



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0055872
(43) 공개일자 2019년05월24일

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

(52) CPC특허분류
C07F 7/0816 (2013.01)
C09K 11/06 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-0152588

(22) 출원일자 2017년11월15일

심사청구일자 없음

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

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

(74) 대리인
특허법인 고려

전체 청구항 수 : 총 20 항

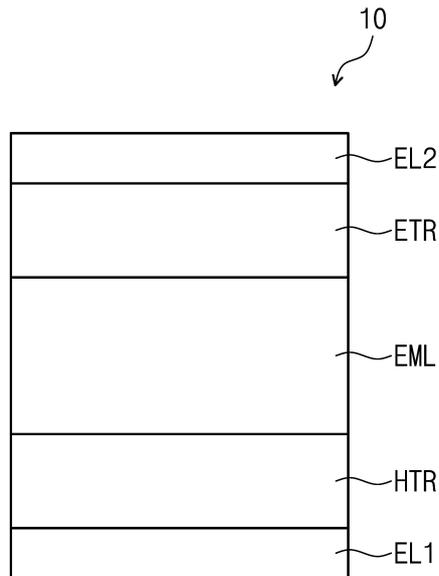
(54) 발명의 명칭 합질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

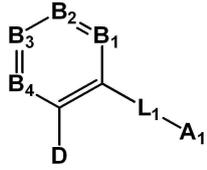
본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1

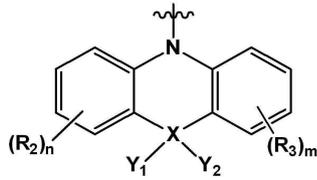


[화학식 1]



화학식 1에서, B₁ 내지 B₄는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고, A₁은 전자 수용성기이며, D는 하기 화학식 2로 표시되는 전자 공여성기이다.

[화학식 2]



화학식 2에서, X는 Si 또는 Ge이다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/0094 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5056 (2013.01)

H01L 51/5072 (2013.01)

C09K 2211/104 (2013.01)

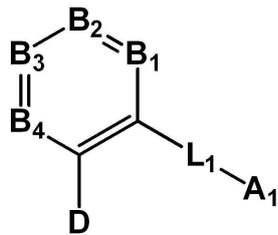
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

B₁ 내지 B₄는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고,

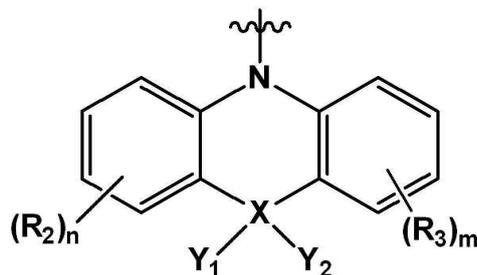
R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폰시드기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로고리기이며,

L₁은 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴렌기이고,

A₁은 전자 수용성기이며,

D는 하기 화학식 2로 표시되는 전자 공여성기이다:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X는 Si 또는 Ge이고,

Y₁ 및 Y₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 이상 50 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴기이며,

R₂ 및 R₃는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치

환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 설폭시기, 치환 또는 비치환된 술폰닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

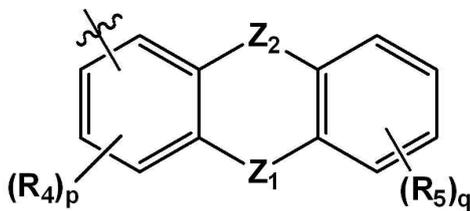
n 및 m은 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

청구항 2

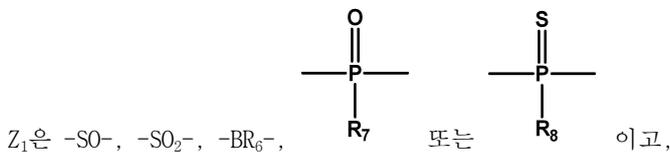
제1항에 있어서,

A₁은 시아노기, 불소 원자, 플루오로알킬기, 플루오로아릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 설폭시드, 치환 또는 비치환된 설폰닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 합질소 헤테로아릴기, 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 것인 합질소 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,



Z₂는 O, S, 또는 NAr이며,

Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

R₆ 내지 R₈은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 설폭시드기, 치환 또는 비치환된 설폰닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

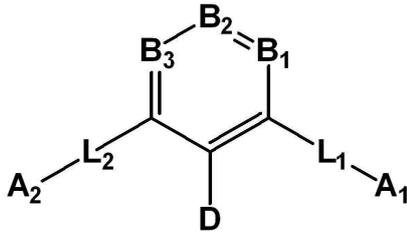
R₄ 및 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, p는 0 이상 3의 정수이며, q는 0 이상 4의 정수이다.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 화학식 1이 하기 화학식 1-1로 표시되는 합질소 화합물:

[화학식 1-1]



상기 화학식 1-1에서,

L₂는 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴렌기이고,

A₂는 전자 수용성기이며,

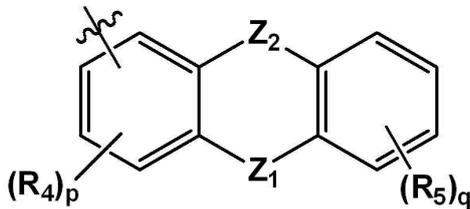
B₁ 내지 B₃ 및 D는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 4

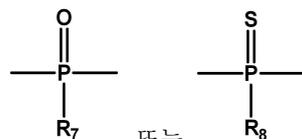
제3항에 있어서,

A₂는 시아노기, 불소 원자, 플루오로알킬기, 플루오로아릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로아릴기, 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 것인 함질소 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,



Z₁은 -SO-, -SO₂-, -BR₆- 이고,

Z₂는 O, S, 또는 NAr이며,

Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

R₆ 내지 R₈은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

R₄ 및 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치

환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

p는 0 이상 3의 정수이며, q는 0 이상 4의 정수이다.

청구항 5

제1항에 있어서,

Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 이소프로필기인 것인 함질소 화합물.

청구항 6

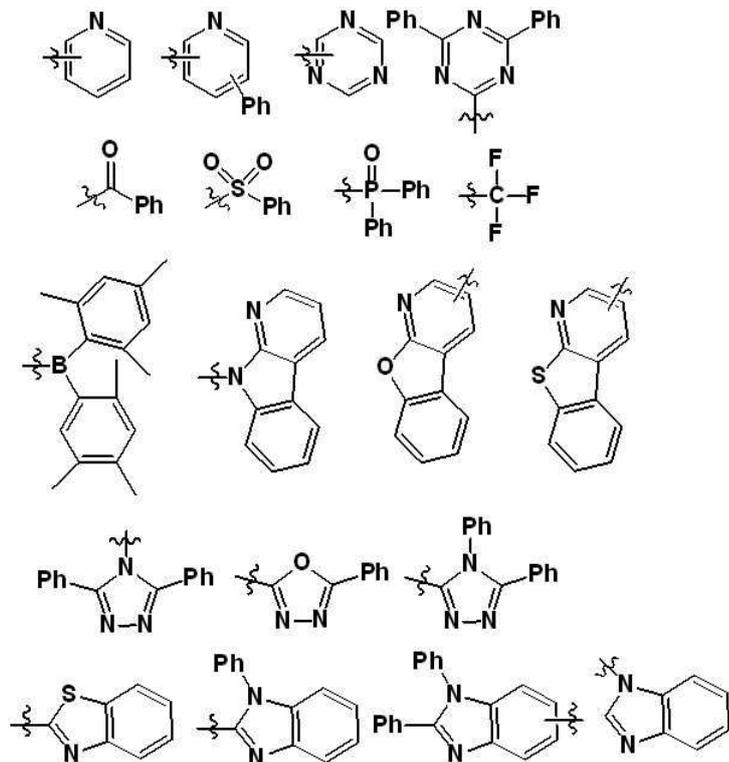
제5항에 있어서,

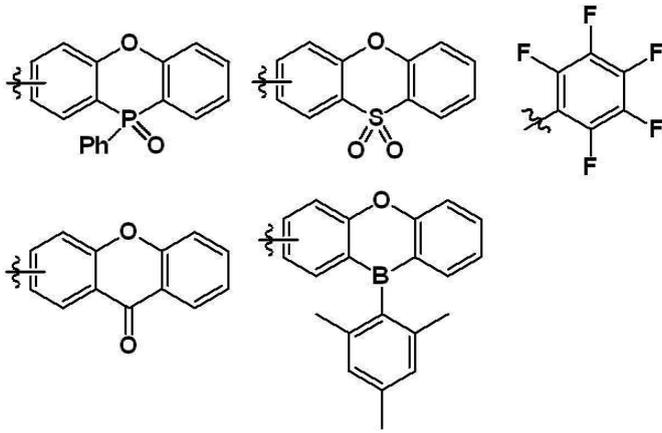
Y_1 및 Y_2 가 서로 동일한 것인 함질소 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

A_1 은 시아노기, 불소 원자, 또는 하기 구조식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 함질소 화합물:





상기 구조식들에서 Ph는 페닐기를 의미한다.

청구항 8

제1항에 있어서,

A₁은 치환 또는 비치환된 트리아진기, 또는 치환 또는 비치환된 카보닐기인 것인 함질소 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

L₁은 직접 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐렌기인 것인 함질소 화합물.

청구항 10

제1항에 있어서,

B₁ 내지 B₄ 중 N의 개수는 0 또는 1인 것인 함질소 화합물.

청구항 11

제1항에 있어서,

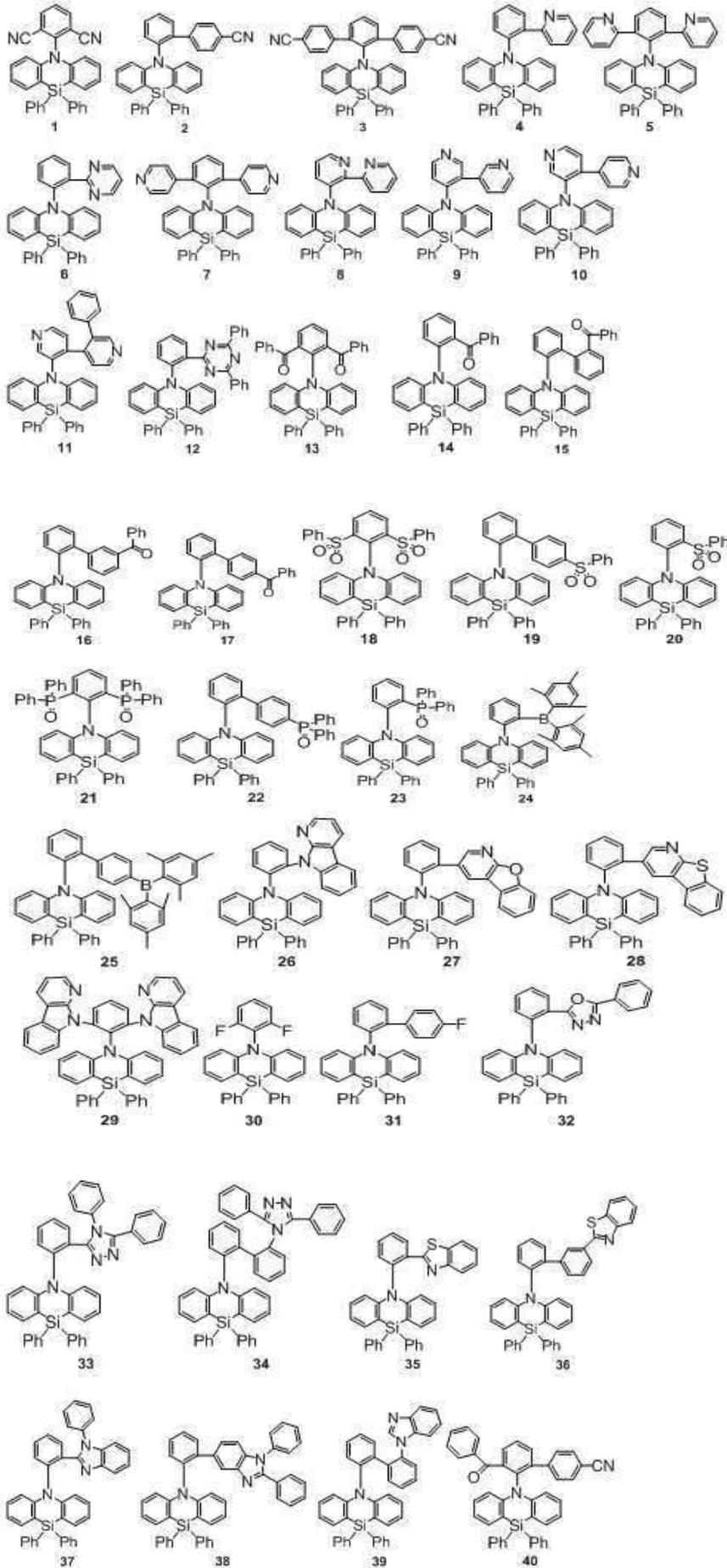
상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 최저 여기 일중항 에너지 준위(S1) 및 최저 여기 삼중항 에너지 준위(T1) 차이의 절대 값이 0.2eV 이하인 것인 함질소 화합물.

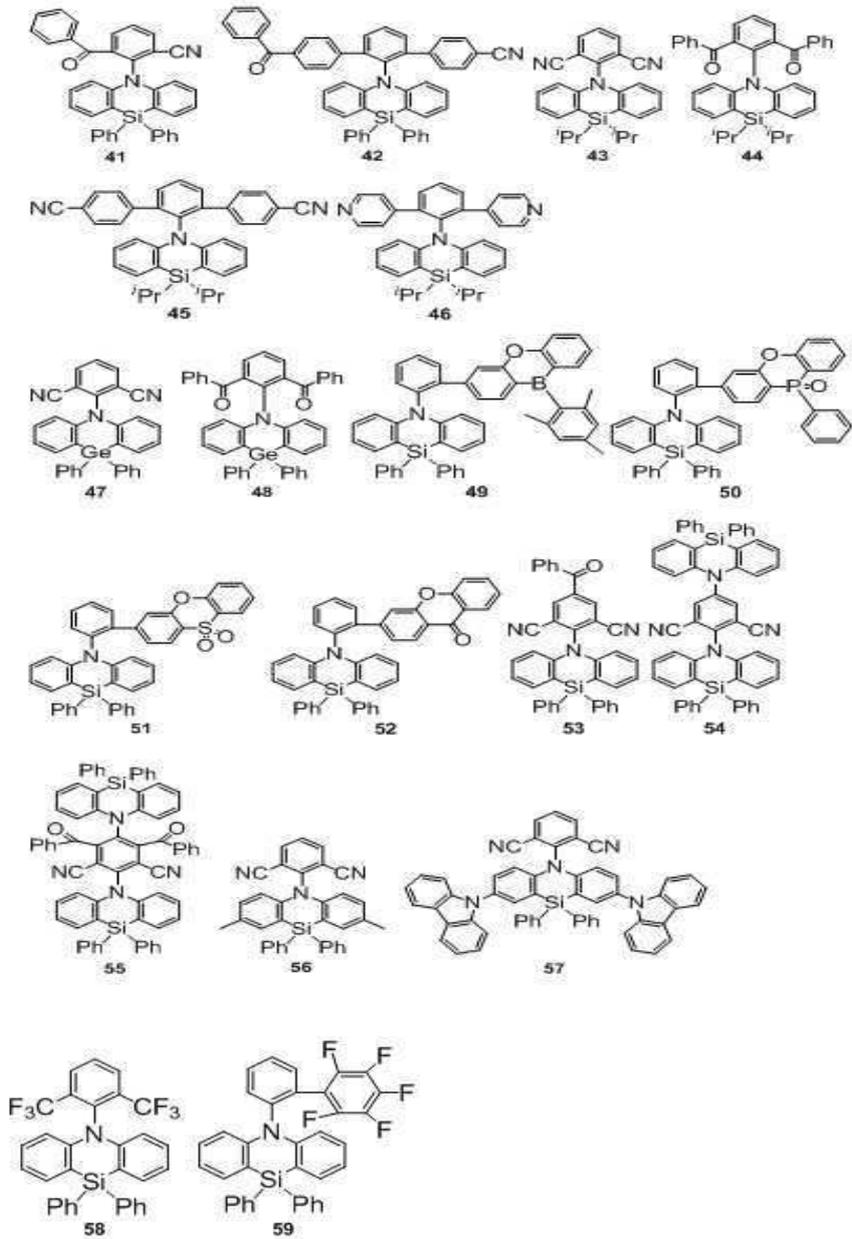
청구항 12

제1항에 있어서,

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

[화합물군 1]





청구항 13

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

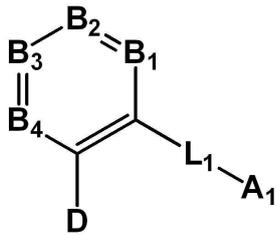
상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

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

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

B₁ 내지 B₄는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고,

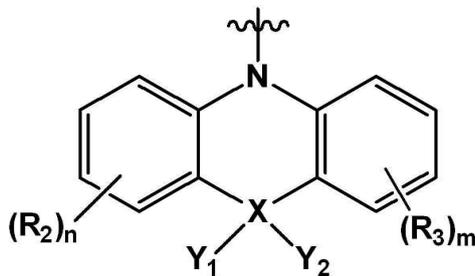
R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폰시드기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로고리기이며,

L₁은 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴렌기이고,

A₁은 전자 수용성기이며,

D는 하기 화학식 2로 표시되는 전자 공여성기이다:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X는 Si 또는 Ge이고,

Y₁ 및 Y₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 설폰시기, 치환 또는 비치환된 술폰기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 이상 50 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴기이며,

R₂ 및 R₃는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

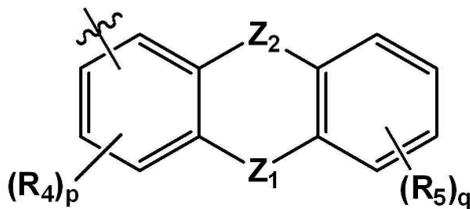
n 및 m은 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

청구항 14

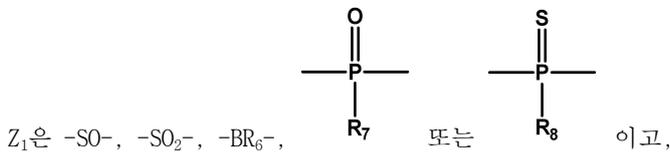
제13항에 있어서,

A₁은 시아노기, 불소 원자, 플루오로알킬기, 플루오로아릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로아릴기, 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,



Z₂는 O, S, 또는 NAr이며,

Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

R₆ 내지 R₈은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

R₄ 및 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 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 헤테로아릴기이고,

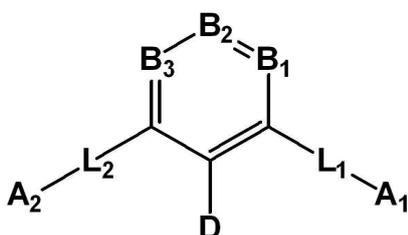
p는 0 이상 3의 정수이며, q는 0 이상 4의 정수이다.

청구항 15

제13항에 있어서,

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

[화학식 1-1]



상기 화학식 1-1에서,

L_2 는 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴렌기이고,

A_2 는 전자 수용성기이며,

B_1 내지 B_3 및 D 는 청구항 13에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 16

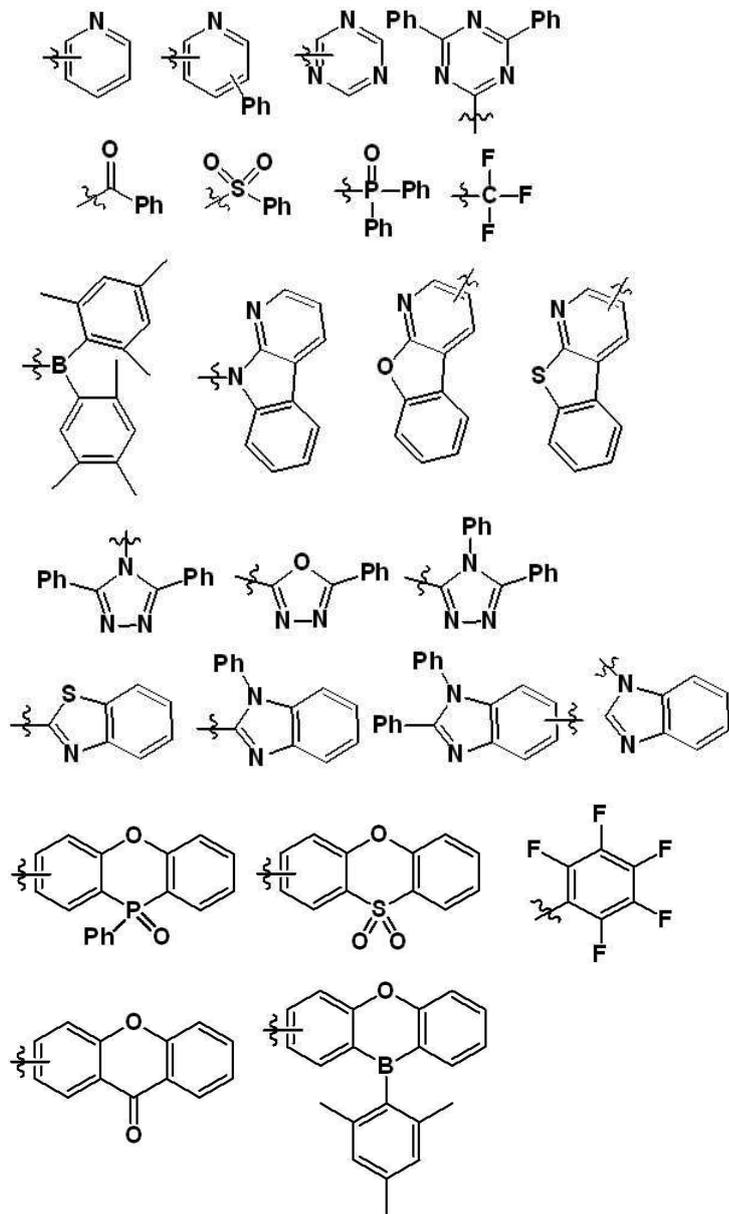
제13항에 있어서,

Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 이소프로필기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 17

제13항에 있어서,

A_1 은 시아노기, 불소 원자, 또는 하기 구조식들 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:



상기 구조식들에서 Ph는 페닐기를 의미한다.

청구항 18

제13항에 있어서,

상기 발광층은 열 활성 지연 형광을 방사하는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 19

제13항에 있어서,

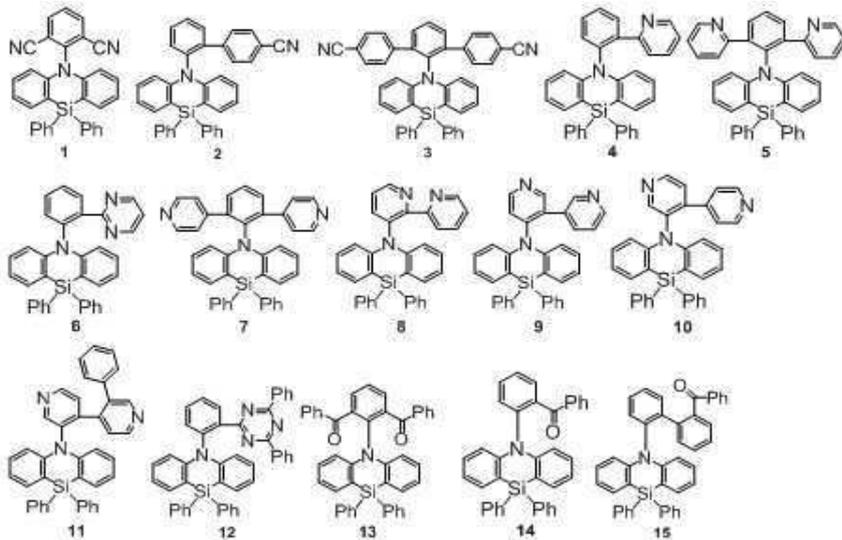
A₁은 치환 또는 비치환된 트리아진기, 또는 치환 또는 비치환된 카보닐기인 것인 유기 전계 발광 소자.

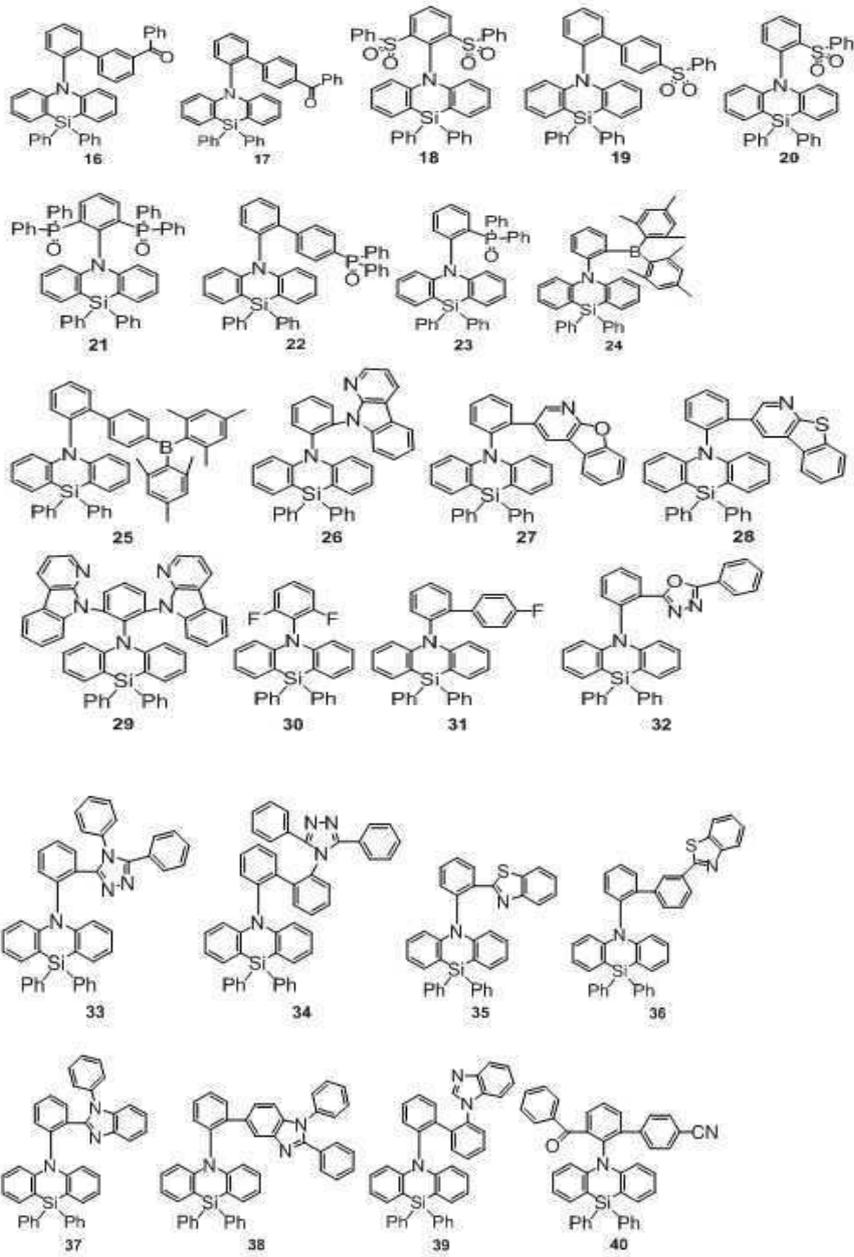
청구항 20

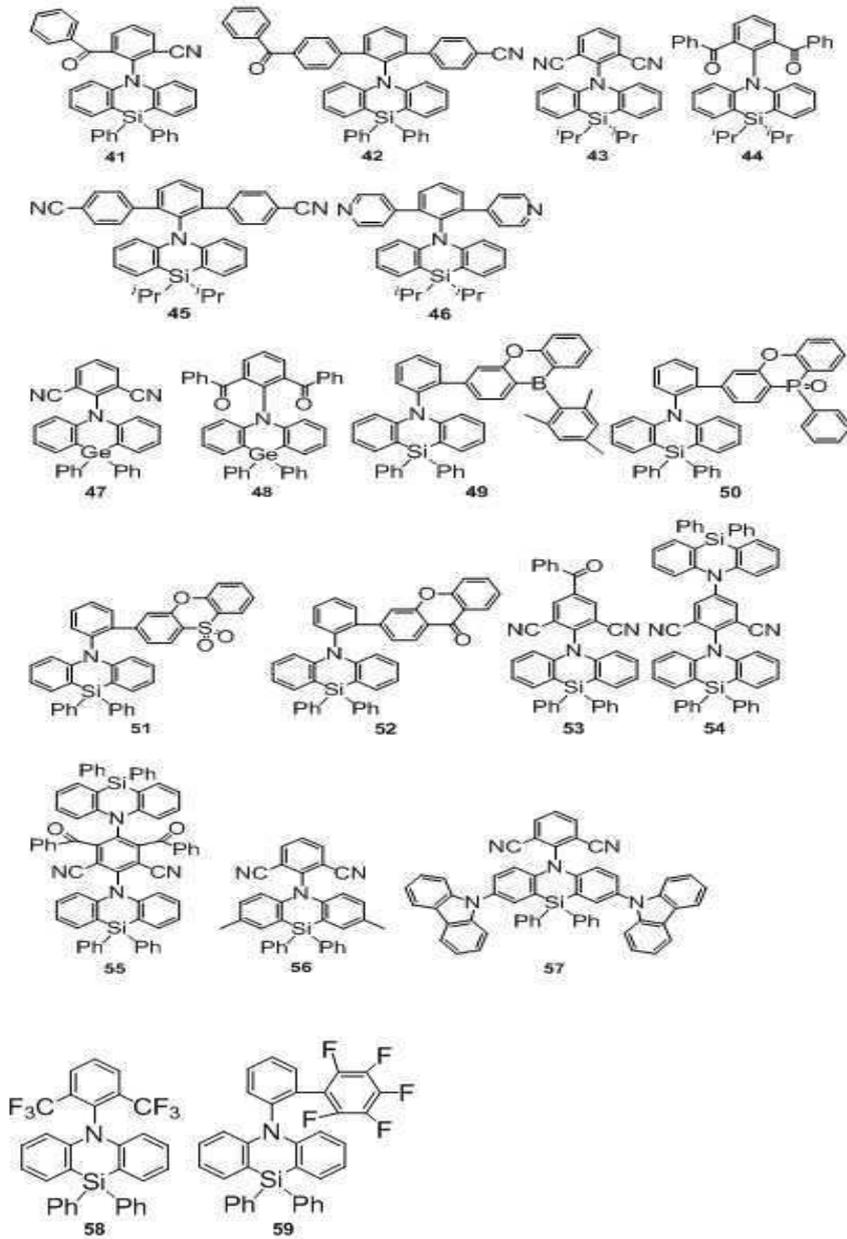
제13항에 있어서,

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

[화합물군 1]







발명의 설명

기술분야

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

배경기술

[0002] 최근, 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 표시 장치(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 왕성하게 이루어져 왔다. 유기 전계 발광 표시 장치는 액정 표시 장치 등과는 다르고, 제1 전극 및 제2 전극으로부터 주입된 정공 및 전자를 발광층에 있어서 재결합시킴으로써, 발광층에 있어서 유기 화합물을 포함하는 발광 재료를 발광시켜서 표시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

[0003] 유기 전계 발광 소자를 표시 장치에 응용함에 있어서는, 유기 전계 발광 소자의 저 구동 전압화, 고 발광 효율화 및 장수명화가 요구되고 있으며, 이를 안정적으로 구현할 수 있는 유기 전계 발광 소자용 재료 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

[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 지

연 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

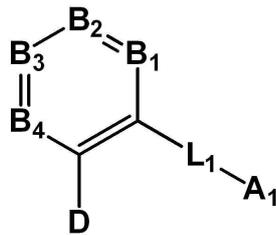
해결하려는 과제

[0005] 본 발명은 합질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0006] 본 발명의 일 실시예는 하기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물을 제공한다.

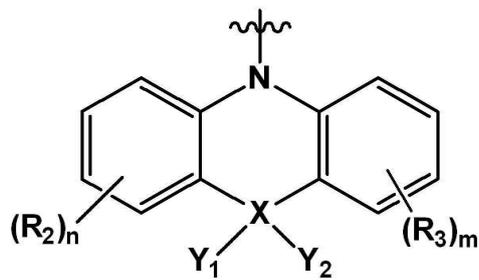
[0007] [화학식 1]



[0008]

[0009] 상기 화학식 1에서, B₁ 내지 B₄는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고, R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폰시기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로고리기이며, L₁은 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴렌기이고, A₁은 전자 수용성기이며, D는 하기 화학식 2로 표시되는 전자 공여성기이다.

[0010] [화학식 2]

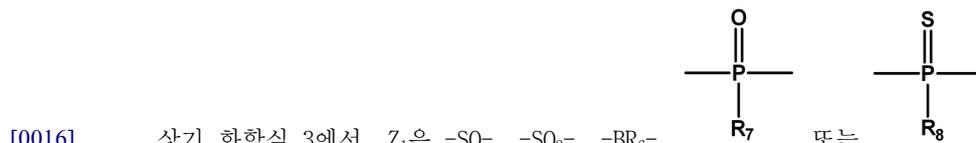
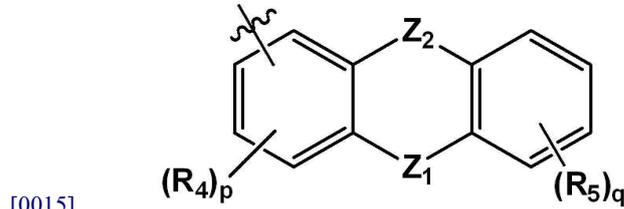


[0011]

[0012] 상기 화학식 2에서, X는 Si 또는 Ge이고, Y₁ 및 Y₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 이상 50 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴기이며, R₂ 및 R₃는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 설폰시기, 치환 또는 비치환된 술포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, n 및 m은 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

[0013] A₁은 시아노기, 불소 원자, 플루오로알킬기, 플루오로아릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 합질소 헤테로아릴기, 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 것일 수 있다.

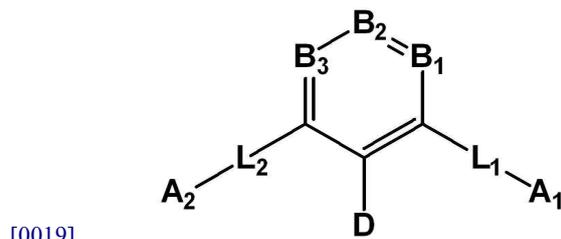
[0014] [화학식 3]



[0016] 상기 화학식 3에서, Z₁은 -SO-, -SO₂-, -BR₆-, 또는 이고, Z₂는 O, S, 또는 NAr이며, Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, R₆ 내지 R₈은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, R₄ 및 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 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 헤테로아릴기이고, p는 0 이상 3의 정수이며, q는 0 이상 4의 정수이다.

[0017] 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

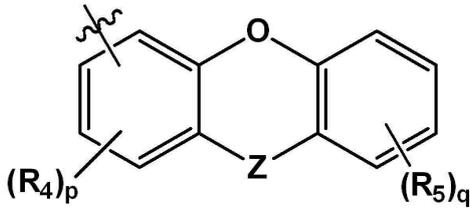
[0018] [화학식 1-1]



[0020] 상기 화학식 1-1에서, L₂는 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴렌기이고, A₂는 전자 수용성기이며, B₁ 내지 B₃ 및 D는 전술한 바와 동일하다.

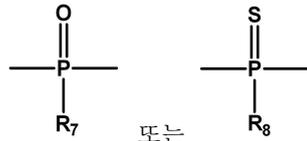
[0021] A₂는 시아노기, 불소 원자, 플루오로알킬기, 플루오로아릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 합질소 헤테로아릴기, 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 것일 수 있다.

[0022] [화학식 3]



[0023]

[0024] 상기 화학식 3에서,

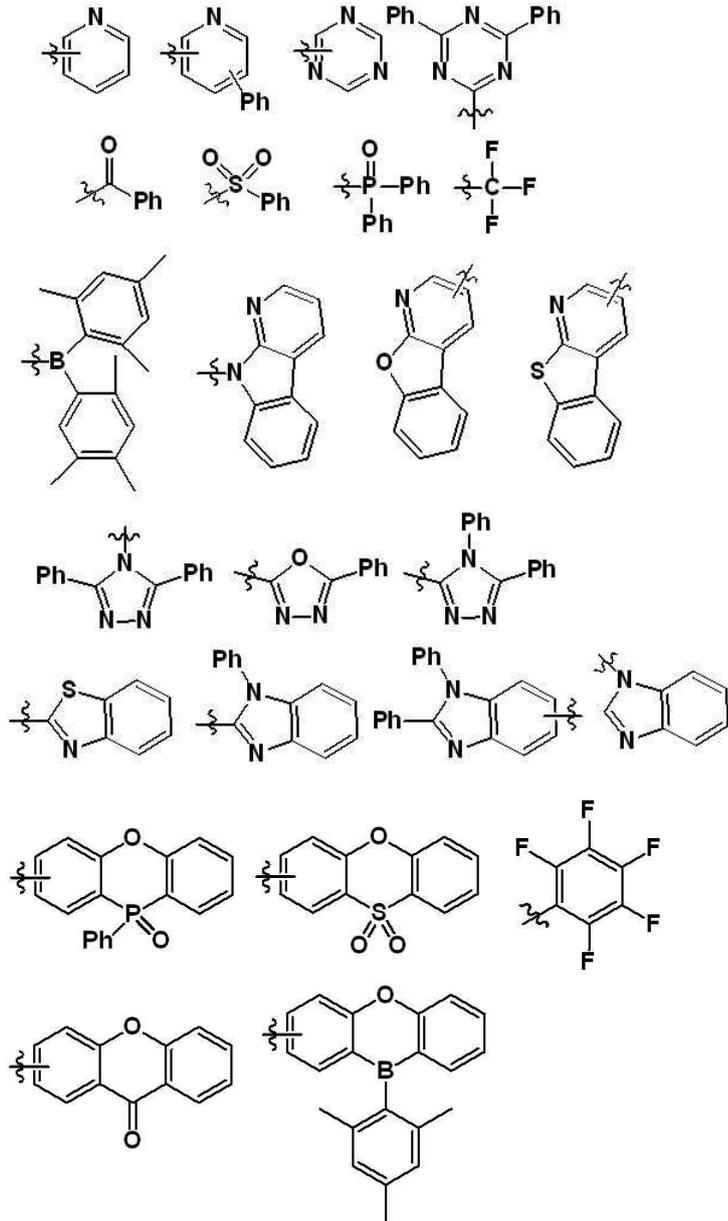


[0025] Z_1 은 $-SO-$, $-SO_2-$, $-BR_6-$ 또는 $\begin{matrix} O \\ || \\ -P- \\ | \\ R_7 \end{matrix}$ 또는 $\begin{matrix} S \\ || \\ -P- \\ | \\ R_8 \end{matrix}$ 이고, Z_2 는 O, S, 또는 NAr이며, Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, R_6 내지 R_8 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, R_4 및 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 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 헤테로아릴기이고, p는 0 이상 3의 정수이며, q는 0 이상 4의 정수이다.

[0026] Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 이소프로필기인 것일 수 있다.

[0027] Y_1 및 Y_2 가 서로 동일한 것일 수 있다.

[0028] A₁은 시아노기, 불소 원자, 또는 하기 구조식들 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.



[0030]

[0031] 상기 구조식들에서 Ph는 페닐기를 의미한다.

[0032] A₁은 치환 또는 비치환된 트리아진기, 또는 치환 또는 비치환된 카보닐기인 것일 수 있다.

[0033] L₁은 직접 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐렌기인 것일 수 있다.

[0034] B₁ 내지 B₄ 중 N의 개수는 0 또는 1인 것일 수 있다.

[0035] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 최저 여기 일중항 에너지 준위(S1) 및 최저 여기 삼중항 에너지 준위(T1) 차이의 절대 값이 0.2eV 이하인 것일 수 있다.

[0036] 본 발명의 일 실시예는 제1 전극, 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층, 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역, 및 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고, 발광층이 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물을 포함하는 것이 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0037] 발광층은 열 활성화 지연 형광을 방사하는 것일 수 있다.

발명의 효과

[0038] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 사용함으로써 유기 전계 발광 소자의 효율 향상이 가능하다.

[0039] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 사용함으로써 유기 전계 발광 소자의 장수명화가 가능하다.

도면의 간단한 설명

[0040] 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

[0041] 이상의 본 발명의 목적들, 다른 목적들, 특징들 및 이점들은 첨부된 도면 및 이하의 바람직한 실시예들을 통해서 쉽게 이해될 것이다. 그러나 본 발명은 여기서 설명되는 실시예들에 한정되지 않고 다른 형태로 구체화될 수도 있다. 오히려, 여기서 소개되는 실시예들은 개시된 내용이 철저하고 완전해질 수 있도록 그리고 통상의 기술자에게 본 발명의 사상이 충분히 전달될 수 있도록 하기 위해 제공되는 것이다.

[0042] 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.

[0043] 본 명세서에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "하부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.

[0044] 본 명세서에서,  는 연결되는 부위를 의미한다.

[0045] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 붕소기(보릴기), 포스핀기, 알킬기, 아랄킬기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1 개 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.

[0046] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.

[0047] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 4 이하이다. 부피가 큰 치환기가 필요한 경우에 알킬기의 탄소수는 예를 들어, 3 이상 20 이하일 수 있다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2- 에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸헥사데실기,

2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0048] 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 50 이하, 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, 퀴크페닐기, 섹시페닐기, 바이페닐렌기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0049] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수도 있다. 플루오레닐기가 치환되는 경우의 예시는 하기와 같다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.



[0051] 본 명세서에서, 알콕시기, 아랄킬기 및 알킬티오기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다.

[0052] 본 명세서에서, 아릴옥시기, 아랄킬기 및 아릴티오기 중 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다.

[0053] 본 명세서에서, 헤테로고리기는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리를 포함할 수 있고, 방향족 헤테로 고리는 헤테로아릴기를 의미하는 것일 수 있다. 헤테로고리기는 단환 또는 다환일 수 있다. 헤테로고리기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 예를 들어, 탄소수 2 이상 30 이하, 또는 2 이상 20 이하일 수 있다.

[0054] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 헤테로 원자로 O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기가 헤테로 원자를 2개 포함할 경우, 2개의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 50 이하, 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하이다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로아릴기 또는 다환식 헤테로아릴기일 수 있다. 다환식 헤테로아릴기는 예를 들어, 2환 또는 3환 구조를 갖는 것일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 페녹사진기, 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.

[0055] 본 명세서에서, 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0056] 본 명세서에서, 헤테로아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0057] 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.

[0058] 본 명세서에서, 붕소기(보릴기)는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0059] 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.

[0060] 본 명세서에서, 아미노기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아미노기는 알킬 아미노기 및 아릴 아미노기를 포함할 수 있다. 아미노기의 예로는 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 페닐아미노기,

디페닐아미노기, 나프틸아미노기, 9-메틸-안트라세닐아미노기, 트리페닐아미노기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0061] 본 명세서에서, 포스핀 옥사이드기는 예를 들어, 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환된 것일 수 있다.

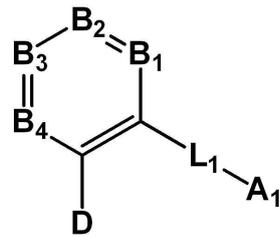
[0062] 본 명세서에서, 포스핀 설파이드기는 예를 들어, 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환된 것일 수 있다.

[0063] 본 명세서에서, 치환 또는 비치환된 카보닐기는 예를 들어, 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환된 것일 수 있다.

[0064] 먼저, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물에 대해 설명한다.

[0065] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0066] [화학식 1]



[0067]

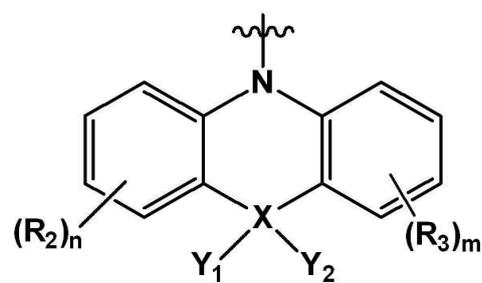
[0068] 화학식 1에서, B₁ 내지 B₄는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고, R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로고리기이다.

[0069] 화학식 1에서, L₁은 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴렌기이다. 화학식 1에서 L₁이 직접 결합인 경우, A₁은 B₁ 내지 B₄를 포함하는 고리에 직접 결합된다.

[0070] 화학식 1에서, A₁은 전자 수용성기이고, D는 전자 공여성기이다. 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 B₁ 내지 B₄를 포함하는 고리에 전자 수용성기와 전자 공여성기가 오르쏘(ortho) 관계로 치환되어 있는 구조를 갖는다.

[0071] 보다 구체적으로, 화학식 1에서 D는 하기 화학식 2로 표시되는 전자 공여성기이다.

[0072] [화학식 2]



[0073]

[0074] 화학식 2에서, X는 Si 또는 Ge이고, Y₁ 및 Y₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 이상 50 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴기이다.

[0075] 화학식 2에서, Y₁ 및 Y₂는 비교적 부피가 큰 치환기이다. 예를 들어, 탄소수가 3 이상인 알킬기, 또는 고리 형태

의 아릴기 또는 헤테로아릴기이다.

[0076] 화학식 2에서, R₂ 및 R₃는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 설폭시기, 치환 또는 비치환된 술폰닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, n 및 m은 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다.

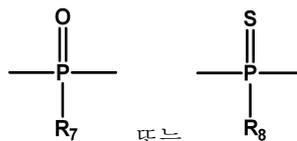
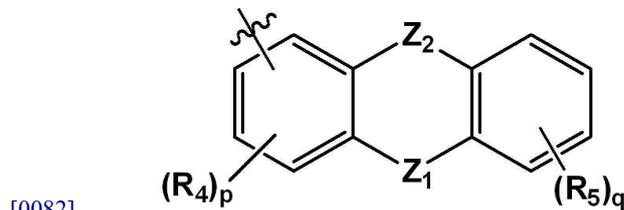
[0077] n이 1일 경우, R₂는 수소 원자 외의 치환기로 치환된 것일 수 있다. m이 1일 경우, R₃는 수소 원자 외의 치환기로 치환된 것일 수 있다.

[0078] n이 2 이상일 경우, 복수의 R₂는 서로 동일하거나 상이하다. m이 2 이상일 경우, 복수의 R₃는 서로 동일하거나 상이하다.

[0079] n 및 m은 각각 0일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, n 및 m이 각각 1이고, R₂ 및 R₃가 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기인 것일 수 있다. 예를 들어, n 및 m이 각각 1이고, R₂ 및 R₃가 각각 치환 또는 비치환된 메틸기인 것일 수 있다.

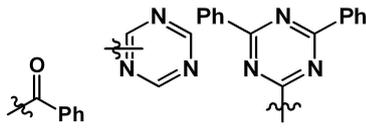
[0080] 전자 수용성기인 A₁은 예를 들어, 시아노기, 불소 원자, 플루오로알킬기, 플루오로아릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 설폭시드, 치환 또는 비치환된 설폰닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로아릴기, 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0081] [화학식 3]



[0083] 상기 화학식 3에서, Z₁은 -SO-, -SO₂-, -BR₆-, 이고, Z₂는 O, S, 또는 NAr이며, Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, R₆ 내지 R₈은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 설폭시드기, 치환 또는 비치환된 설폰닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, R₄ 및 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 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 헤테로아릴기이고, p는 0 이상 3의 정수이며, q는 0 이상 4의 정수이다.

[0084] p가 1인 경우, R₄는 수소 원자 외의 치환기로 치환된 것일 수 있다. q가 1인 경우, R₅는 수소 원자 외의 치환기로 치환된 것일 수 있다.



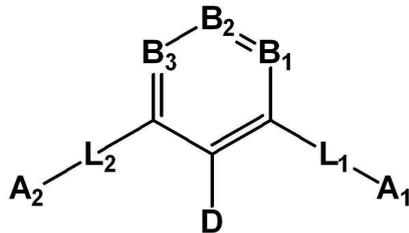
[0093]

[0094] 상기 구조식들에서 Ph는 치환 또는 비치환된 페닐기를 의미하며, 예를 들어 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0095] Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 프로필기일 수 있다. Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 이소프로필기일 수 있다. 이 경우, Y_1 및 Y_2 는 서로 동일한 것일 수 있다. 예를 들어, Y_1 및 Y_2 는 각각 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. 또 다른 예로, Y_1 및 Y_2 는 각각 치환 또는 비치환된 이소프로필기일 수 있다.

[0096] 화학식 1은 예를 들어, 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0097] [화학식 1-1]



[0098]

[0099] 화학식 1-1에서, L_2 는 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 50 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 50 이하의 헤테로아릴렌기이다. L_2 는 L_1 과 동일하거나 상이하다. L_2 가 직접 결합인 경우, A_2 는 B_1 내지 B_3 를 포함하는 고리에 직접 결합된다.

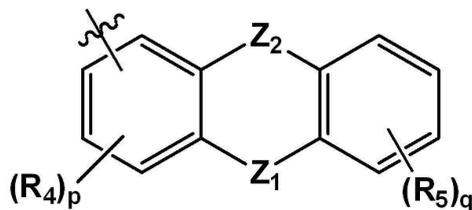
[0100] L_2 는 예를 들어, 직접 결합, 또는 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다.

[0101] 화학식 1-1에서, A_2 는 전자 수용성기이며, 이 경우 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 2개의 전자 수용성기를 포함한 구조를 갖는다. A_2 는 A_1 과 동일하거나 상이하다.

[0102] 화학식 1-1에서, B_1 내지 B_3 및 D 는 전술한 바와 동일하다.

[0103] A_2 는 시아노기, 불소 원자, 플루오로알킬기, 플루오로아릴기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로아릴기, 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0104] [화학식 3]



[0105]

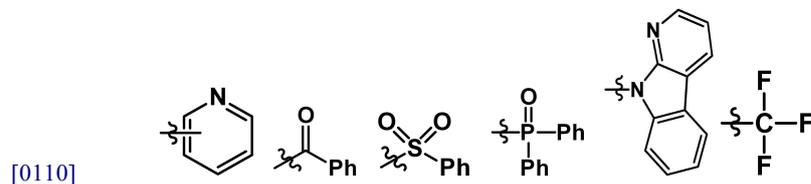
[0106] 상기 화학식 3에서, Z_2 는 O, S, 또는 NAr이며, Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, R_6 내지 R_8 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 보릴기, 치환 또는 비치환된 카보닐기, 치환 또는 비치환된 술폭시드기, 치환 또는 비치환된 설포닐기, 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기, 치환 또는 비치환된 포스핀 설파이드기, 치환

또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아랄킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, R₄ 및 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 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 헤테로아릴기이고, p는 0 이상 3의 정수이며, q는 0 이상 4의 정수이다.

[0107] p가 1인 경우, R₄는 수소 원자 외의 치환기로 치환된 것일 수 있다. q가 1인 경우, R₅는 수소 원자 외의 치환기로 치환된 것일 수 있다. p가 2 이상일 경우, 복수의 R₄는 서로 동일하거나 상이하다. q가 2 이상일 경우, 복수의 R₅는 서로 동일하거나 상이하다.

[0108] A₂가 치환 또는 비치환된 함질소 헤테로아릴기인 경우, 예를 들어, 단환, 2환 또는 3환 고리 구조를 갖는 것일 수 있다.

[0109] A₂는 시아노기, 불소 원자, 하기 구조식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

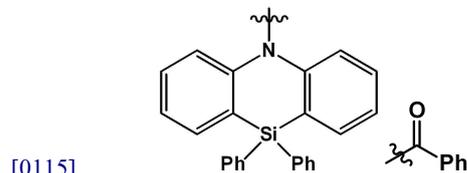


[0111] 상기 구조식들에서 Ph는 치환 또는 비치환된 페닐기를 의미하며, 예를 들어 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0112] 화학식 1에서, L₁은 직접 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 2가의 바이페닐렌기인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0113] 화학식 1에서, B₁ 내지 B₄ 중 N의 개수는 0 또는 1일 수 있다. 다시 말해, B₁ 내지 B₄가 각각 독립적으로 CR₁으로 표시되거나, B₁ 내지 B₄ 중 하나가 N이고, 나머지가 각각 독립적으로 CR₁으로 표시될 수 있다. 즉, B₁ 내지 B₄를 포함하는 고리는 페닐기이거나 피리딘기일 수 있다. B₁ 내지 B₄가 각각 독립적으로 CR₁으로 표시되는 경우, R₁의 종류를 조절하여, 전자 공여성기 또는 전자 수용성기의 개수를 조절할 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 전자 공여성기를 2개 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 전자 수용성기를 2개 포함하는 것일 수 있다.

[0114] 화학식 1에서, B₂가 CR₁이고, R₁은 수소 원자 이외의 치환기로 치환된 것일 수 있다. 예를 들어, B₂가 CR₁이고, R₁이 치환 또는 비치환된 카보닐기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로고리기인 것일 수 있다. 예를 들어, B₂가 CR₁이고, R₁은 하기 구조식들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

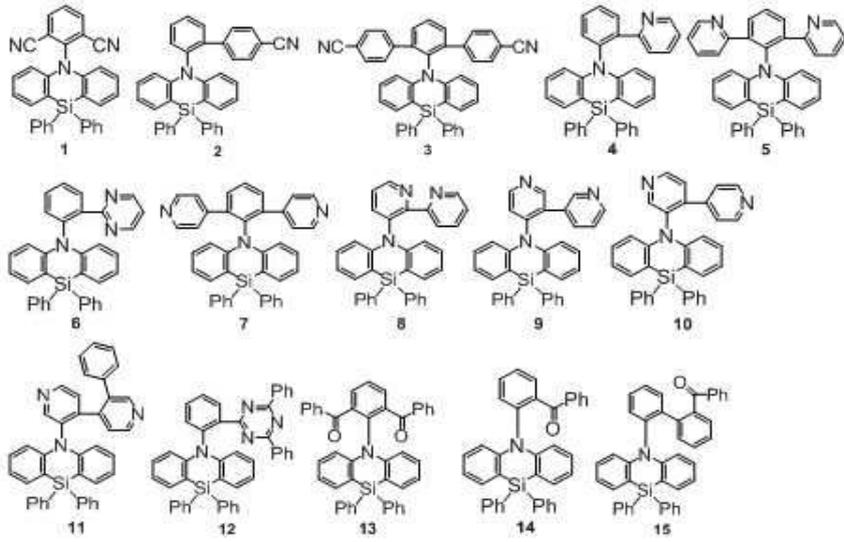


[0116] 상기 구조식들에서 Ph는 치환 또는 비치환된 페닐기를 의미하며, 예를 들어 비치환된 페닐기일 수 있다.

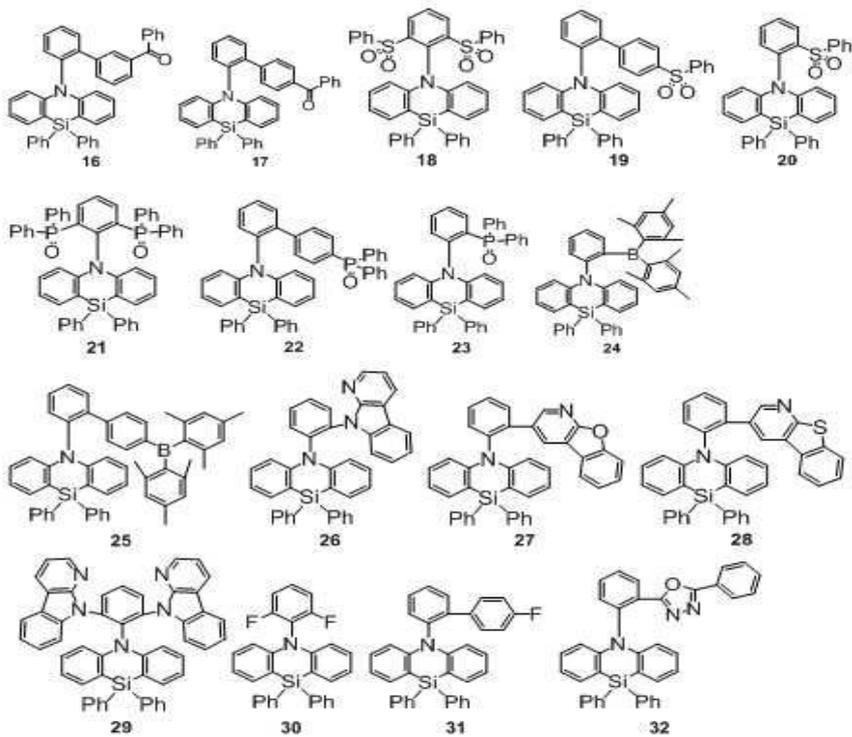
[0117] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 최저 여기 일중항 에너지 준위(S1) 및 최저 여기 삼중항 에너지 준위(T1) 차이의 절대 값이 0.2eV 이하인 것일 수 있다.

[0118] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

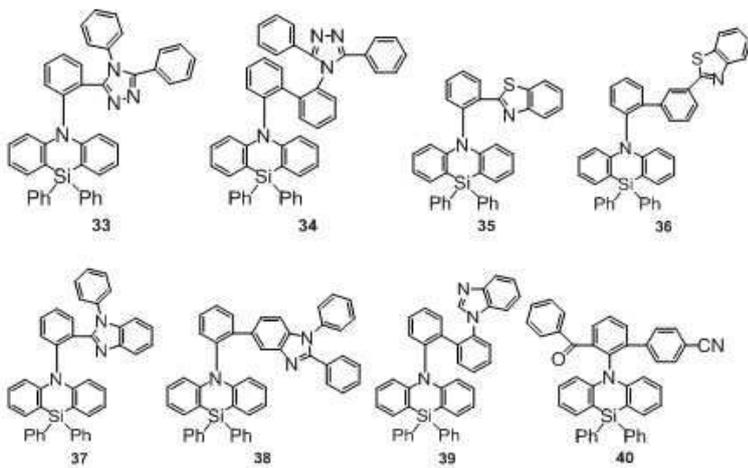
[0119] [화합물군 1]



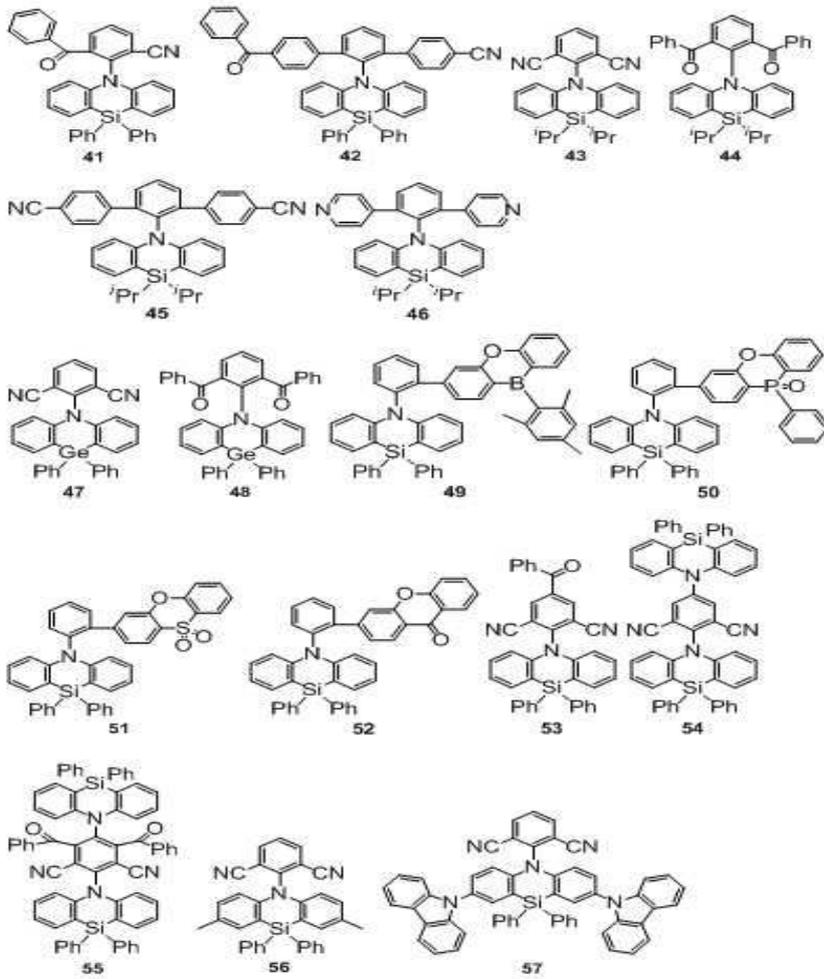
[0120]



[0121]



[0122]



[0123]

[0124]

[0125]

[0126]

[0127]

[0128]

상기 화합물들 구조에서 Ph는 치환 또는 비치환된 페닐기를 의미하며, iPr은 치환 또는 비치환된 이소프로필기를 의미한다.

본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 전자 공여성기와 전자 수용성기를 포함한다. 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 전자 공여성기와 전자 수용성기가 링커에 오르쏘(ortho) 관계로 치환되어 있어, 입체 장애로 인해 분자 구조가 뒤틀리게 되고, 이로 인해, 최저 여기 일중항 에너지 준위 및 최저 여기 삼중항 에너지 준위 차이가 작아지게 된다. 결과적으로, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 열 활성화 지연 형광(TADF, Thermally Activated Delayed Fluorescence)용 재료로 활용 가능하다. 또한, 전자 공여성기로 비교적 부피가 크며, 내구성이 높은 아자실린(azasilne)을 이용함으로써, 결과적으로 유기 전계 발광 소자의 고효율화 및 장수명화에 기여한다.

본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 470nm 미만의 파장 영역을 갖는 청색광을 발광하는 발광 재료로도 적용 가능하며, 예를 들어, 440nm 내지 약 470nm, 약 450nm 내지 약 470nm, 또는 약 460nm의 파장 영역을 갖는 심청색(deep blue) 광을 발광하는 발광 재료로 적용 가능하다.

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

- [0129] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물을 포함한다.
- [0130] 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.
- [0131] 도 1 내지 도 3을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함한다.
- [0132] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 화소 전극 또는 양극일 수 있다. 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등을 포함할 수 있다. 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다. 예를 들어, 제1 전극(EL1)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0133] 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.
- [0134] 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.
- [0135] 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.
- [0136] 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, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0137] 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.
- [0138] 정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine) 화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4"-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine), TDATA(4,4',4"-Tris(N,N'-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4"-tris(N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino)-triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diiphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.
- [0139] 정공 수송층(HTL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diiphenylbenzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 등을 포함할 수도 있다.
- [0140] 전자 저지층(EBL)은 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 예를 들어, N-

페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenyl-benzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMPD(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.

[0141] 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.

[0142] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 폴리리텐 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

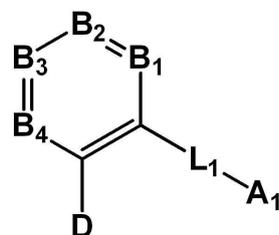
[0143] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

[0144] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)은 예를 들어 약 100Å 내지 약 1000Å 또는, 약 100Å 내지 약 300Å의 두께를 갖는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0145] 이하에서는, 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물이 발광층(EML)에 포함되는 것을 예를 들어 설명한다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 제공된 1층 이상의 유기층 중 적어도 하나의 층에 포함될 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 정공 수송 영역(HTR)에 포함되는 것일 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 정공 수송층(HTL) 또는 전자 저지층(EBL)에 포함되는 것일 수 있다.

[0146] 발광층(EML)은 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로, 발광층(EML)은 하기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물을 포함할 수 있다.

[0147] [화학식 1]



[0148]

[0149] 화학식 1에서, B₁ 내지 B₄, L₁, A₁, 및 D에 관한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바, 생략하도록 한다.

[0150] 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함할 수 있다. 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물 이외 공지의 재료를 더 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 스피로-DPVBi(spiro-DPVBi), 스피로-6P(spiro-6P, 2,2',7,7'-tetrakis(biphenyl-4-yl)-9,9'-spirobifluorene(spiro-sexiphenyl)), DSB(distyryl-benzene), DSA(distyryl-arylene), PFO(Polyfluorene)계 고분자 및 PPV(poly(p-

phenylene vinylene)계 고분자로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나를 포함하는 형광 물질을 더 포함할 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0151] 발광층(EML)은 형광 발광층일 수 있다. 발광층(EML)은 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다. 발광층(EML)은 열 활성화 지연 형광을 방사하는 발광층일 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)은 열 활성화 지연 형광을 통해 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다. 발광층(EML)은 예를 들어, 440nm 내지 약 470nm 또는 약 450nm 내지 약 470nm의 파장 영역을 갖는 심청색(deep blue) 광을 발광하는 것일 수 있다.

[0152] 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함하는 것일 수 있으며, 도펀트가 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 열 활성화 지연 형광 도펀트로서 포함하는 층일 수 있다. 이 경우, 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) 및 TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene) 중 적어도 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0153] 또한, 발광층(EML)은 공지의 호스트 재료를 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, Alq₃(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(n-vinylcabazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TCTA(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazolyl)-2,2'-dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), CP1(Hexaphenyl cyclotriposphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO₃ (Hexaphenylcyclotrisiloxane), DPSiO₄ (Octaphenylcyclotetra siloxane), PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 사용될 수 있다.

[0154] 발광층(EML)은 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물 이외에 공지의 열 활성화 지연 형광용 도펀트를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 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-phenoazine-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-BDAVBi), 페릴렌 및 그 유도체(예를 들어, 2, 5, 8, 11-Tetra-t-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체(예를 들어, 1, 1-dipyrene, 1, 4-dipyrenylbenzene, 1, 4-Bis(N, N-Diphenylamino)pyrene) 등의 2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene(TBP)) 등을 더 포함할 수 있다.

[0155] 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.

[0156] 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.

[0157] 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 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

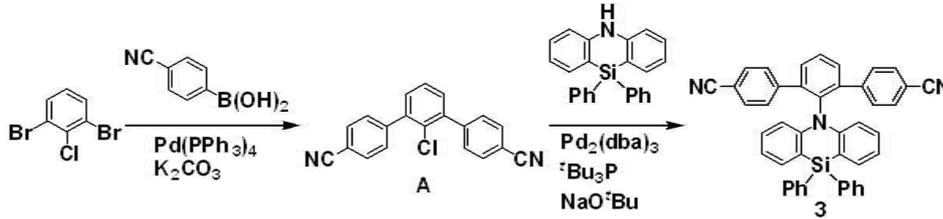
[0158] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

- [0159] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 Alq_3 (Tris(8-hydroxyquinolinato)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-ylphenyl)-9,10-dinaphthylanthracene), TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BALq(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,08)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq₂(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0160] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, LiQ(Lithium quinolate), Li₂O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI와 같은 할로겐화 금속 등이 사용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭(energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0161] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층(HBL)을 포함할 수 있다. 정공 저지층(HBL)은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), 또는 DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide) 등을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0162] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 공통 전극 또는 음극일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)이 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.
- [0163] 제2 전극(EL2)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들을 포함하는 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.
- [0164] 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.
- [0165] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.
- [0166] 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.
- [0167] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하며, 이로 인해 고효율화 및/또는 장수명화를 구현할 수 있다.
- [0168] 이하, 구체적인 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 예시에 불과하며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0169] (합성예)

[0170] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0171] 1. 화합물 3의 합성



[0172]

[0173] (화합물 A의 합성)

[0174] 아르곤(Ar) 분위기 하, 1000 mL의 삼구 플라스크에 1,3-dibromo-2-chlorobenzene 8.10 g (30.0 mmol)과 4-cyanophenylboronic acid 8.82 g (60.0 mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.69 g (0.6 mmol), K₂CO₃ 16.6 g (120.0 mmol), toluene 300 mL, ethanol 60 mL, 물 30 mL를 더하여 100°C에서 2시간 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 제거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체 화합물 A를 7.65 g (수율 81%) 얻었다.

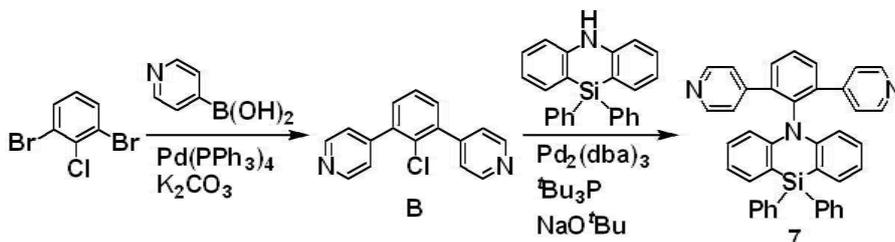
[0175] FAB-MS측정으로 측정된 화합물 A의 분자량은, 314이었다.

[0176] (화합물 3의 합성)

[0177] 아르곤(Ar) 분위기 하, 100 mL의 삼구 플라스크에 화합물 A 2.55 g (8.1 mmol)과 10,10-diphenyl-5,10-dihydrodibenzo[b,e][1,4]azasiline 2.83 g (8.1 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.07 g (0.08 mmol), (t-Bu)₃P 0.13 g (0.65 mmol), NaOtBu 0.78 g (8.1 mmol)를 더하여, 40 mL 톨루엔 용매 중에 120°C로 8시간 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 유기층을 분취하여 용매 제거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체 화합물 3을 3.66 g (수율72%) 얻었다.

[0178] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 3의 분자량은, 627이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃)측정으로 측정된 화합물 3의 Chemical Shift 값(δ)은, 8.20 (2H), 7.85-7.83 (8H), 7.47-7.37 (15H), 7.28 (2H), 7.03 (2H)이었다.

[0180] 2. 화합물 7의 합성



[0181]

[0182] (화합물 B의 합성)

[0183] 아르곤(Ar) 분위기 하, 1000 mL의 삼구 플라스크에 1,3-dibromo-2-chlorobenzene 8.10 g (30.0 mmol) 과 4-pyridylboronic acid 7.38 g (60.0 mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.69 g (0.6 mmol), K₂CO₃ 16.6 g (120.0 mmol), dioxane 300 mL를 더하여 120°C로 2시간 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 제거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 B를 4.71 g (수율 59%) 얻었다.

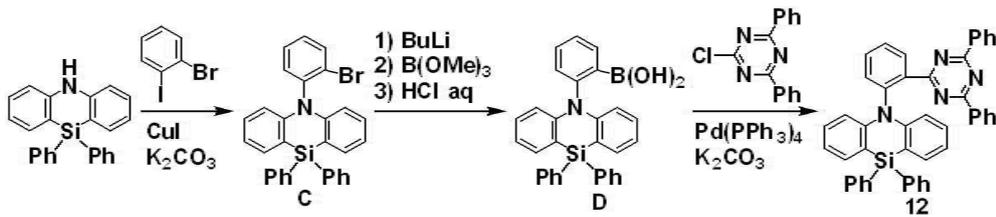
[0184] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 B의 분자량은 266이었다.

[0185] (화합물 7의 합성)

[0186] 아르곤(Ar) 분위기 하, 100 mL의 삼구 플라스크에 화합물 B 1.57 g (5.9 mmol) 과 10,10-diphenyl-5,10-dihydrodibenzo[b,e][1,4]azasiline 2.83g (5.9 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.05 g (0.06 mmol), (t-Bu)₃P 0.10 g (0.47 mmol), NaOtBu 0.57 g (5.9 mmol)를 더하여, 30 mL toluene 용매 중에서 120℃로 8시간 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 7을 2.19 g (수율64%) 얻었다.

[0187] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 7의 분자량은579이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃)측정으로 측정된 화합물 7의 Chemical Shift 값(δ)은, 8.71 (4H), 8.20 (2H), 8.00 (4H), 7.73 (1H), 7.47-7.37 (15H), 7.28 (2H), 7.03 (2H)이었다.

[0189] 3. 화합물 12의 합성



[0190]

[0191] (화합물 C의 합성)

[0192] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 10,10-diphenyl-5,10-dihydrodibenzo[b,e][1,4]azasiline 13.98g (40.0 mmol)과 1-bromo-2-iodobenzene 10.0 mL (80.0 mmol), CuI 1.52 g (8.0 mmol), K₂CO₃ 11.06 g (80.0 mmol)를 더하여, 40 mL xylene용매중에서24시간180℃에서 교반했다. 공냉 후, toluene를 더하여 여과한 후, 용매유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 C를 7.01g (수율 34%) 얻었다.

[0193] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 C의 분자량은 514이었다.

[0194] (화합물 D의 합성)

[0195] 아르곤(Ar) 분위기 하, 500 mL의 삼구 플라스크에 화합물 C 7.01 g (13.6 mmol) 의 탈수 THF용액 150 mL을 더하여 -78 ℃에서 교반했다. 여기에 1.6 M의 n-buthyllithium hexane 용액8.5 Ml (13.6 mmol)를 적하하여, 1 시간 교반했다. 여기에 trimethoxyborane 1.7 mL (15.3 mmol) 를 적하하여 78 ℃에서 1시간 교반했다. 그 후, 실온에서 3시간 교반했다. 반응 후, 이 혼합액에 1N-염산수 용액을 더하여, 1시간 교반했다. 이것을 물로 세정 했다. 얻어진 유기상을 농축하여, 점성 상태 물질을 얻었다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼크로파토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 D를 2.87g (수율 45%) 얻었다.

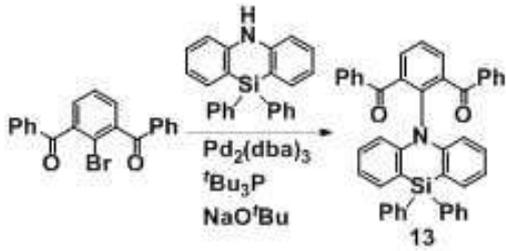
[0196] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 D의 분자량은 469이었다.

[0197] (화합물 12의 합성)

[0198] 아르곤(Ar) 분위기 하, 100 mL의 삼구 플라스크에 화합물 D 2.87 g (6.1 mmol) 과 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.63 g (6.1 mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.07 g (0.06 mmol), K₂CO₃ 1.69 g (12.2 mmol), toluene 30 mL, ethanol 6 mL, 물 3 mL를 더하여 100℃에서 2시간 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 유 거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 12를 3.68 g (수율 92%) 얻었다.

[0199] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 12의 분자량은 656이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃)측정으로 측정된 화합물 12의 Chemical Shift 값(δ)은, 8.36 (4H), 7.73 (1H), 7.51-7.36 (22H), 7.28 (2H), 7.16 (1H), 7.03 (2H)이었다.

[0201] 4. 화합물 13의 합성

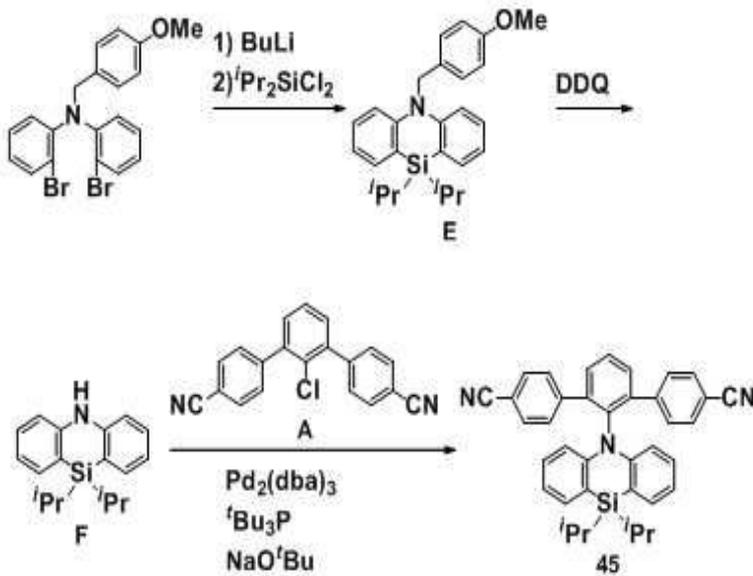


[0202]

[0203] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 (2-bromo-1,3-phenylene)bis(phenylmethanone) 3.65 g (10.0 mmol)과 10,10-diphenyl-5,10-dihydrodibenzo[b,e][1,4]azasiline 3.49 g (10.0 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.09 g (0.1 mmol), (t-Bu)₃P 0.16 g (0.8 mmol), NaOtBu 0.96 g (10.0 mmol)를 더하여, 50 mL toluene 용매 중에서 120℃에서 2시간 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 13을 5.00 g (수율 79%) 얻었다.

[0204] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 13의 분자량은 633이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃) 측정으로 측정된 화합물 13의 Chemical Shift 값(δ)은, 7.89 (2H), 7.75 (4H), 7.61 (2H), 7.52-7.37 (18H), 7.29-7.19 (3H), 7.03 (2H)이었다.

[0206] 5. 화합물 45의 합성



[0207]

[0208] (화합물 E의 합성)

[0209] 아르곤(Ar) 분위기 하, 1000 mL의 삼구 플라스크에 N,N-bis(2-bromophenyl)-N-(4-methoxybenzyl)amine 26.8 g (60.0 mmol)의 탈수 THF 용액 300 mL를 더하여 -78℃에서 교반했다. 여기에 1.6 M의 n-BuLi Hexane 용액 75.0 mL (120 mmol)을 적하하여, 2시간 교반했다. 여기에 Diisopropyldichlorosilane 10.8 mL (60.0 mmol)를 적하하여 78℃에서 2시간 교반했다. 그 후, 실온에서 3시간 교반했다. 반응 후, 이 혼합액을 물로 세정했다. 얻어진 유기상을 농축하여, 점성 상태 물질을 얻었다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 E를 11.1 g(수율 46%) 얻었다.

[0210] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 E의 분자량은 401이었다.

[0211] (화합물 F의 합성)

[0212] 아르곤(Ar) 분위기 하, 500 mL의 삼구 플라스크에 화합물 E 11.1 g (27.6 mol), DDQ 6.58 g (29.0 mol), toluene 120 mL, 물 12 mL을 더하여, 80 °C로 14시간 교반했다. 그 후, 유기층을 물로 세정하여, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 F를 3.80g (수율 49%) 얻었다.

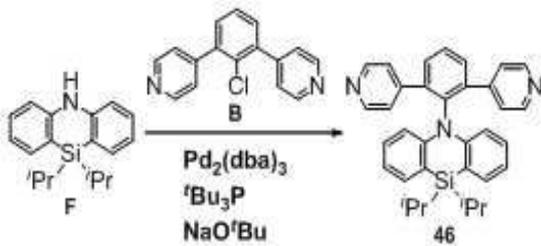
[0213] FAB-MS 측정으로 측정된 화합물 F의 분자량은 281이었다.

[0214] (화합물 45의 합성)

[0215] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 화합물 A 2.11 g (6.7 mmol) 과 화합물 F 1.88 g (6.7 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.06 g (0.07 mmol), (t-Bu)₃P 0.11 g (0.53 mmol), NaOtBu 0.64 g (6.7 mmol)를 더하여, 33 mL toluene 용매 중에서 120°C로 8시간 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 45를 2.63 g (수율 70%) 얻었다.

[0216] FAB-MS측정으로 측정된 화합물 45의 분자량은 559이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃)측정으로 측정된 화합물 45의 Chemical Shift 값(δ)은, 8.20 (2H), 7.85-7.83 (8H), 7.43-7.38 (5H), 7.28 (2H), 7.03 (2H), 1.45 (2H), 0.97 (12H)이었다.

[0218] 6. 화합물 46의 합성



[0219]

[0220] (화합물 46의 합성)

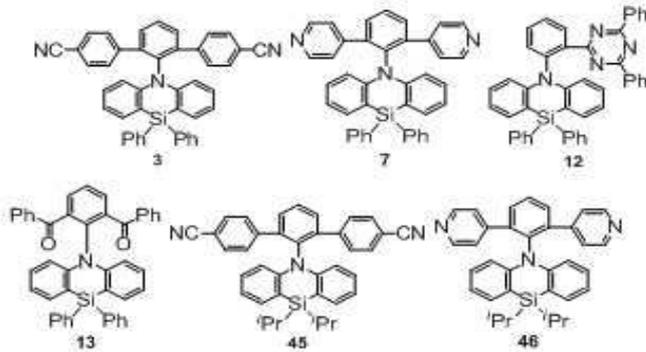
[0221] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 화합물 B 1.79 g (6.7 mmol) 과 화합물 F 1.88 g (6.7 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.06 g (0.07 mmol), (t-Bu)₃P 0.11 g (0.53 mmol), NaOtBu 0.64 g (6.7 mmol)를 더하여, 33 mL toluene 용매 중에서 120°C로 8시간 교반했다. 공냉 후, 물을 더하여 유기층을 분취, 용매 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제 후, 백색 고체의 화합물 46을 2.06 g (수율 60%) 얻었다.

[0222] FAB-MS측정으로 측정된 화합물 46의 분자량은 511이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃)측정으로 측정된 화합물 46의 Chemical Shift 값(δ)은, 8.71 (4H), 8.20 (2H), 8.00 (4H), 7.43-7.38 (5H), 7.28 (2H), 7.03 (2H), 1.45 (2H), 0.97 (12H)이었다.

[0224] (소자 작성예)

[0225] 상술한 화합물 3, 7, 12, 13, 45 및 46을 발광층 도펀트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 6의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

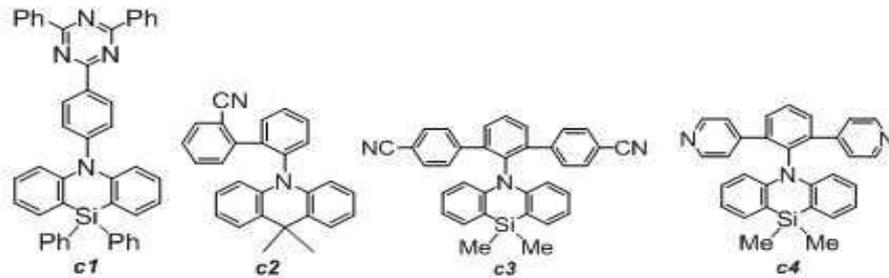
[0226] [실시에 화합물]



[0227]

[0228] 하기 비교예 화합물 c1 내지 c4를 발광층 도펀트 재료로 사용하여 비교예 1 내지 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0229] [비교예 화합물]



[0230]

[0231] 실시예 1 내지 6 및 비교예 1 내지 4의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 120nm의 제1 전극을 형성하고, HAT-CN으로 10nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, α-NPD로 80nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, mCP로 5nm 두께의 전자 저지층을 형성하고, DPEPO에 실시예 화합물 또는 비교예 화합물을 20% 도핑한 20nm 두께의 발광층을 형성하고, DPEPO로 10nm 두께의 정공 저지층을 형성하고, TPBi로 30nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 0.5nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al로 100nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 모두 진공 증착법으로 형성하였다.

표 1

[0232]

	발광층 도펀트	EQE(%)	수명 LT50(h)
실시예 1	실시예 화합물 3	11.4	8.1
실시예 2	실시예 화합물 7	11.9	7.2
실시예 3	실시예 화합물 12	12.3	33.4
실시예 4	실시예 화합물 13	15.6	19.1
실시예 5	실시예 화합물 45	11.0	4.5
실시예 6	실시예 화합물 46	11.6	4.2
비교예 1	비교예 화합물 c1	9.8	15.4
비교예 2	비교예 화합물 c2	6.9	1.9
비교예 3	비교예 화합물 c3	10.2	2.1
비교예 4	비교예 화합물 c4	10.8	1.8

[0233]

상기 표에서 "수명 LT50"은 초기휘도 100cd/cm²부터 휘도 반감시간을 의미하며, "EQE"는 10mA/cm²에서의 외부 양자 효율을 의미한다.

[0234]

상기 표 1을 참조하면, 실시예 1 내지 6에 따른 유기 전계 발광 소자는 비교예 1 내지 4 대비 고효율화 및/또는 장수명화 효과가 있음을 알 수 있다. 실시예 1 내지 6의 경우, 전자 수용성기와 azasiline 유도체인 전자 공여성기가 링커에 오르쏘(ortho) 관계로 치환되어 있기 때문에 입체 장애로 전자 수용성기와 전자 공여성기가 뒤

틀려, E_{ST} 값이 작아지며, 그 결과 삼중항에서 일중항으로의 역항간 교차가 촉진되게 되며, 전자 수용성기와 전자 공여성기가 링커에 파라(para) 관계로 치환되어 있는 비교예 1 대비 고효율화되었음을 알 수 있다. 또한, 실시예 3 및 4의 경우, 비교예 1 대비 장수명화 효과도 있다. 비교예 2의 경우, 전자 공여성기가 아크리단(acridane)이기 때문에, azasiline과 비교할 때, 분자의 내구성이 떨어지며, 롤-오프(roll-off)가 커져 실시예 1 내지 6 대비 수명이 짧음을 알 수 있다.

[0235] 실시예 5 및 6과 비교예 3 및 4을 비교하면, azasiline의 Si에 비교적 부피가 큰 이소프로필기가 치환되어 있는 실시예 5 및 6이 azasiline의 Si에 메틸기가 치환되어 있는 비교예 3 및 4에 비해 효율이 향상되었고, 장수명화되었다. 이는 비교적 부피가 큰 치환기를 도입하여 분자의 내구성이 개선되었기 때문이다. 또한, 전술한 실시예 2와 비교예 4를 비교해 보면, azasiline의 Si 상에 부피가 비교적 큰 페닐기를 도입함에 따라, 장수명화되었음을 볼 수 있다.

[0236] 한편, 실시예 1 내지 4는 실시예 5 및 6에 비해 전자 수용성기의 부피가 큰 바, 분자 구조의 뒤틀림이 커져 E_{ST} 값이 작아지며, 그 결과 효율 및 수명 측면에서 보다 유리함을 알 수 있다.

[0237] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 효율 및/또는 수명 측면에서 유리하다. 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 우수한 수명 및 효과뿐만 아니라 청색 발광도 동시에 구현할 수 있다는 효과가 있다.

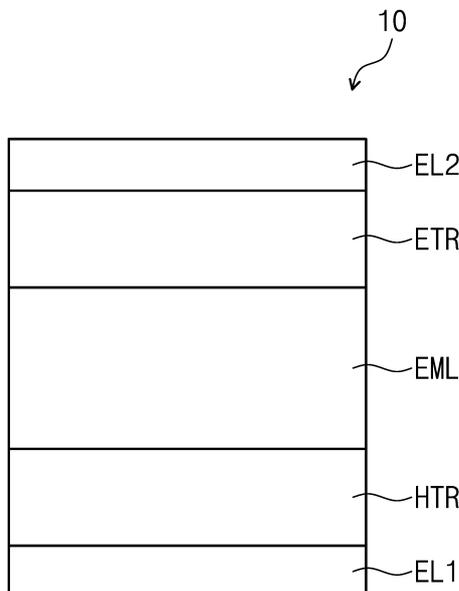
[0238] 이상, 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

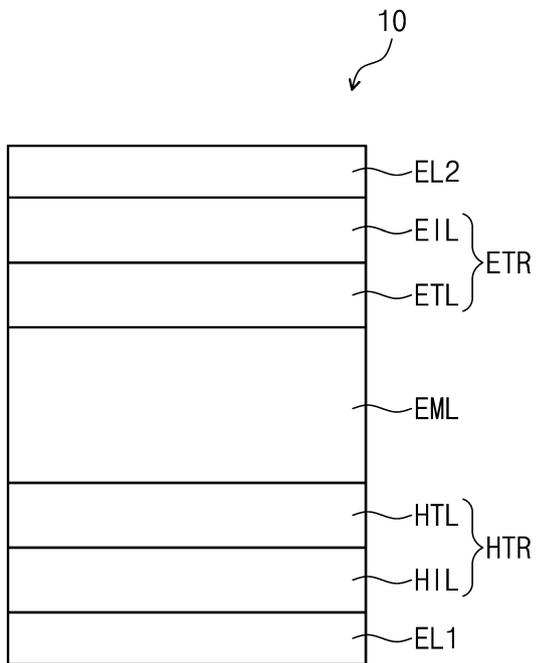
- [0239] 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극
- HTR: 정공 수송 영역 HIL: 정공 주입층
- HTL: 정공 수송층 EML: 발광층
- ETR: 전자 수송 영역 ETL: 전자 수송층
- EIL: 전자 주입층 EL2: 제2 전극

도면

도면1



도면2



도면3

