1 내지 비교예 4에서는 DPEPO와 비교예 화합물 X-1, X-2, X-3, 및 X-4를 혼합하여 증착하였다.

[0264] 발광층 형성 이후 DPEPO를 이용하여 100Å 두께의 층을 형성하였다. 다음으로, 발광층 상에 TPBi로 두께 300Å의 층을 형성하고, LiF로 두께 5Å의 층을 형성하여 전자 수송 영역을 형성하였다. 다음으로, 알루미늄(Al)으로 두께 1000Å의 제2 전극을 형성하였다.

[0265] 실시예에서, 정공 수송 영역, 발광층, 전자 수송 영역, 및 제2 전극은 진공 증착 장치를 이용하여 형성하였다.

[0266] 상술한 유기 전계 발광 소자 제작에 사용된 재료는 아래의 화학식으로 표시될 수 있다.



[0268]

[0269] (유기 전계 발광 소자의 특성 평가)

[0270] 표 3에서는 실시예 1 내지 실시예 5, 및 비교예 1 내지 비교예 4에 대한 유기 전계 발광 소자의 평가 결과를 나타내었다. 표 3에서  $\lambda_{\max}$ 는 유기 전계 발광 소자에서 방출되는 광의 최대 발광 파장을 나타낸 것이고,  $\eta_{\text{ext}}$ 는 외부 발광 효율을 나타낸 것이다. 실시예 및 비교예의 유기 전계 발광 소자의 발광 특성은 하마마츠 포토닉스사의 C9920-11 휘도 배향 특성 측정 장치를 이용하여 측정하였다.

표 3

[0271]

| 소자 작성예 | 도펀트 물질      | $\lambda_{\max}(\text{nm})$ | $\eta_{\text{ext}}(\%)$ |
|--------|-------------|-----------------------------|-------------------------|
| 실시예 1  | 화합물 1       | 456                         | 8.3                     |
| 실시예 2  | 화합물 2       | 479                         | 10.6                    |
| 실시예 3  | 화합물 3       | 483                         | 11.5                    |
| 실시예 4  | 화합물 4       | 482                         | 12.6                    |
| 실시예 5  | 화합물 11      | 468                         | 10.3                    |
| 비교예 1  | 비교예 화합물 X-1 | 482                         | 2.5                     |
| 비교예 2  | 비교예 화합물 X-2 | 476                         | 2.2                     |
| 비교예 3  | 비교예 화합물 X-3 | 412                         | 1.6                     |
| 비교예 4  | 비교예 화합물 X-4 | 435                         | 3.7                     |

[0272] 표 3의 결과를 참조하면, 본 발명의 일 실시예의 함질소 화합물을 발광층 재료로 사용한 유기 전계 발광 소자의 실시예들의 경우 청색 발광 영역에서 높은 외부 양자 효율을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 즉, 실시예 1 내지 실시예 5의 경우 최대 발광 파장이 450nm 내지 490nm의 범위에서 나타나는 것으로부터 실시예 1 내지 실시예 5의 유기 전계 발광 소자는 청색광을 발광하는 것을 확인할 수 있다.

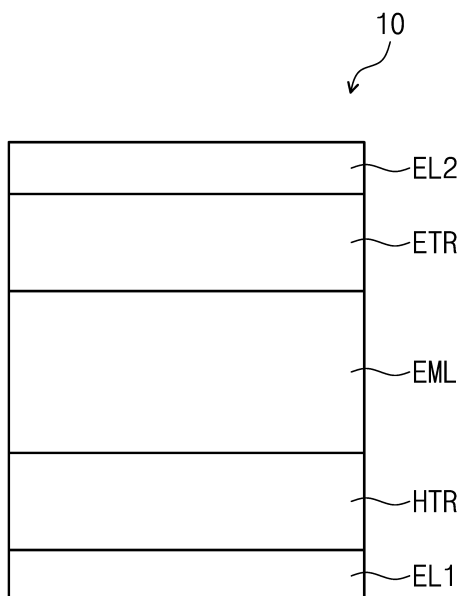
- [0273] 또한, 실시예 1 내지 실시예 5의 경우 비교예 1 내지 비교예 4에 비하여 높은 외부 양자 효율을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 이는 상술한 표 2에서의 평가 결과에서와 같이 일 실시예의 함질소 화합물들의 경우 적절한 환경의 분자 구조를 가짐으로써, 작은  $\Delta E_{ST}$  값을 가질 수 있으며 이로부터 일 실시예의 함질소 화합물을 발광층에 포함한 일 실시예의 유기 전계 발광 소자의 경우 열활성 지연 형광 발광을 구현하여 개선된 외부 양자 효율을 나타내는 것임을 알 수 있다. 이와 비교하여, 비교예들의 경우 발광층에 사용된 비교예 화합물들은 열활성 지연 형광을 구현할 수 있을 정도의 작은  $\Delta E_{ST}$  값을 가지지 못하여 최종적으로 외부 양자 효율이 낮게 나타나는 것임을 알 수 있다.
- [0274] 즉, 일 실시예의 함질소 화합물은 발광층에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 개선시킬 수 있다.
- [0275] 일 실시예의 함질소 화합물은 질소 원자를 포함하는 환상 분자 구조를 가짐으로써 열적 또는 화학적으로 안정적인 특성을 나타낸다. 또한, 일 실시예의 함질소 화합물은 환상 분자 구조 내에 아릴아민부와 아진부(트리아진 또는 피리미딘)를 가짐으로써 분자 내에서 HOMO와 LUMO가 효과적으로 분리되어 작은  $\Delta E_{ST}$  값을 갖도록 하여 지연 형광 발광 재료로 사용될 수 있다.
- [0276] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 발광층에 일 실시예의 함질소 화합물을 포함하여 열활성 지연 형광 발광을 구현함으로써 개선된 발광 효율을 나타낼 수 있다.
- [0277] 이상에서는 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하였지만, 해당 기술 분야의 숙련된 당업자 또는 해당 기술 분야에 통상의 지식을 갖는 자라면, 후술될 특허청구범위에 기재된 본 발명의 사상 및 기술 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할 수 있을 것이다.
- [0278] 따라서, 본 발명의 기술적 범위는 명세서의 상세한 설명에 기재된 내용으로 한정되는 것이 아니라 특허청구범위에 의해 정하여져야만 할 것이다.

## 부호의 설명

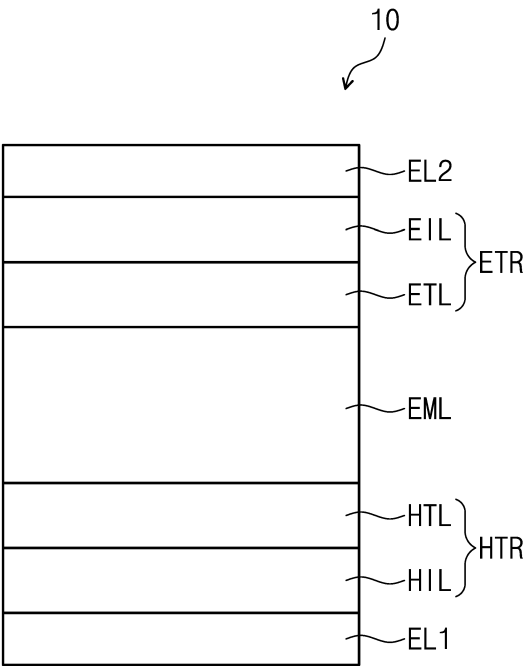
- [0279] 10 : 유기 전계 발광 소자                      EL1 : 제1 전극  
 EL2 : 제2 전극                                      HTR : 정공 수송 영역  
 EML : 발광층                                      ETR : 전자 수송 영역

## 도면

### 도면1



도면2



도면3

