



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0089092
(43) 공개일자 2017년08월03일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 209/82 (2006.01) C07D 471/04 (2006.01)
C07F 9/576 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07D 209/82 (2013.01)
C07D 471/04 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2016-0008889
(22) 출원일자 2016년01월25일
심사청구일자 없음
- (71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
경상대학교산학협력단
경상남도 진주시 진주대로 501 (가좌동)
- (72) 발명자
김희연
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1(농서동)
김미경
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1(농서동)
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
리엔텍특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 카바졸계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자

(57) 요약

카바졸계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1

10

190

150

110

(52) CPC특허분류

C07F 9/576 (2013.01)

C09K 11/06 (2013.01)

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5048 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/104 (2013.01)

(72) 발명자

김윤희

경상남도 진주시 진주대로 501, 화학과 (가좌동)

박성중

경상남도 진주시 초전남로 30, 107동 1202호 (초전동, 초전홍한황토방아파트)

이재용

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

정혜인

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1(농서동)

황재영

경상남도 진주시 진주대로 501,그린에너지융합연구소 (가좌동)

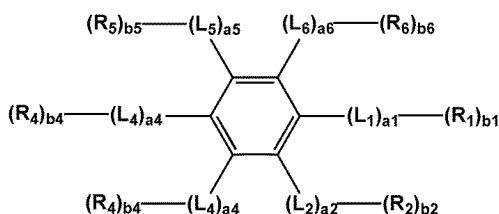
명세서

청구범위

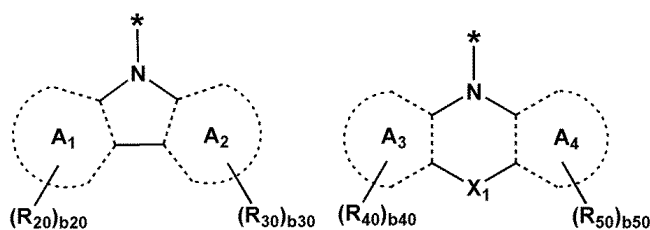
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물:

<화학식 1>



<화학식 2A> <화학식 2B>



상기 화학식 1, 2A 및 2B 중,

X_1 은 $P(=O)[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b1}]$, $P(=S)[(L_{12})_{a12}-(R_{12})_{b12}]$, $S(=O)$ 및 $S(=O)_2$ 중에서 선택되고,

고리 A_1 고리 내지 고리 A_4 는 서로 독립적으로, C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 및 C_2-C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

L_1 내지 L_6 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group) 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group) 중에서 선택되고,

a_1 내지 a_6 , a_{11} 및 a_{12} 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, a_1 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_1 은 서로 동일하거나 상이하고, a_2 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_2 는 서로 동일하거나 상이하고, a_3 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_3 는 서로 동일하거나 상이하고, a_4 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_4 는 서로 동일하거나 상이하고, a_5 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_5 는 서로 동일하거나 상이하고, a_6 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_6 는 서로 동일하거나 상이하고, a_{11} 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{11} 은 서로 동일하거나 상이하고, a_{12} 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_{12} 는 서로 동일하거나 상이하고,

R_1 내지 R_6 , R_{11} , R_{12} , R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 은 서로 독립적으로, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된

된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group), -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

b1 내지 b6, b11, b12, b20, b30, b40 및 b50은 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b1이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁은 서로 동일하거나 상이하고, b2가 2 이상일 경우 2 이상의 R₂는 서로 동일하거나 상이하고, b3이 2 이상일 경우 2 이상의 R₃는 서로 동일하거나 상이하고, b4가 2 이상일 경우 2 이상의 R₄는 서로 동일하거나 상이하고, b5가 2 이상일 경우 2 이상의 R₅는 서로 동일하거나 상이하고, b6가 2 이상일 경우 2 이상의 R₆는 서로 동일하거나 상이하고, b11이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₁은 서로 동일하거나 상이하고, b12가 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₂는 서로 동일하거나 상이하고, b20이 2 이상일 경우 2 이상의 R₂₀은 서로 동일하거나 상이하고, b30이 2 이상일 경우 2 이상의 R₃₀은 서로 동일하거나 상이하고, b40이 2 이상일 경우 2 이상의 R₄₀은 서로 동일하거나 상이하고, b50이 2 이상일 경우 2 이상의 R₅₀은 서로 동일하거나 상이하고,

R₁ 내지 R₆ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이고, R₁ 내지 R₆ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이고,

상기 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로

알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$;

중에서 선택되고,

상기 Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 X_1 은 $P(=O)[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b1}]$ 인, 카바졸계 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 고리 A_1 고리 내지 고리 A_4 는 서로 독립적으로, 벤젠 및 피리딘 중에서 선택되는, 카바졸계 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 L_1 내지 L_6 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로,

페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴아로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기 및 벤조카바졸일렌기; 및

중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴아로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸기레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴아로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기 및 벤조카바졸일렌기; 및

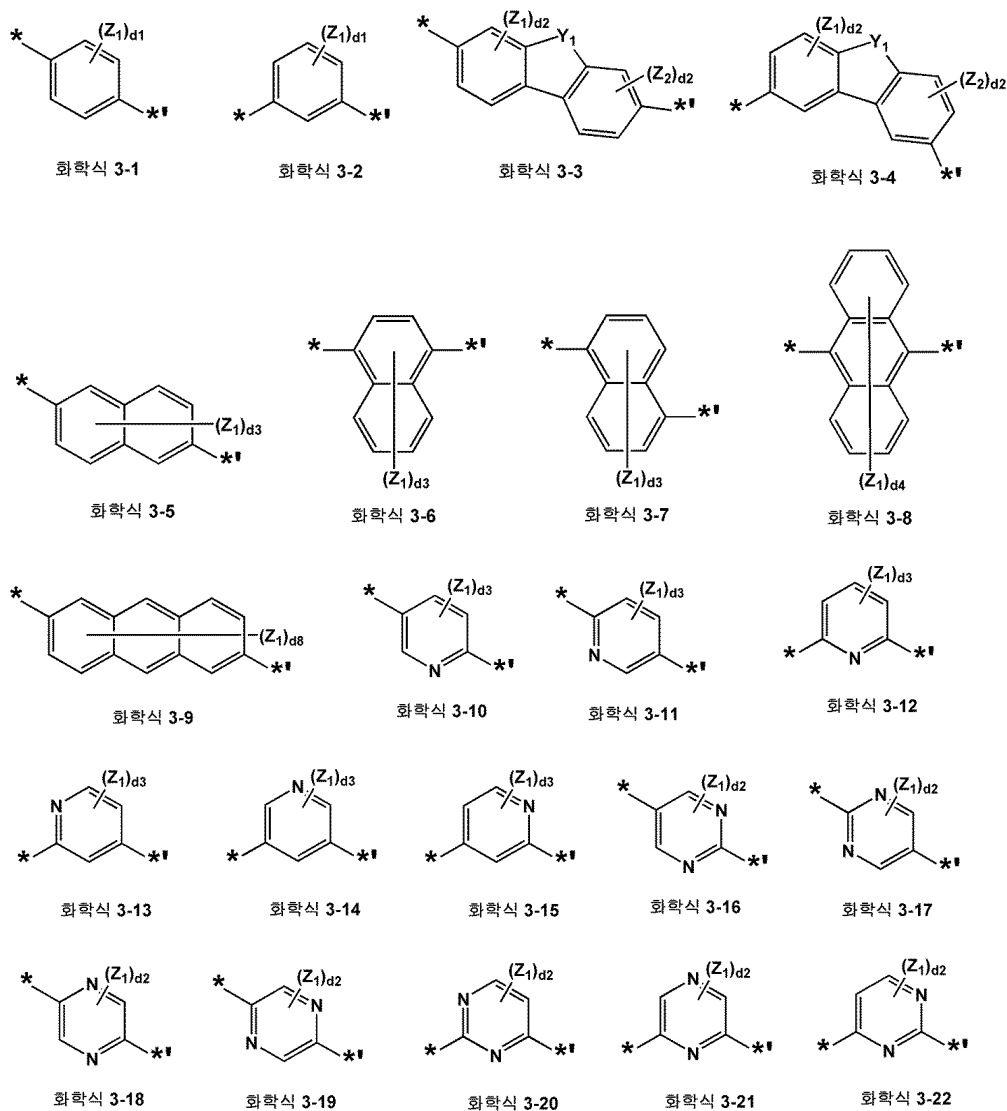
중에서 선택되고,

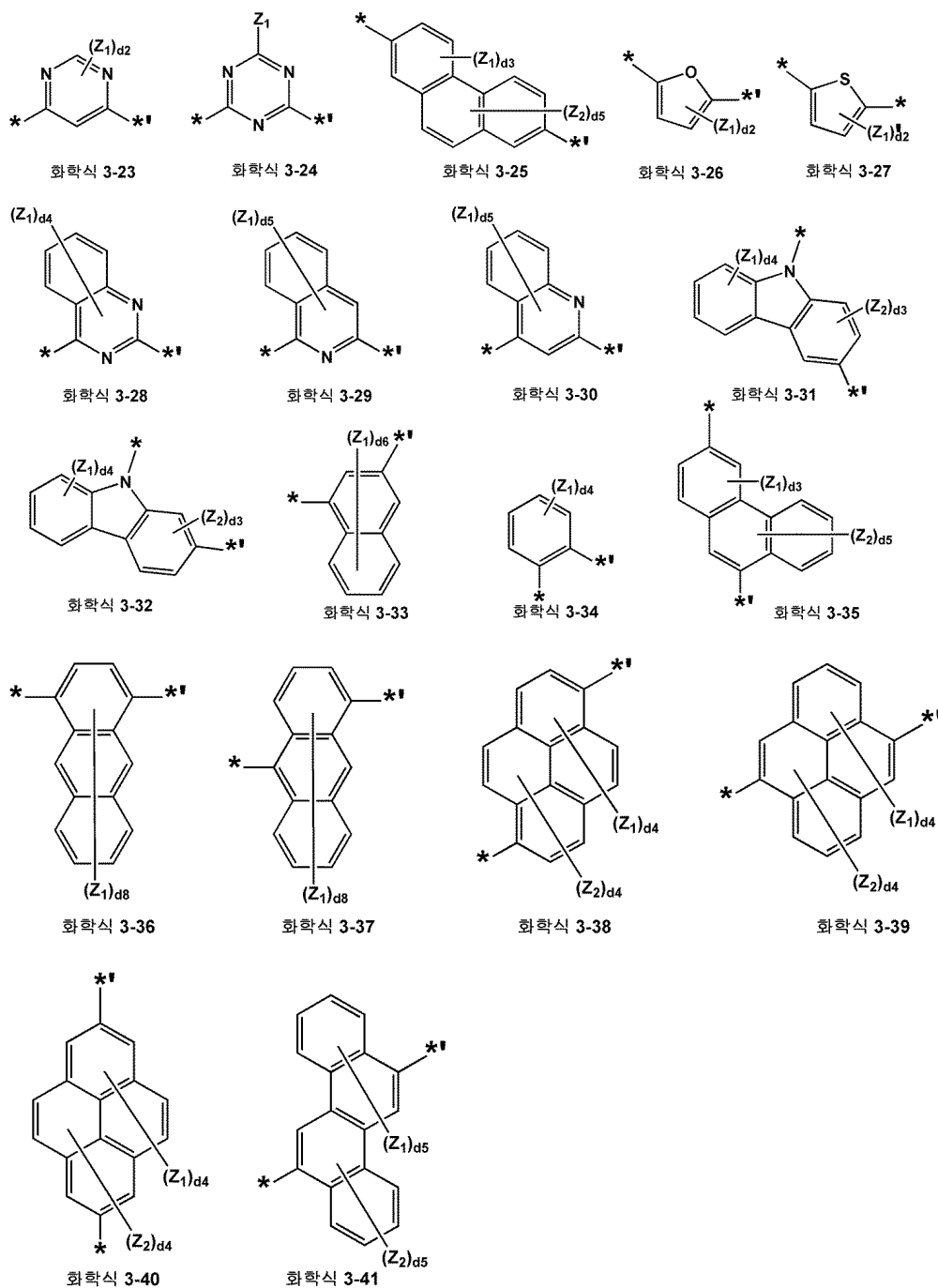
상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된, 카바줄계 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 L₁ 내지 L₆, L₁₁ 및 L₁₂는 서로 독립적으로, 하기 화학식 3-1 내지 화학식 3-41로 표시되는 그룹 중에서 선택되는, 카바줄계 화합물:





상기 화학식 3-1 내지 3-41 중,

Y_1 은 O, S, $C(Z_3)(Z_4)$, $N(Z_5)$ 또는 $Si(Z_6)(Z_7)$ 이고,

Z_1 내지 Z_7 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸리닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜리닐기, 트리아지닐기, 벤조이미다졸리닐기, 페난트롤리닐기 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택되고,

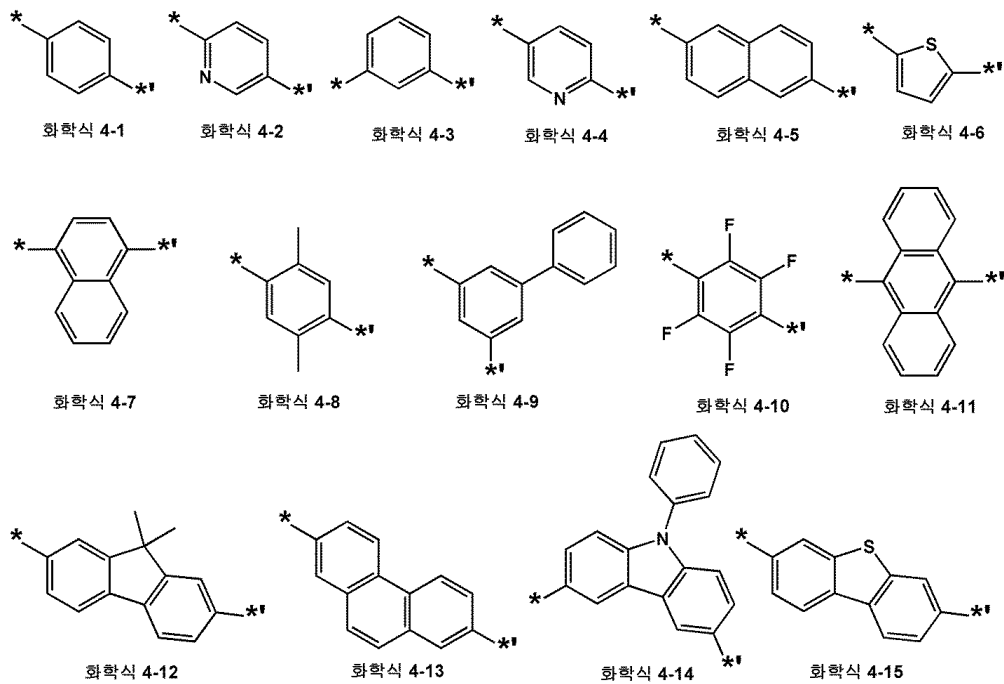
상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택되고,

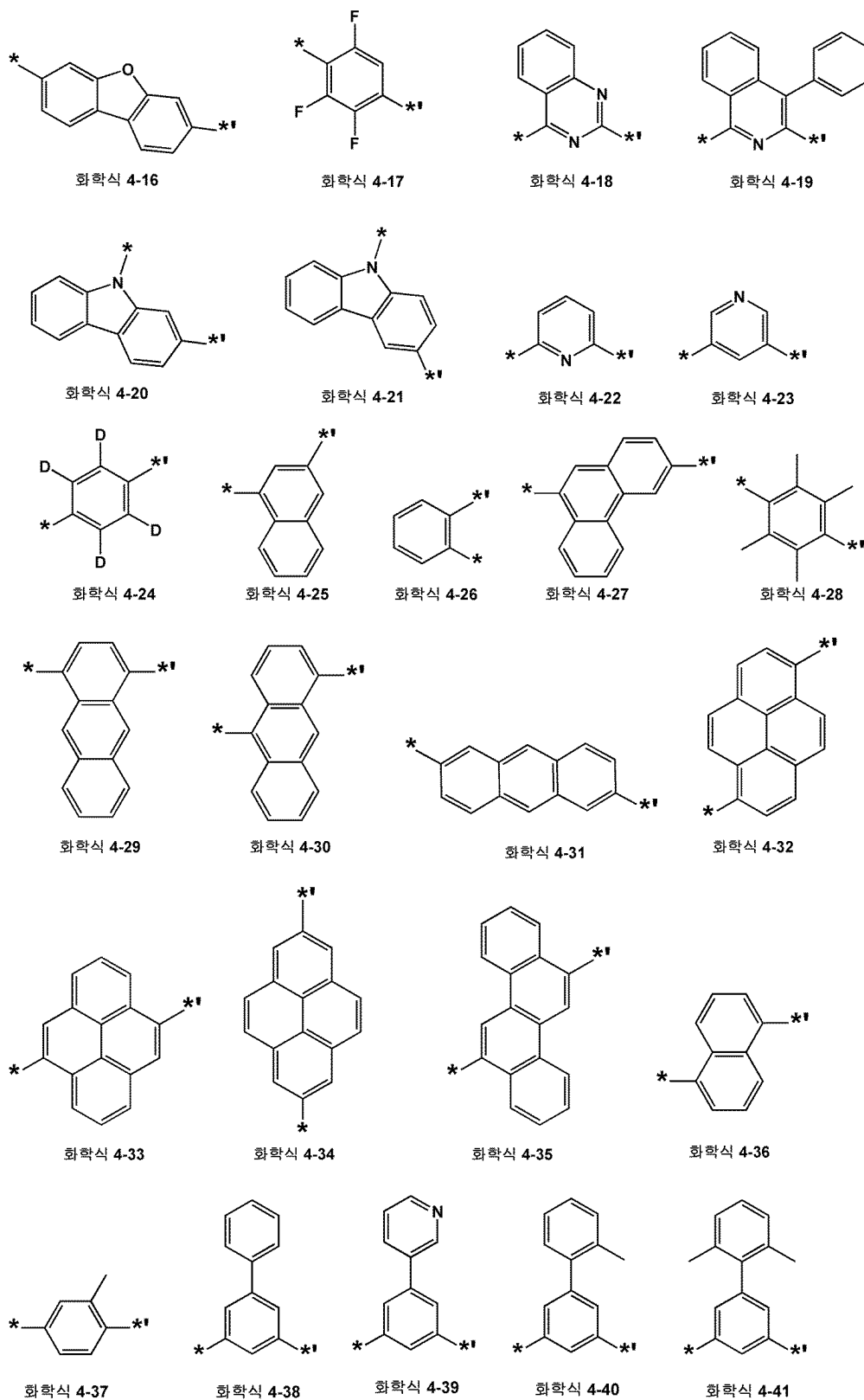
d2는 0 내지 2 중에서 선택된 정수이고,
d3는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,
d4는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고,
d5는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,
d6은 0 내지 6 중에서 선택된 정수이고,
d8은 0 내지 8 중에서 선택된 정수이고,
* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 L₁ 내지 L₆, L₁₁ 및 L₁₂는 하기 화학식 4-1 내지 4-15로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 카바줄계 화합물:





상기 화학식 4-1 내지 4-41 중 * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 a1 내지 a6, a11 및 a12는 서로 독립적으로, 0 또는 1인, 카바줄계 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

R_1 내지 R_6 , R_{11} , R_{12} , R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 은 서로 독립적으로, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{20} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{20} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{20} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{20} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 및 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 중에서 선택된, 카바졸계 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

R_1 내지 R_6 , R_{11} 및 R_{12} 는 서로 독립적으로,

상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 디벤조실롤일기; 및 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 디벤조실롤일기;

중에서 선택되고,

R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 은 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기 및 히드라조노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;

페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 디벤조실롤일기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-

C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바줄일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바줄일기, 디벤조카바줄일기, 디벤조실롤일기, -N(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바줄일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바줄일기, 디벤조카바줄일기 및 디벤조실롤일기; 및

-Si(Q₁)(Q₂)(Q₃);

중에서 선택되고,

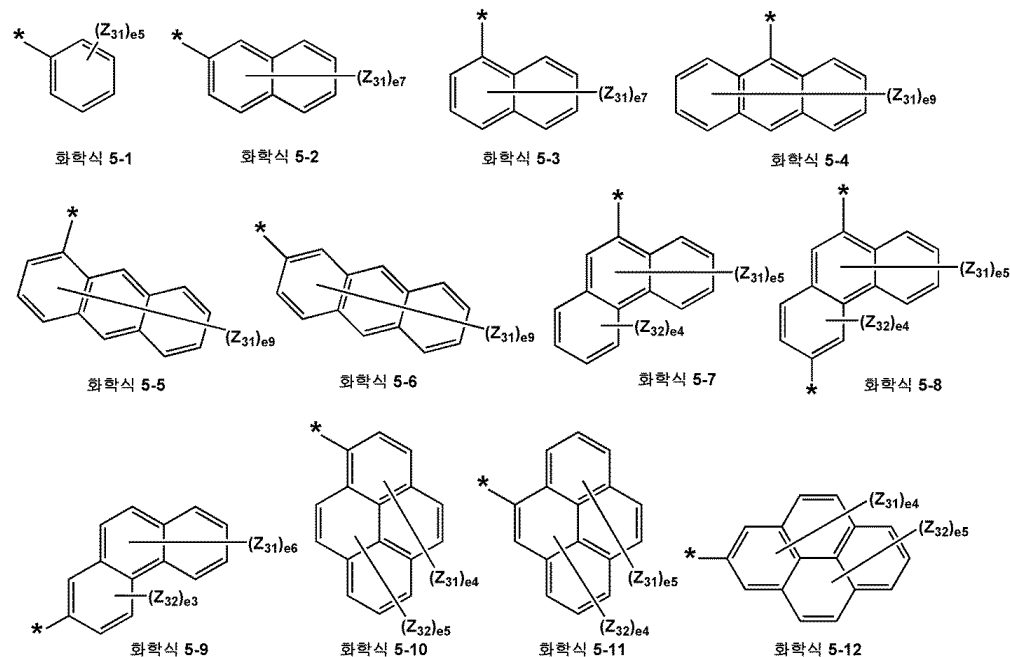
상기 Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된, 카바줄계 화합물.

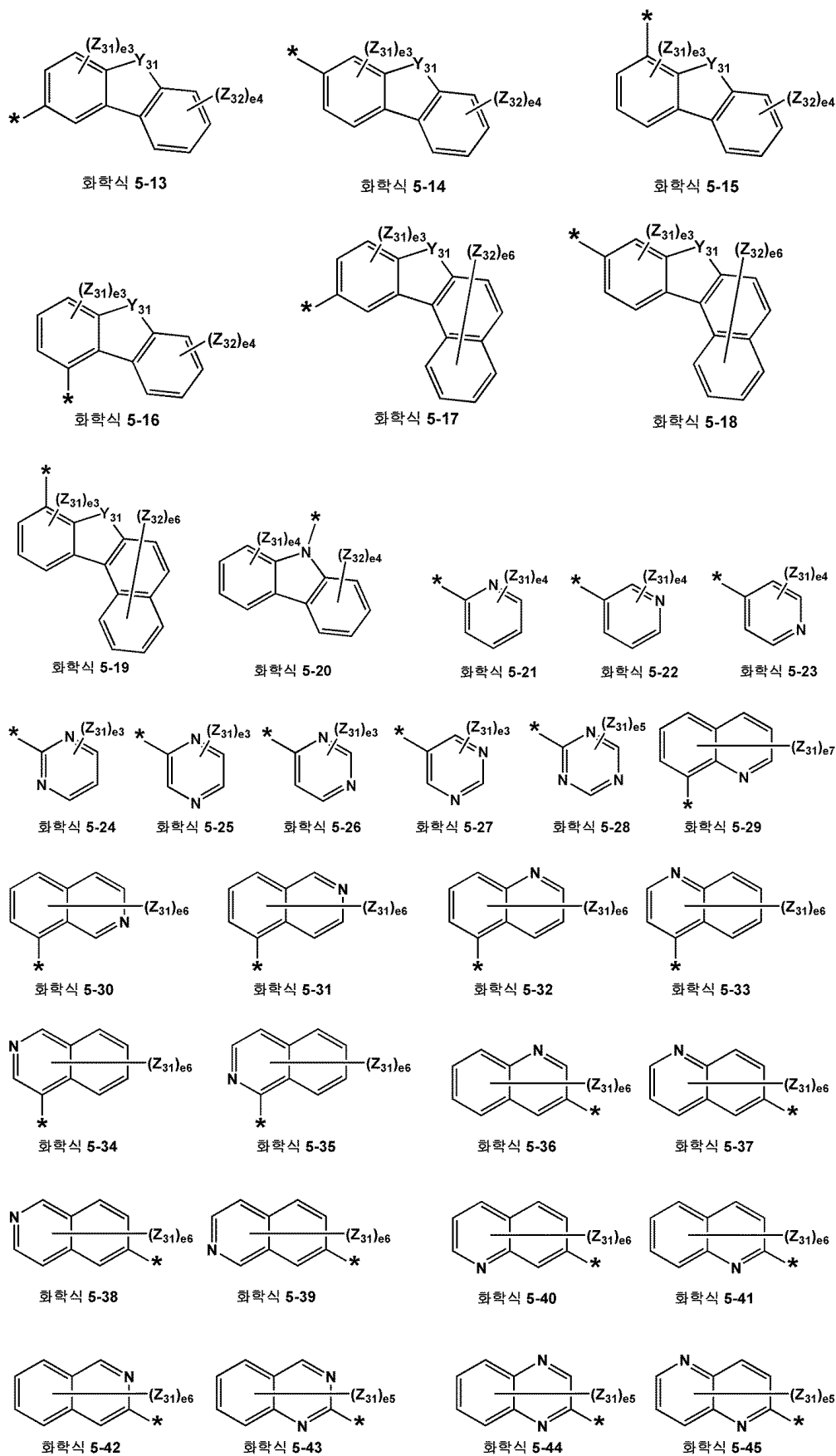
청구항 10

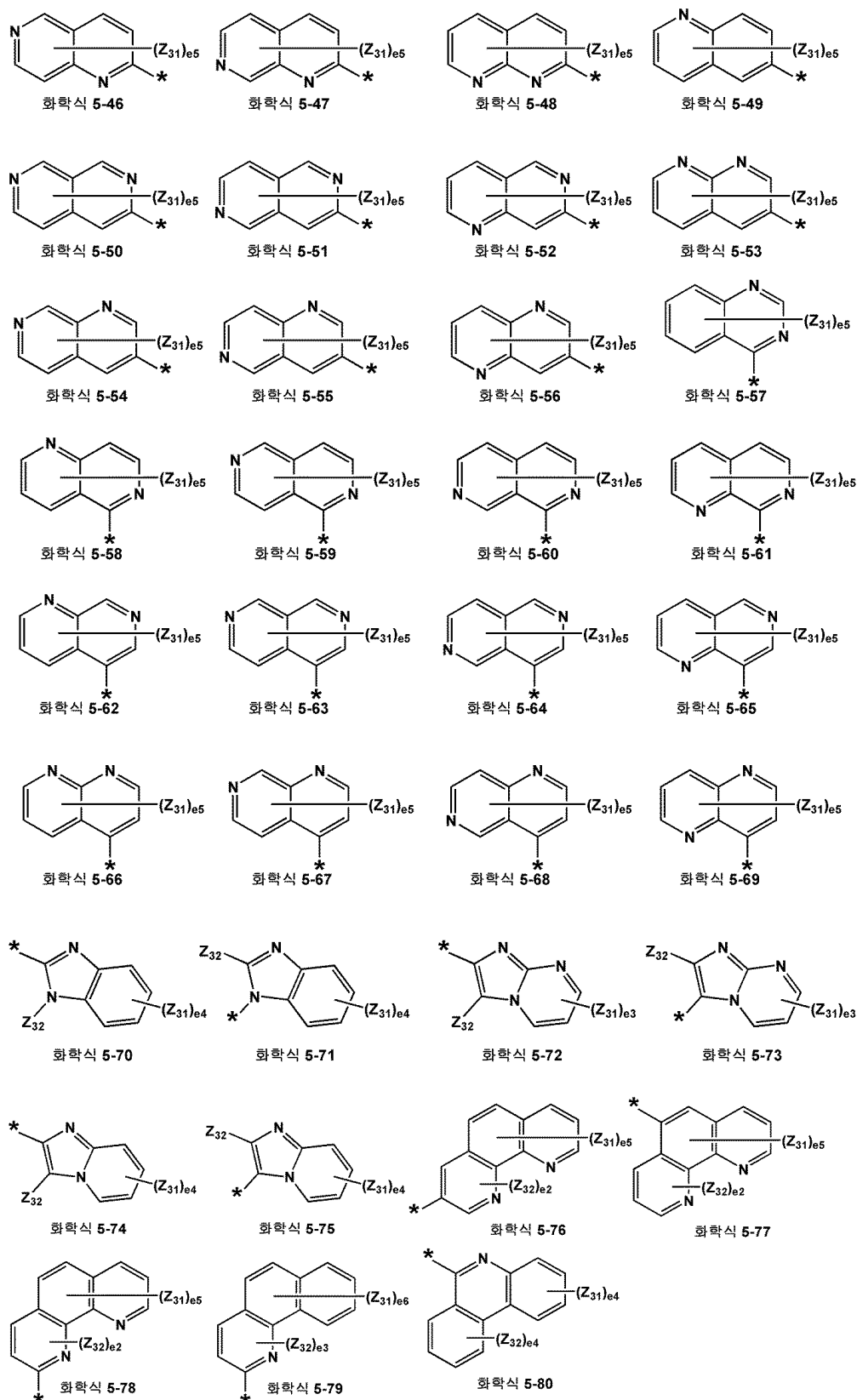
제1항에 있어서,

R₁ 내지 R₆, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 5-1 내지 5-8로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

R₂₀, R₃₀, R₄₀ 및 R₅₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 하기 화학식 5-1 내지 5-8로 표시되는 그룹 및 -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃)(단, 상기 Q₁ 내지 Q₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택됨) 중에서 선택된, 카바줄계 화합물:







상기 화학식 5-1 내지 5-80 중,

Z_{31} 은 O, S, $C(Z_{33})(Z_{34})$, $N(Z_{35})$ 또는 $Si(Z_{36})(Z_{37})$ 이고;

Z_{31} 내지 Z_{37} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오

레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조이미다졸일기, 페난트롤리닐기, 트리아지닐기, $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택되고,

상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택되고,

e3은 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

e4는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

e5는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

e6는 0 내지 6 중에서 선택된 정수이고,

e7은 0 내지 7 중에서 선택된 정수이고,

e8은 0 내지 8 중에서 선택된 정수이고,

e9는 0 내지 9 중에서 선택된 정수이고,

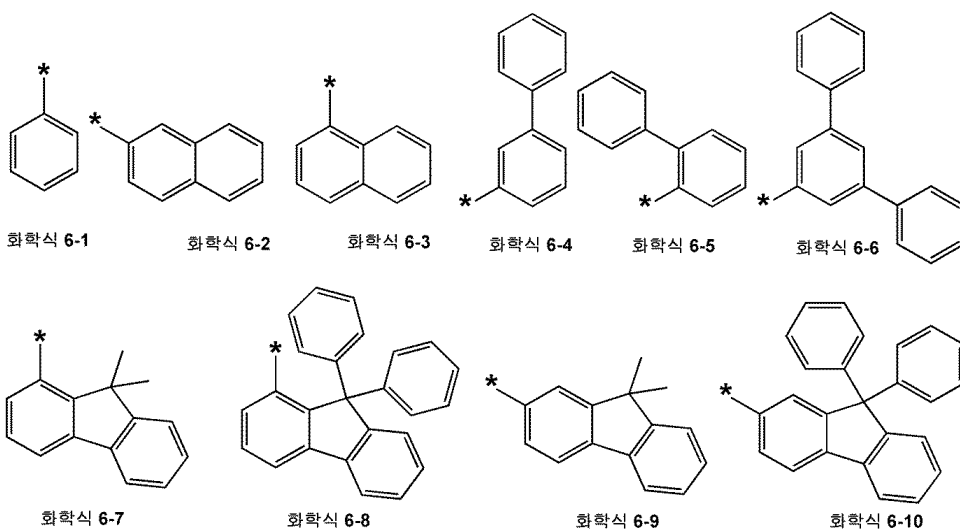
*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

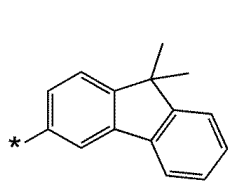
청구항 11

제1항에 있어서,

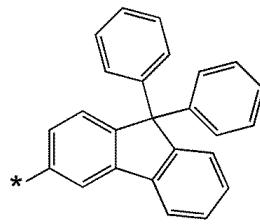
R_1 내지 R_6 , R_{11} 및 R_{12} 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 하기 화학식 6-1 내지 6-35로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-129로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 하기 화학식 6-1 내지 6-35로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-129로 표시되는 그룹 및 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ (단, 상기 Q_1 내지 Q_3 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택됨) 중에서 선택된, 카바졸계 화합물:

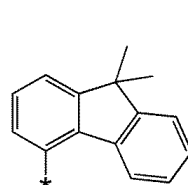




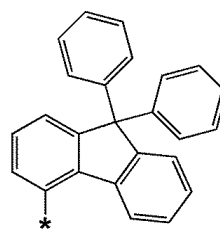
화학식 6-11



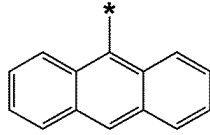
화학식 6-12



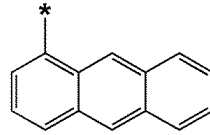
화학식 6-13



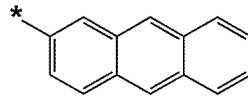
화학식 6-14



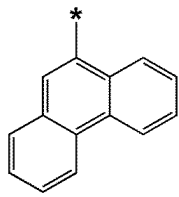
화학식 6-15



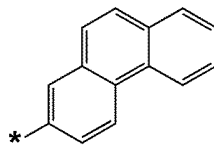
화학식 6-16



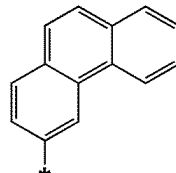
화학식 6-17



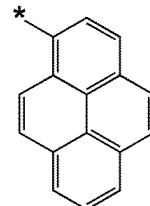
화학식 6-18



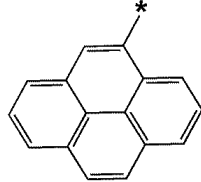
화학식 6-19



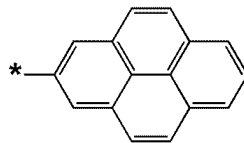
화학식 6-20



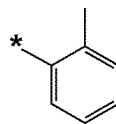
화학식 6-21



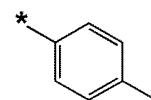
화학식 6-22



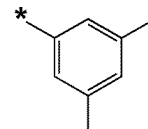
화학식 6-23



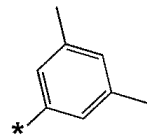
화학식 6-24



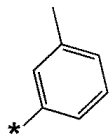
화학식 6-25



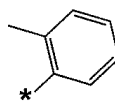
화학식 6-26



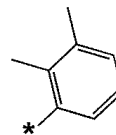
화학식 6-27



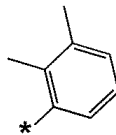
화학식 6-28



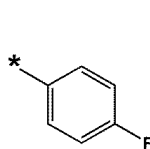
화학식 6-29



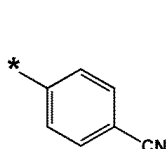
화학식 6-30



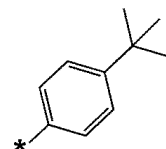
화학식 6-31



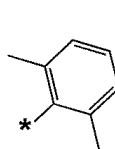
화학식 6-32



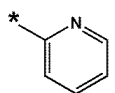
화학식 6-33



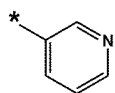
화학식 6-34



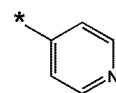
화학식 6-35



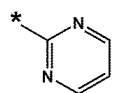
화학식 10-1



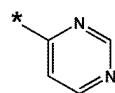
화학식 10-2



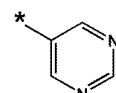
화학식 10-3



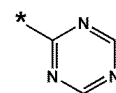
화학식 10-4



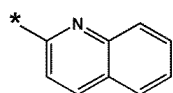
화학식 10-5



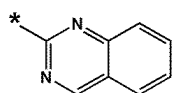
화학식 10-6



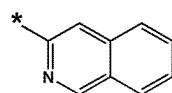
화학식 10-7



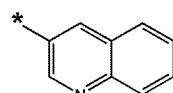
화학식 10-8



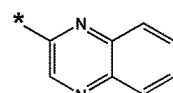
화학식 10-9



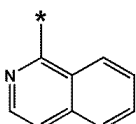
화학식 10-10



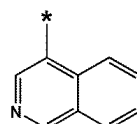
화학식 10-11



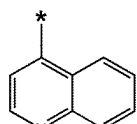
화학식 10-12



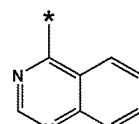
화학식 10-13



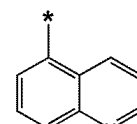
화학식 10-14



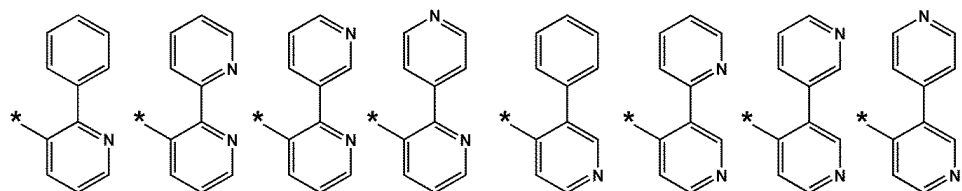
화학식 10-15



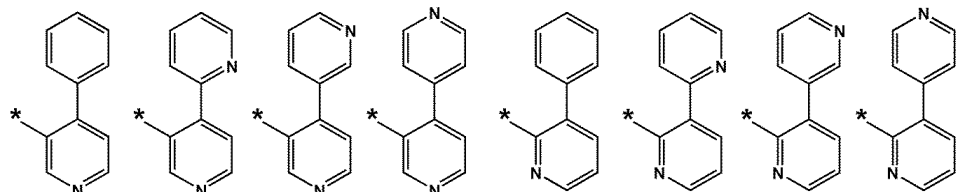
화학식 10-16



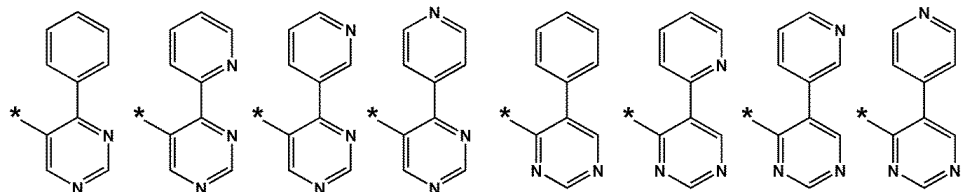
화학식 10-17



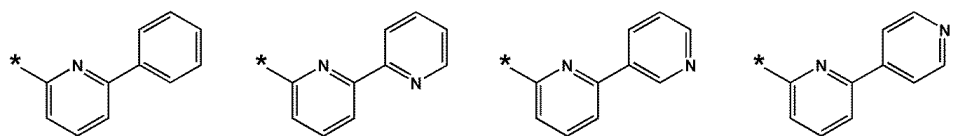
화학식 10-18 화학식 10-19 화학식 10-20 화학식 10-21 화학식 10-22 화학식 10-23 화학식 10-24 화학식 10-25



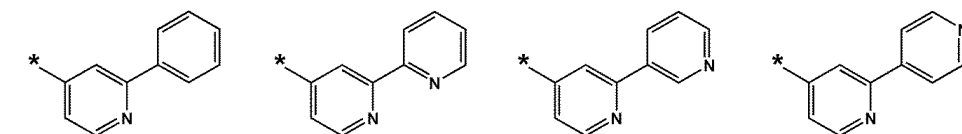
화학식 10-26 화학식 10-27 화학식 10-28 화학식 10-29 화학식 10-30 화학식 10-31 화학식 10-32 화학식 10-33



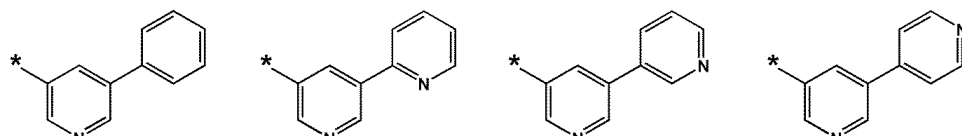
화학식 10-34 화학식 10-35 화학식 10-36 화학식 10-37 화학식 10-38 화학식 10-39 화학식 10-40 화학식 10-41



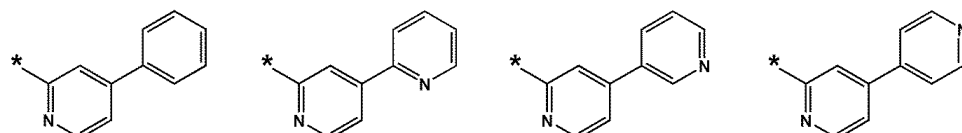
화학식 10-42 화학식 10-43 화학식 10-44 화학식 10-45



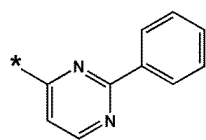
화학식 10-46 화학식 10-47 화학식 10-48 화학식 10-49



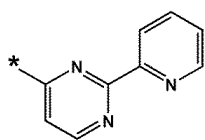
화학식 10-50 화학식 10-51 화학식 10-52 화학식 10-53



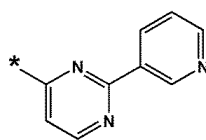
화학식 10-54 화학식 10-55 화학식 10-56 화학식 10-57



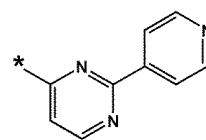
화학식 10-58



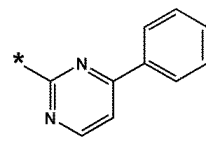
화학식 10-59



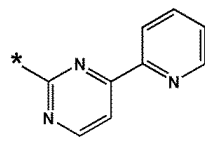
화학식 10-60



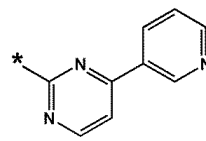
화학식 10-61



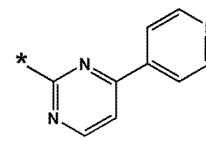
화학식 10-62



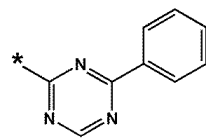
화학식 10-63



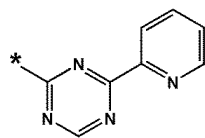
화학식 10-64



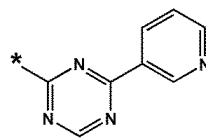
화학식 10-65



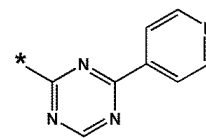
화학식 10-66



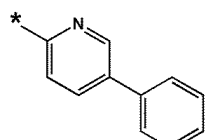
화학식 10-67



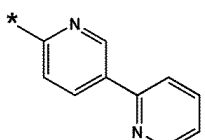
화학식 10-68



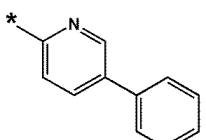
화학식 10-69



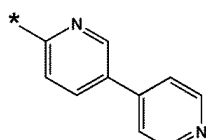
화학식 10-70



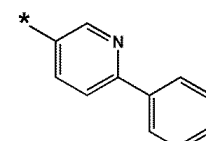
화학식 10-71



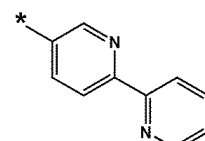
화학식 10-72



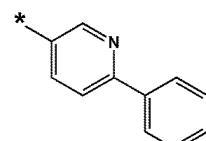
화학식 10-73



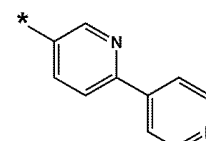
화학식 10-74



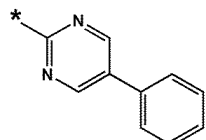
화학식 10-75



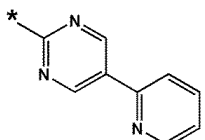
화학식 10-76



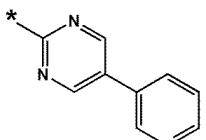
화학식 10-77



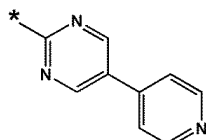
화학식 10-78



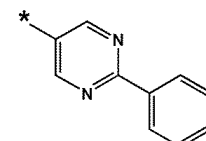
화학식 10-79



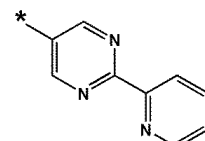
화학식 10-80



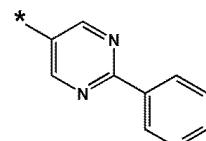
화학식 10-81



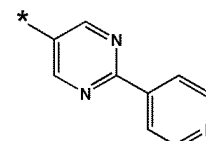
화학식 10-82



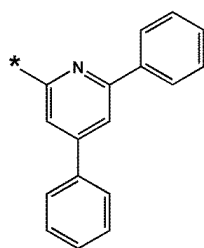
화학식 10-83



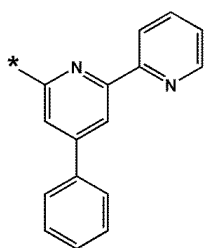
화학식 10-84



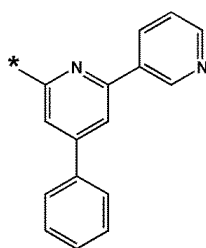
화학식 10-85



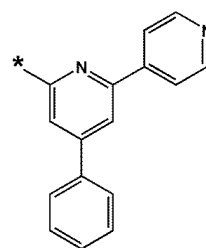
화학식 10-86



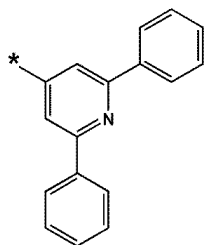
화학식 10-87



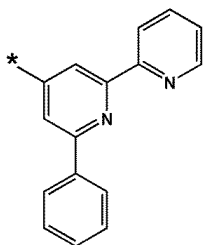
화학식 10-88



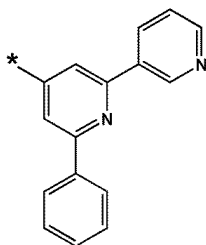
화학식 10-89



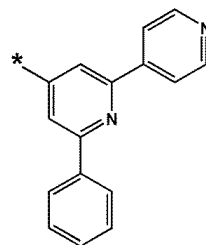
화학식 10-90



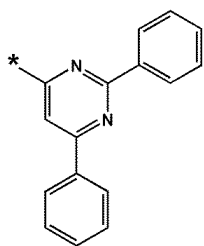
화학식 10-91



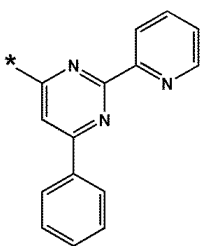
화학식 10-92



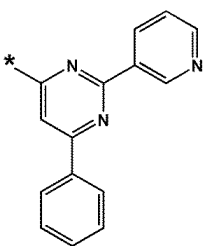
화학식 10-93



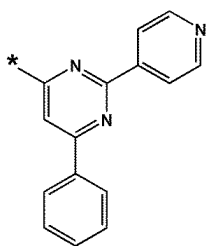
화학식 10-94



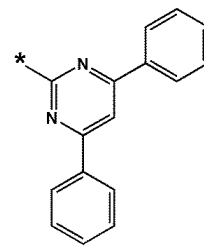
화학식 10-95



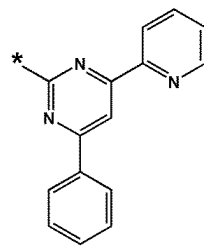
화학식 10-96



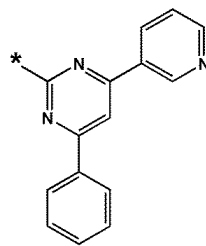
화학식 10-97



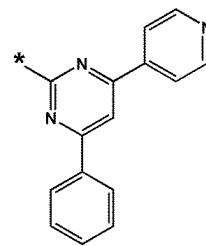
화학식 10-98



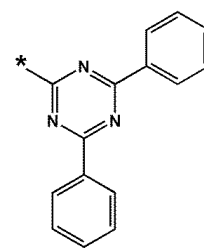
화학식 10-99



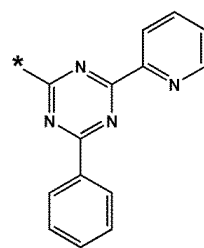
화학식 10-100



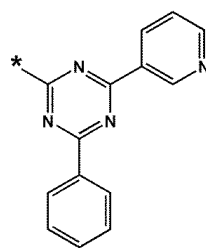
화학식 10-101



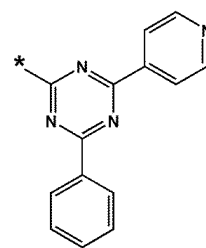
화학식 10-102



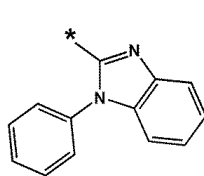
화학식 10-103



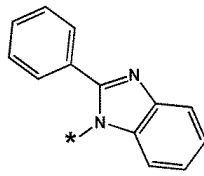
화학식 10-104



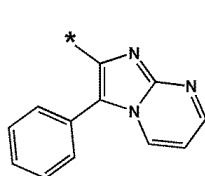
화학식 10-105



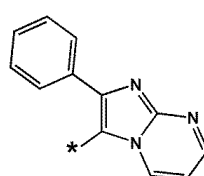
화학식 10-106



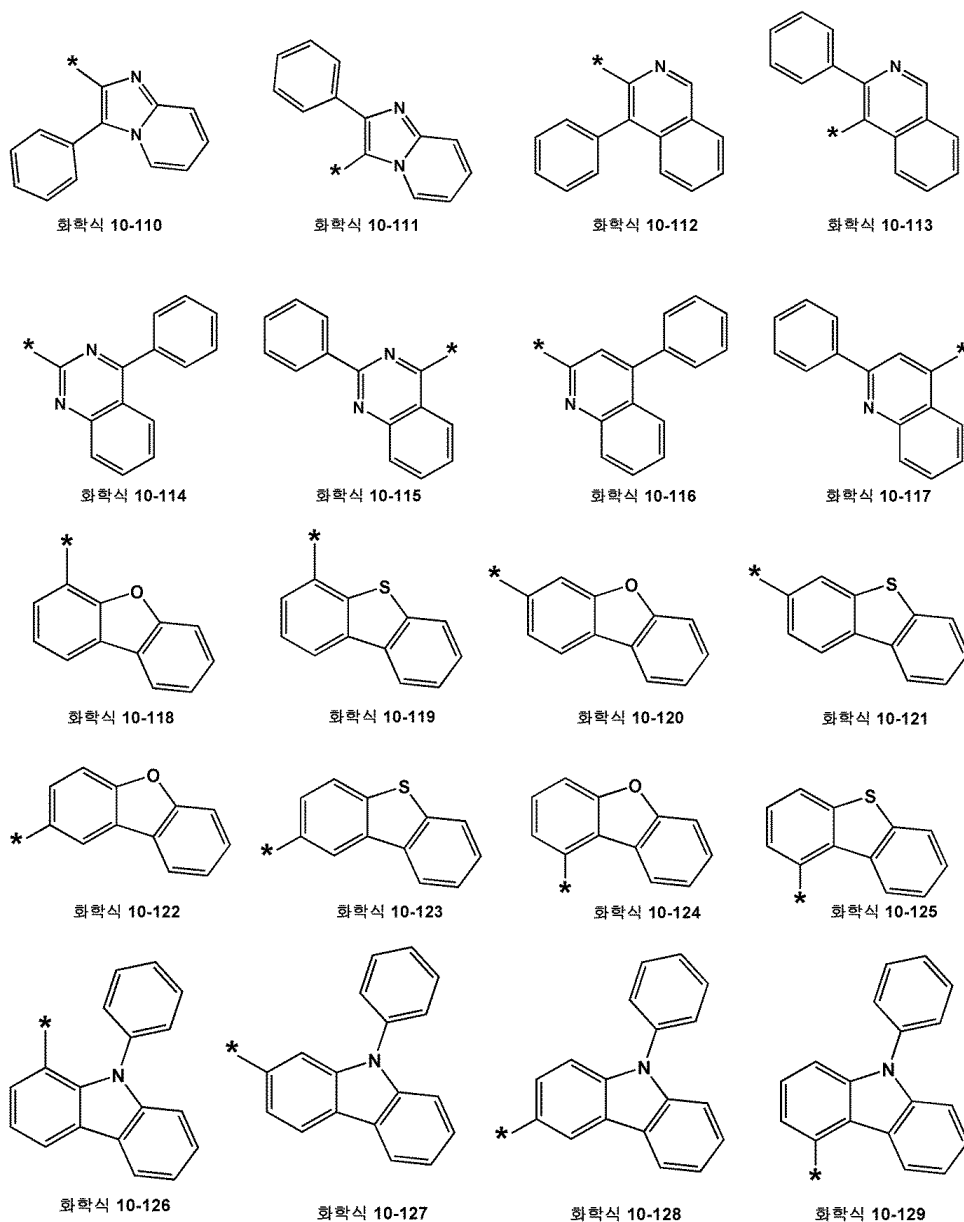
화학식 10-107



화학식 10-108



화학식 10-109



상기 화학식 6-1 내지 6-35 및 10-1 내지 10-129 중 *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 12

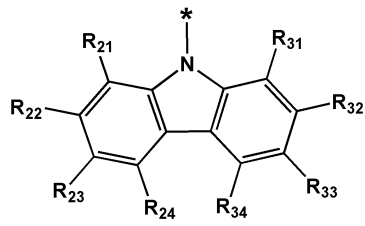
제1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₆ 중 1개 또는 2개가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이고, 상기 R₁ 내지 R₆ 중 1개가 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹인, 카바졸계 화합물.

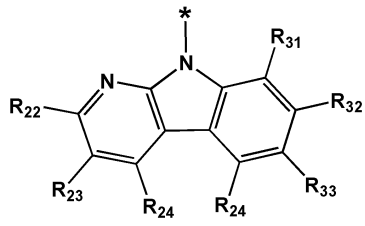
청구항 13

제1항에 있어서,

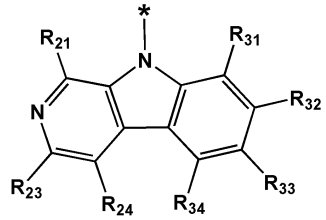
상기 화학식 2A로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2A-1 내지 2A-5로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2B-1 내지 2B-5로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 카바졸계 화합물:



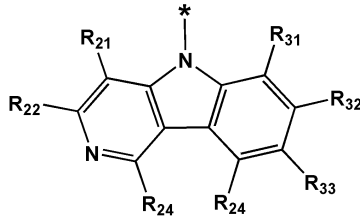
화학식 2A-1



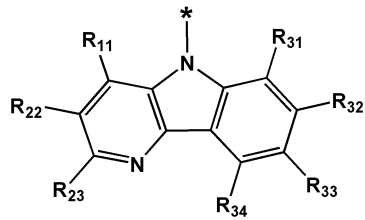
화학식 2A-2



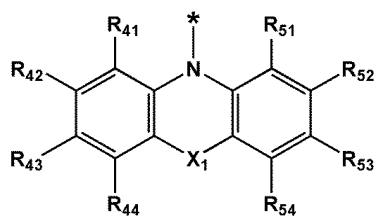
화학식 2A-3



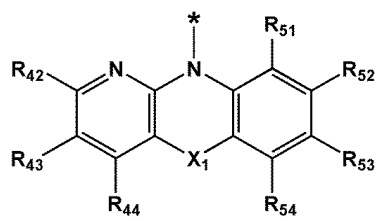
화학식 2A-4



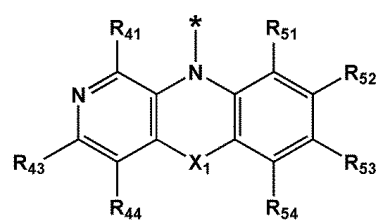
화학식 2A-5



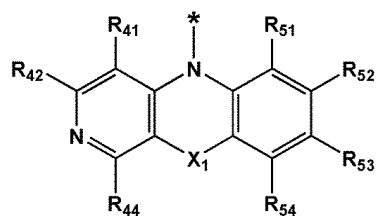
화학식 2B-1



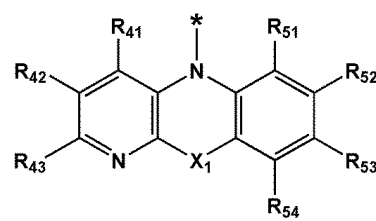
화학식 2B-2



화학식 2B-3



화학식 2B-4



화학식 2B-5

상기 화학식 2A-1 내지 2A-5 및 2B-1 내지 2B-5 중,
X₁에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하고,

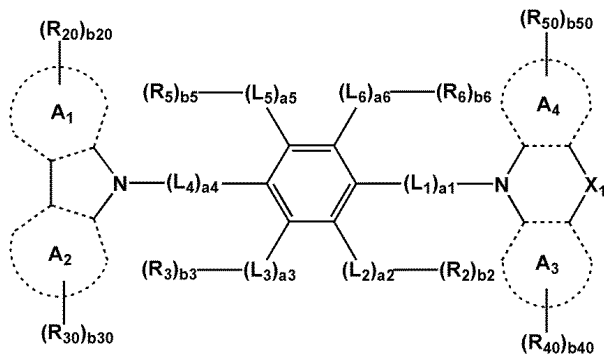
R₂₁ 내 R₂₄에 대한 설명은 제1항 중 R₂₀에 대한 설명과 동일하고,
R₃₁ 내 R₃₄에 대한 설명은 제1항 중 R₃₀에 대한 설명과 동일하고,
R₄₁ 내 R₄₄에 대한 설명은 제1항 중 R₄₀에 대한 설명과 동일하고,
R₅₁ 내 R₅₄에 대한 설명은 제1항 중 R₅₀에 대한 설명과 동일하다.

청구항 14

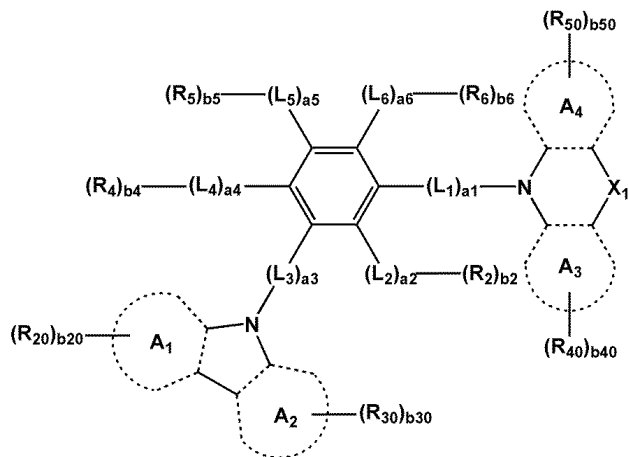
제1항에 있어서,

하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 하나로 표시된, 카바졸계 화합물:

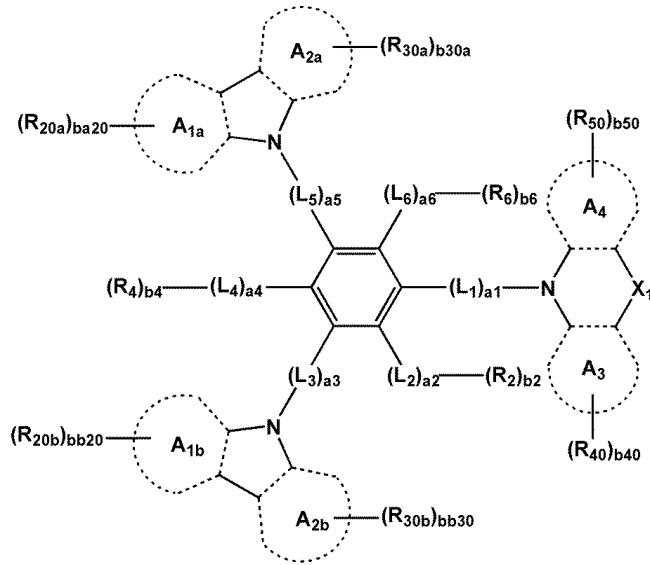
<화학식 1-1>



<화학식 1-2>



<화학식 1-3>



상기 화학식 1-1 내지 1-3 중 X₁, 고리 A₁ 내지 고리 A₄, L₁ 내지 L₆, a₁ 내지 a₆, a₁₁, a₁₂, R₂ 내지 R₆, R₂₀, R₃₀, R₄₀, R₅₀, b₂ 내지 b₆, b₂₀, b₃₀, b₄₀ 및 b₅₀에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하고,

고리 A_{1a} 및 고리 A_{1b}에 대한 설명은 제1항 중 고리 A₁에 대한 설명과 동일하고,

고리 A_{2a} 및 고리 A_{2b}에 대한 설명은 제1항 중 고리 A₂에 대한 설명과 동일하고,

R_{20a} 및 R_{20b}에 대한 설명은 제1항 중 R₂₀에 대한 설명과 동일하고,

ba₂₀ 및 bb₂₀에 대한 설명은 제1항 중 b₂₀에 대한 설명과 동일하고,

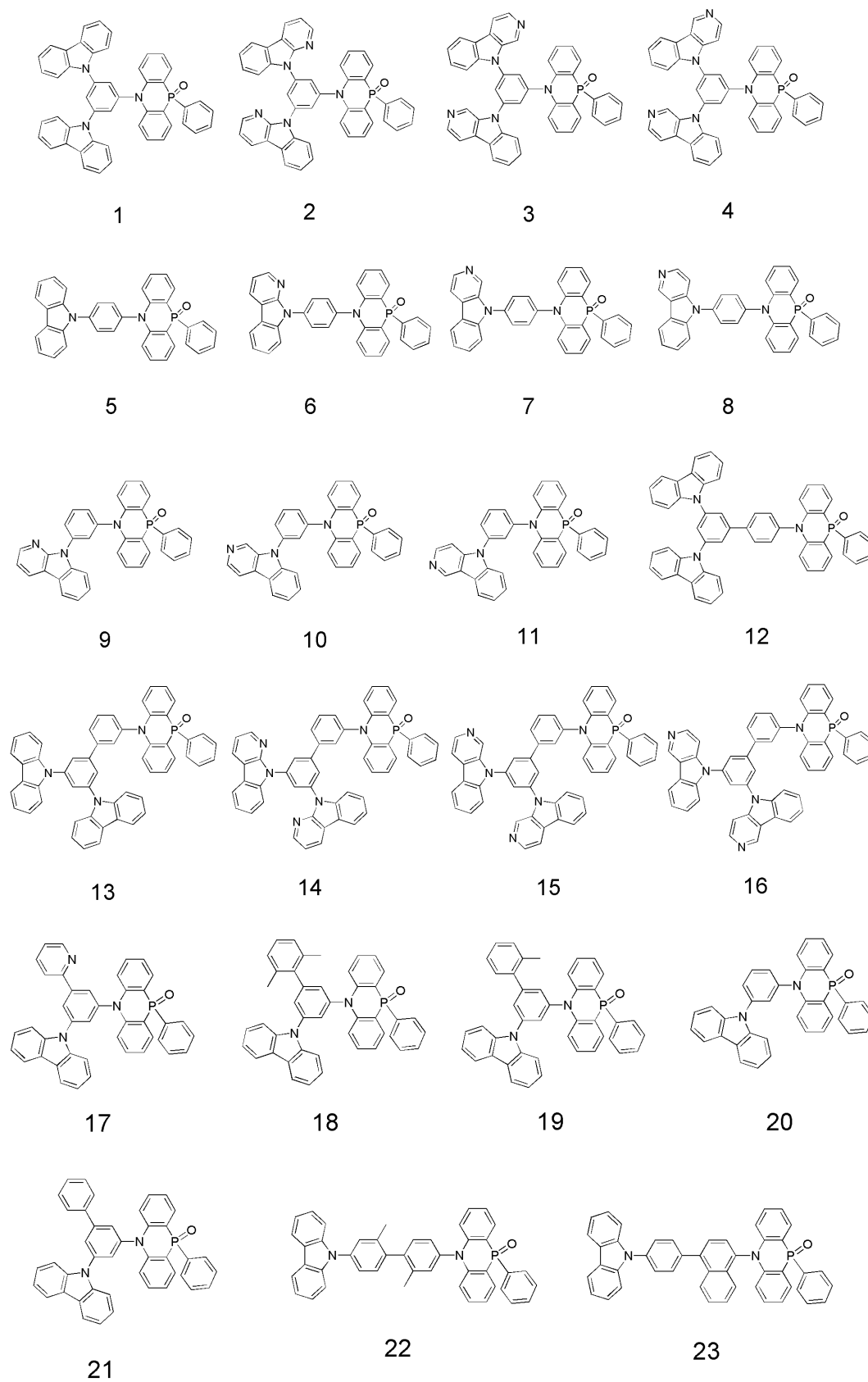
R_{30a} 및 R_{30b}에 대한 설명은 제1항 중 R₃₀에 대한 설명과 동일하고,

ba₃₀ 및 bb₃₀에 대한 설명은 제1항 중 b₃₀에 대한 설명과 동일하다.

청구항 15

제1항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 23 중 하나인, 카바줄계 화합물:



청구항 16

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

상기 유기층은 상기 제1항 내지 제15항 중 어느 한 항의 카바졸계 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 포함하고,

상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층 및 전자 저지층 중에서 선택된 적어도 하나를 포함하고,

상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나를 포함한 전자 수송 영역을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 18

제17항에 있어서,

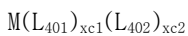
상기 발광층에 상기 카바졸계 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 19

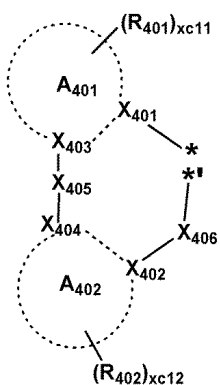
제18항에 있어서,

상기 발광층은 하기 화학식 401로 표시되는 유기 금속 착체를 포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 401>



<화학식 402>



상기 화학식 401 및 402 중,

M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 로듐(Rh) 및 톨륨(Tm) 중에서 선택되고,

L_{401} 은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, $xc1$ 은 1, 2 또는 3이고, $xc1$ 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{401} 은 서로 동일하거나 상이하고,

L₄₀₂는 유기 리간드이고, xc2는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, xc2가 2 이상일 경우 2 이상의 L₄₀₂는 서로 동일하거나 상이하고,

X₄₀₁ 내지 X₄₀₄는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

X₄₀₁과 X₄₀₃은 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고, X₄₀₂와 X₄₀₄는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,

A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

X₄₀₅는 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(=O)-*, *-N(Q₄₁₁)-*, *-C(Q₄₁₁)(Q₄₁₂)-*, *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*, *-C(Q₄₁₁)=* 또는 *=C(Q₄₁₁)=*이고, 상기 Q₄₁₁ 및 Q₄₁₂는, 수소, 중수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,

X₄₀₆은 단일 결합, O 또는 S이고,

R₄₀₁ 및 R₄₀₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 -Si(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)(Q₄₀₃), -N(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -B(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -C(=O)(Q₄₀₁), -S(=O)₂(Q₄₀₁) 및 -P(=O)(Q₄₀₁)(Q₄₀₂) 중에서 선택되고, 상기 Q₄₀₁ 내지 Q₄₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기 및 C₁-C₂₀헤테로아릴기 중에서 선택되고,

xc11 및 xc12는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

상기 화학식 402 중 * 및 *'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.

청구항 20

제19항에 있어서,

상기 발광층 중 상기 카바졸계 화합물의 함량은 상기 유기 금속 착체의 함량보다 큰, 유기 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 카바졸계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[0003] 상기 유기 발광 소자는 기판 상부에 제1전극이 배치되어 있고, 상기 제1전극 상부에 정공 수송 영역(hole transport region), 발광층, 전자 수송 영역(electron transport region) 및 제2전극이 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 상기 제1전극으로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 제2전극으로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

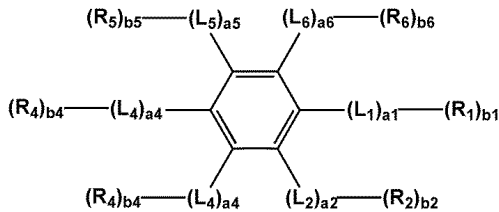
해결하려는 과제

[0004] 신규 카바졸계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

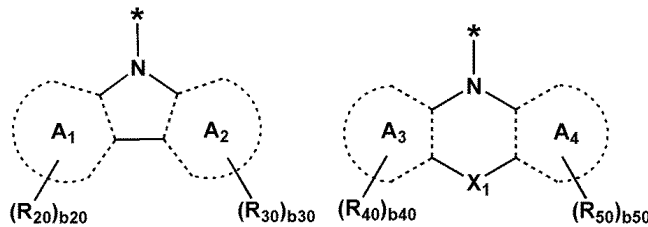
[0005] 일 측면에 따르면 하기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물이 제공된다:

[0006] <화학식 1>



[0007]

[0008] <화학식 2A> <화학식 2B>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중,

[0011] X_1 은 $P(=O)[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b1}]$, $P(=S)[(L_{12})_{a12}-(R_{12})_{b12}]$, $S(=O)$ 및 $S(=O)_2$ 중에서 선택되고,

[0012] 고리 A_1 고리 내지 고리 A_4 는 서로 독립적으로, C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 및 C_2-C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0013] L_1 내지 L_6 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group) 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group) 중에서 선택되고,

[0014] a_1 내지 a_6 , a_{11} 및 a_{12} 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, a_1 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_1 은 서로 동일하거나 상이하고, a_2 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_2 는 서로 동일하거나 상이하고, a_3 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_3 은 서로 동일하거나 상이하고, a_4 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_4 는 서로 동일하거나 상이하고, a_5 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_5 는 서로 동일하거나 상이하고, a_6 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_6 은 서로 동일하거나 상이하고, a_{11} 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{11} 은 서로 동일하거나 상이하고, a_{12} 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_{12} 는 서로 동일하거나 상이하고,

[0015] R_1 내지 R_6 , R_{11} , R_{12} , R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 은 서로 독립적으로, 상기 화학식, 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된

된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group), $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$ 및 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되고,

[0016] b1 내지 b6, b11, b12, b20, b30, b40 및 b50은 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b1이 2 이상일 경우 2 이상의 R_1 은 서로 동일하거나 상이하고, b2가 2 이상일 경우 2 이상의 R_2 는 서로 동일하거나 상이하고, b3이 2 이상일 경우 2 이상의 R_3 는 서로 동일하거나 상이하고, b4가 2 이상일 경우 2 이상의 R_4 는 서로 동일하거나 상이하고, b5가 2 이상일 경우 2 이상의 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, b6가 2 이상일 경우 2 이상의 R_6 는 서로 동일하거나 상이하고, b11이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{11} 은 서로 동일하거나 상이하고, b12가 2 이상일 경우 2 이상의 R_{12} 는 서로 동일하거나 상이하고, b20이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{20} 은 서로 동일하거나 상이하고, b30이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{30} 은 서로 동일하거나 상이하고, b40이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{40} 은 서로 동일하거나 상이하고, b50이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{50} 은 서로 동일하거나 상이하고,

[0017] R_1 내지 R_6 중 적어도 하나는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이고, R_1 내지 R_6 중 적어도 하나는 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이고,

[0018] 상기 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나는,

[0019] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기;

[0020] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, $-B(Q_{11})(Q_{12})$, $-C(=O)(Q_{11})$, $-S(=O)_2(Q_{11})$ 및 $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기;

[0021] C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0022] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$ 및 $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10} 시클로

알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

-Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상술한 바와 같은 카바졸계 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

상기 카바졸계 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동전압 및 고효율을 가질 수 있다.

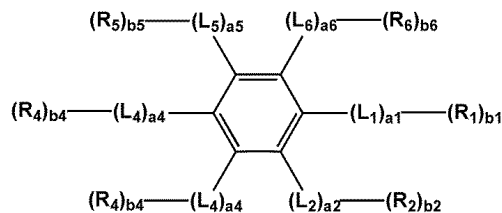
도면의 간단한 설명

도 1 내지 4는 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 각각 개략적으로 나타낸 도면이다.

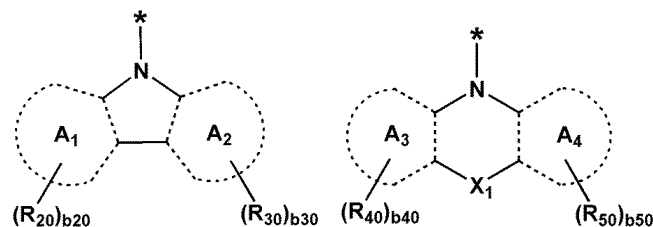
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

상기 카바졸계 화합물은, 하기 화학식 1로 표시된다:

<화학식 1>



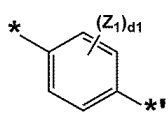
<화학식 2A> <화학식 2B>



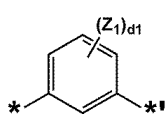
상기 화학식 2B 중 X₁은 P(=O)[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}], P(=S)[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}], S(=O) 및 S(=O)₂ 중에서 선택될 수 있다. 여기서, L₁₁, L₁₂, a₁₁, a₁₂, R₁₁, R₁₂, b₁₁ 및 b₁₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

상기 화학식 2B 중 X₁은 2가(divalent) 그룹으로서 중심 원소 (예를 들어, P 또는 S 등)가 이웃한 탄소 원자와 각각 결합되어 있고, 상기 중심 원소는 (=O), (=S), (=O)₂, [(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}] 또는 [(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]에 추가로 결합되어 있다.

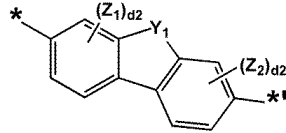
- [0036] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중 X_1 은 $P(=O)[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b1}]$ 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0037] 상기 화학식 2A 중 고리 A_1 및 고리 A_2 각각은 이웃한 5원 고리에 탄소 원자를 서로 공유하면서 융합되어 있고, 상기 화학식 2B 중 고리 A_3 및 고리 A_4 각각은 이웃한 6원 고리에 탄소 원자를 서로 공유하면서 융합되어 있다.
- [0038] 상기 화학식 2A 및 2B 중 고리 A_1 고리 내지 고리 A_4 는 서로 독립적으로, C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 및 C_2-C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0039] 예를 들어, 상기 화학식 2A 및 2B 중 고리 A_1 고리 내지 고리 A_4 는 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 안트라센, 트리페닐렌, 파이렌, 플루오렌, 스퀴아로-비플루오렌, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴녹살린 및 퀴나졸린 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 고리 A_1 고리 내지 고리 A_4 는 벤젠 및 피리딘 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0040] 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 L_1 내지 L_6 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group) 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group) 중에서 선택될 수 있다.
- [0041] 예를 들어, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 L_1 내지 L_6 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로,
- [0042] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴아로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기 및 벤조카바졸일렌기; 및
- [0043] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴아로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸기레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴아로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기 및 벤조카바졸일렌기;
- [0044] 중에서 선택되고,
- [0045] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0046] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 L_1 내지 L_6 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로, 하기 화학식 3-1 내지 화학식 3-41로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



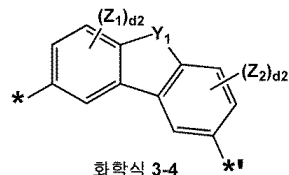
화학식 3-1



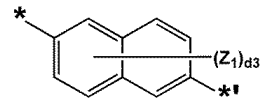
화학식 3-2



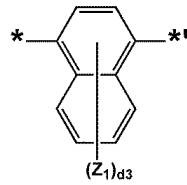
화학식 3-3



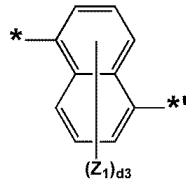
화학식 3-4



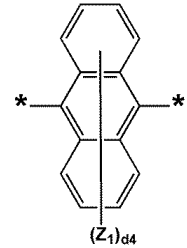
화학식 3-5



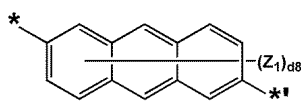
화학식 3-6



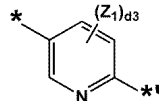
화학식 3-7



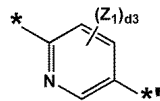
화학식 3-8



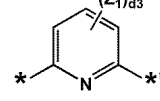
화학식 3-9



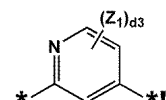
화학식 3-10



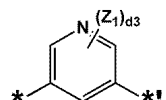
화학식 3-11



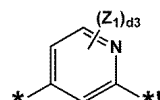
화학식 3-12



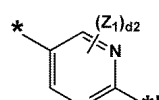
화학식 3-13



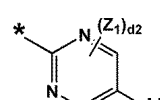
화학식 3-14



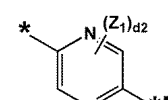
화학식 3-15



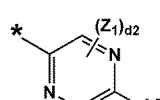
화학식 3-16



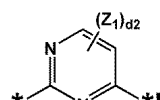
화학식 3-17



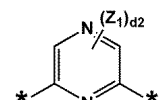
화학식 3-18



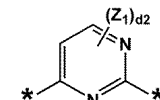
화학식 3-19



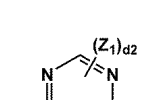
화학식 3-20



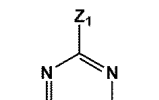
화학식 3-21



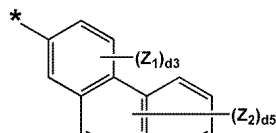
화학식 3-22



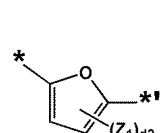
화학식 3-23



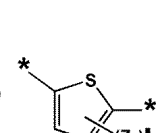
화학식 3-24



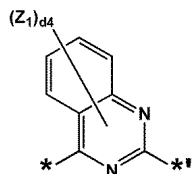
화학식 3-25



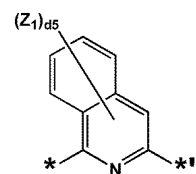
화학식 3-26



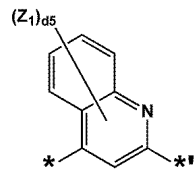
화학식 3-27



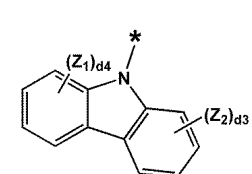
화학식 3-28



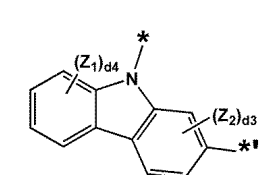
화학식 3-29



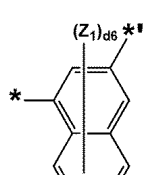
화학식 3-30



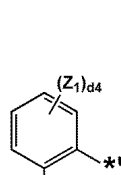
화학식 3-31



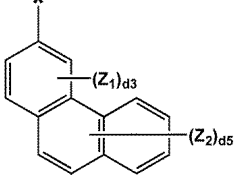
화학식 3-32



화학식 3-33



화학식 3-34

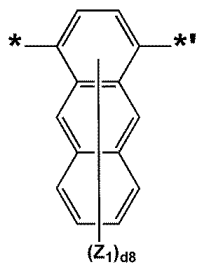


화학식 3-35

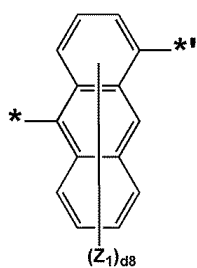
[0047]

[0048]

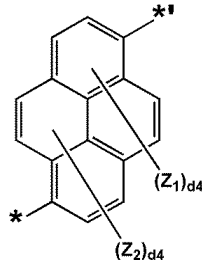
[0049]



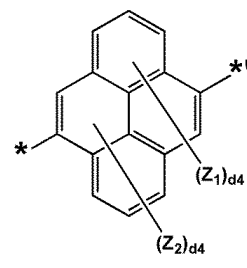
화학식 3-36



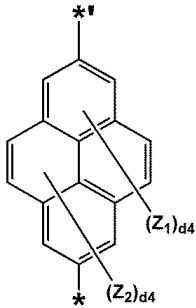
화학식 3-37



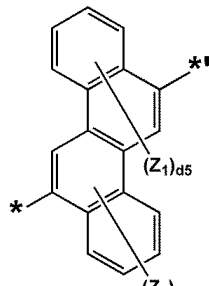
화학식 3-38



화학식 3-39



화학식 3-40



화학식 3-41

[0050]

상기 화학식 3-1 내지 3-41 중,

[0051]

Y_1 은 O, S, $C(Z_3)(Z_4)$, $N(Z_5)$ 또는 $Si(Z_6)(Z_7)$ 이고,

[0052]

Z_1 내지 Z_7 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 트리아지닐기, 벤조이미다졸일기, 페난트롤리닐기 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택되고,

[0053]

상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택되고,

[0054]

d_2 는 0 내지 2 중에서 선택된 정수이고,

[0055]

d_3 는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

[0056]

d_4 는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

[0057]

d_5 는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

[0058]

d_6 은 0 내지 6 중에서 선택된 정수이고,

[0059]

d_8 은 0 내지 8 중에서 선택된 정수이고,

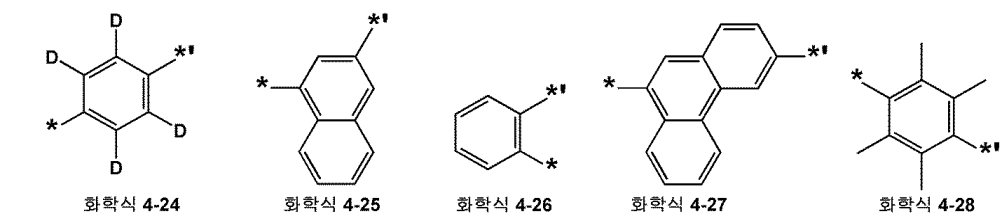
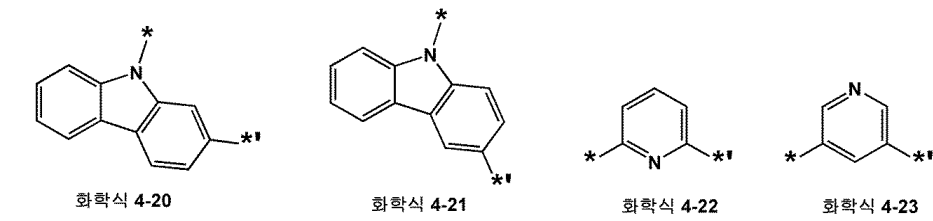
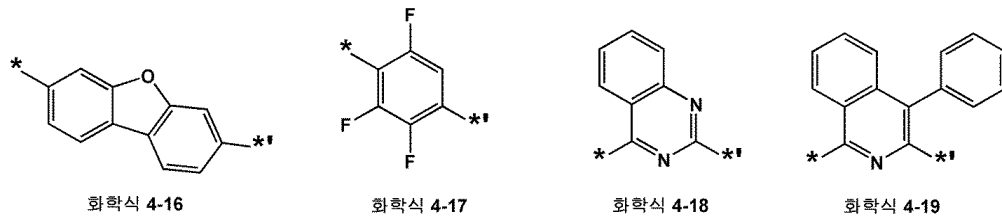
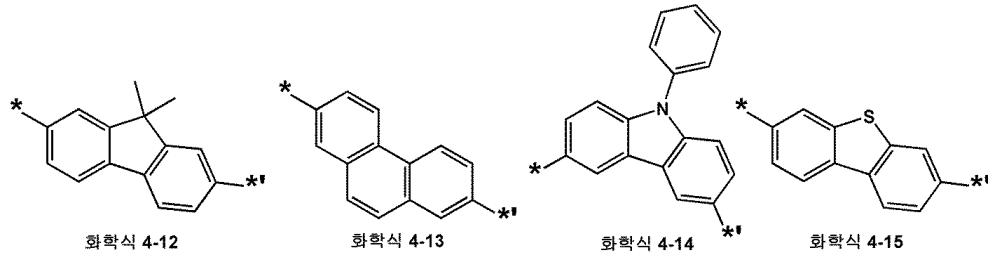
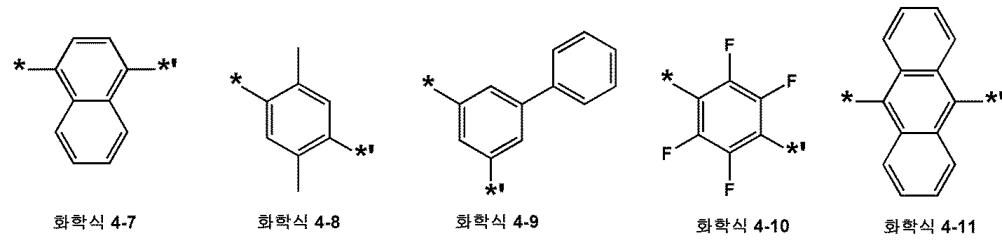
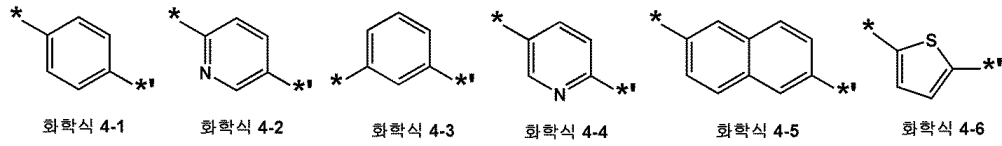
[0060]

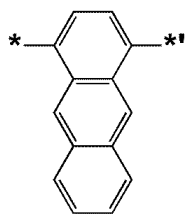
* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0061]

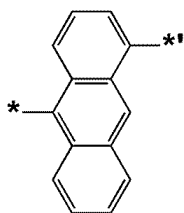
일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 L_1 내지 L_6 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로, 하기 화학식 4-1 내지 4-41로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:

[0062]

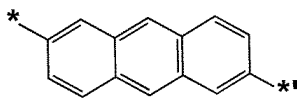




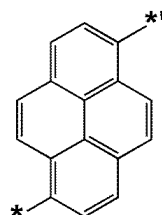
화학식 4-29



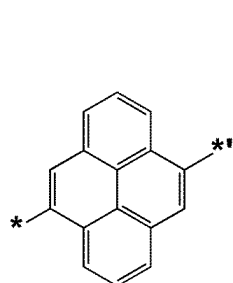
화학식 4-30



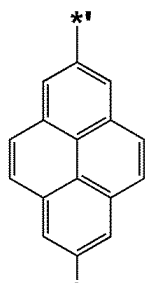
화학식 4-31



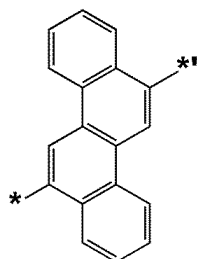
화학식 4-32



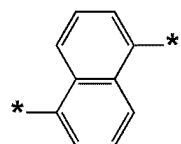
화학식 4-33



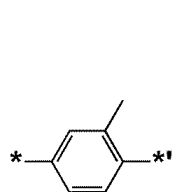
화학식 4-34



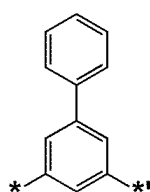
화학식 4-35



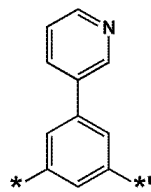
화학식 4-36



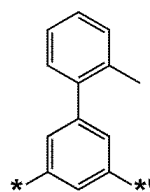
화학식 4-37



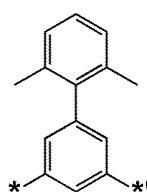
화학식 4-38



화학식 4-39



화학식 4-40



화학식 4-41

상기 화학식 4-1 내지 4-41 중 * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 a1 내지 a6, a11 및 a12는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택될 수 있다. a1은 상기 화학식 1 중 L₁의 개수를 나타낸 것으로서, a1이 0일 경우 *-(L₁)_{a1}-*'는 단일 결합이 된다. a1이 2 이상일 경우, 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하다. A2 내지 a6, a11 및 a12에 대한 설명은 상기 a1에 대한 설명과 화학식 1, 2A 및 2B의 구조를 참조하여 이해될 수 있다.

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 a1 내지 a6, a11 및 a12는 서로 독립적으로, 0 또는 1일 수 있다.

상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 R₁ 내지 R₆, R₁₁, R₁₂, R₂₀, R₃₀, R₄₀ 및 R₅₀은 서로 독립적으로, 상기 화학식, 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group), -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택될 수 있다.

예를 들어, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 R₁ 내지 R₆, R₁₁, R₁₂, R₂₀, R₃₀, R₄₀ 및 R₅₀은 서로 독립적으로, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된

C₁-C₂₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₂₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 및 -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 중에서 선택될 수 있다.

[0072] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중

[0073] R₁ 내지 R₆, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로,

[0074] 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 디벤조실릴일기; 및

[0075] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 디벤조실릴일기; 및

[0076] 중에서 선택되고,

[0077] R₂₀, R₃₀, R₄₀ 및 R₅₀은 서로 독립적으로,

[0078] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0079] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기 및 히드라조노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0080] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 디벤조실릴일기;

[0081] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤

조카바줄일기, 디벤조실롤일기, $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴airo-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바줄일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바줄일기, 디벤조카바줄일기 및 디벤조실롤일기; 및

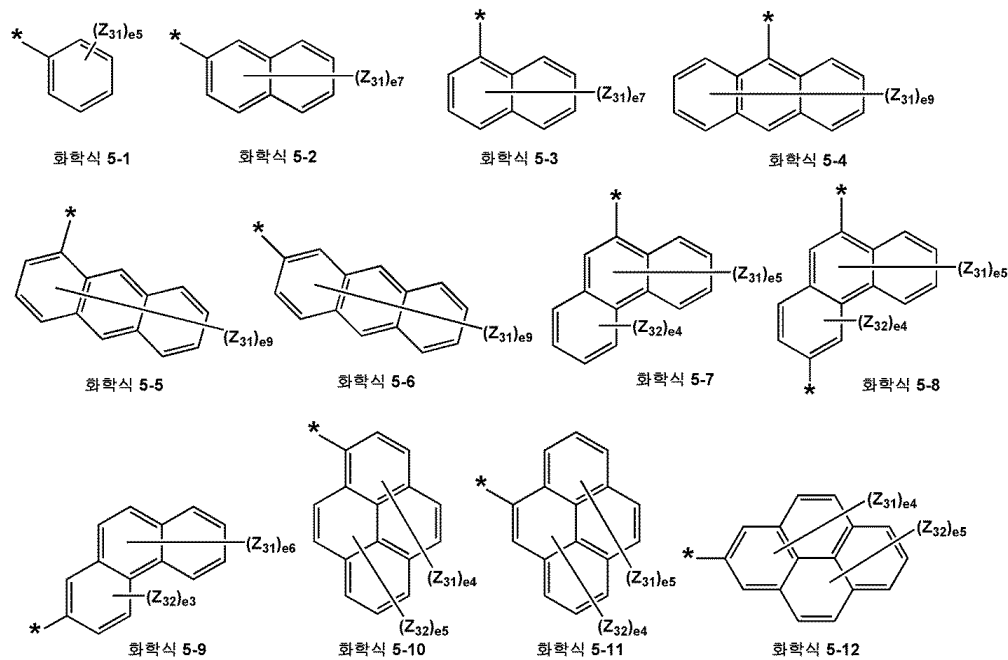
[0082] $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$;

[0083] 중에서 선택되고,

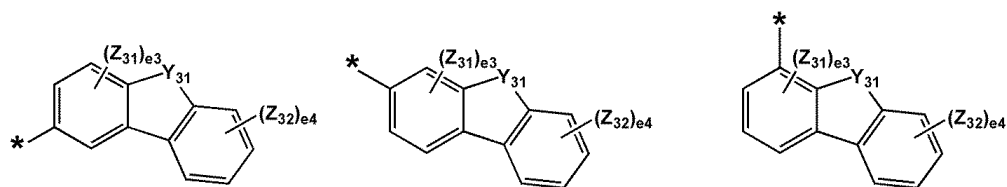
[0084] 상기 Q_1 내지 Q_3 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0085] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 R_1 내지 R_6 , R_{11} 및 R_{12} 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 5-1 내지 5-8로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

[0086] R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 하기 화학식 5-1 내지 5-8로 표시되는 그룹 및 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ (단, 상기 Q_1 내지 Q_3 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택됨) 중에서 선택될 수 있다:



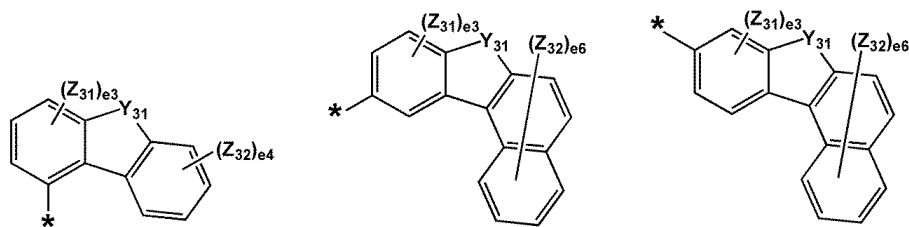
[0087]



화학식 5-13

화학식 5-14

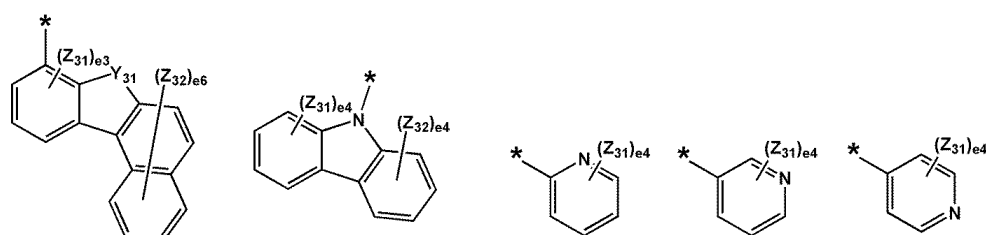
화학식 5-15



화학식 5-16

화학식 5-17

화학식 5-18



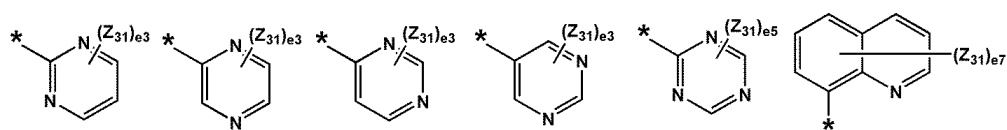
화학식 5-19

화학식 5-20

화학식 5-21

화학식 5-22

화학식 5-23



화학식 5-24

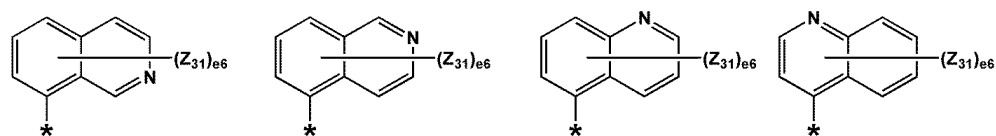
화학식 5-25

화학식 5-26

화학식 5-27

화학식 5-28

화학식 5-29

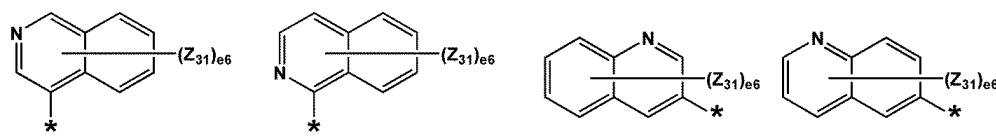


화학식 5-30

화학식 5-31

화학식 5-32

화학식 5-33

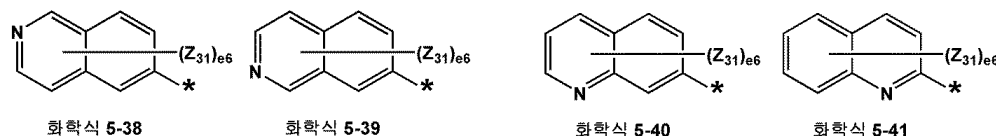


화학식 5-34

화학식 5-35

화학식 5-36

화학식 5-37

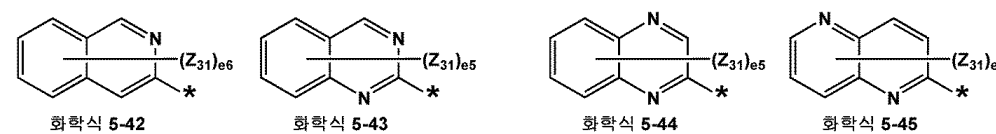


화학식 5-38

화학식 5-39

화학식 5-40

화학식 5-41

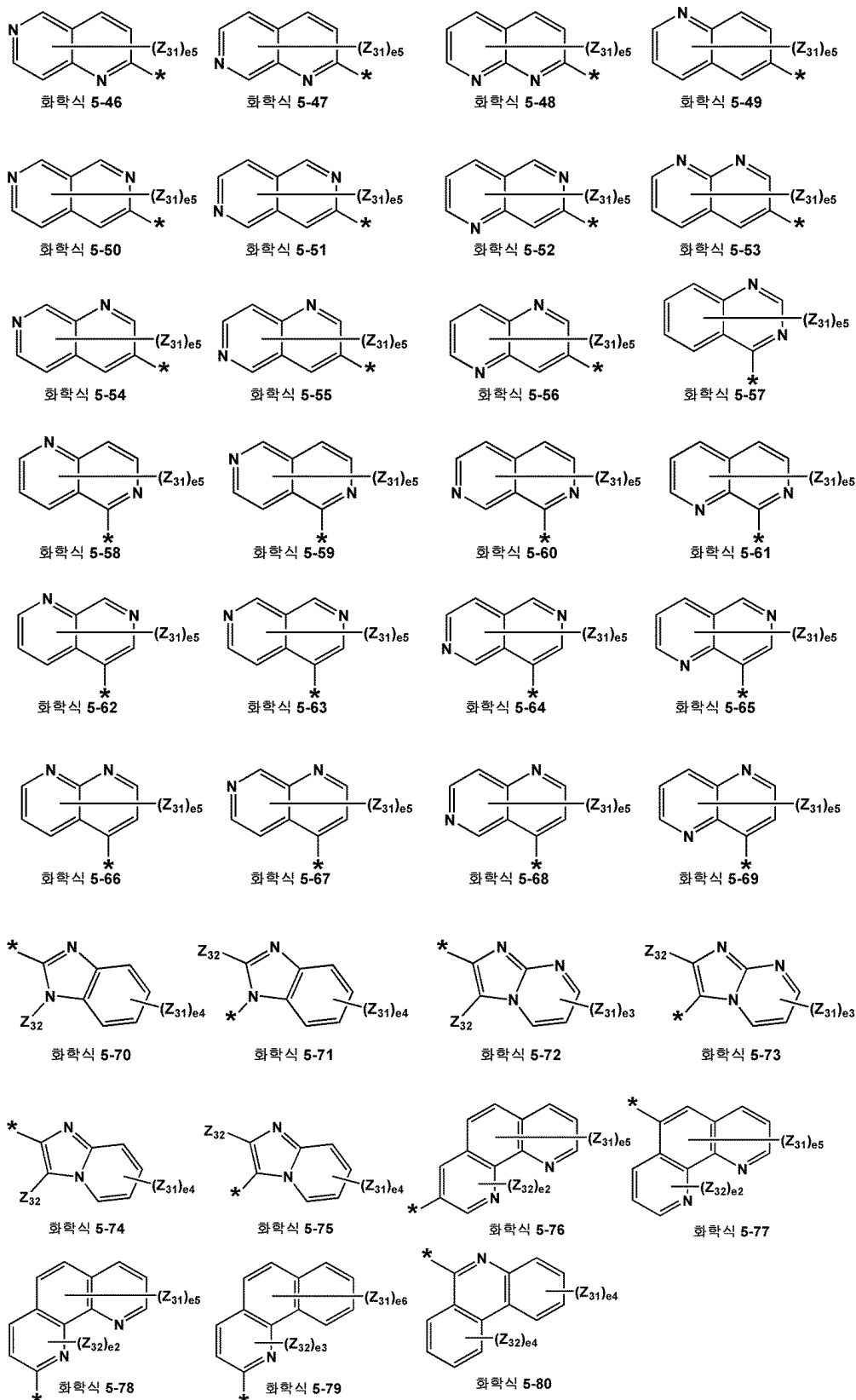


화학식 5-42

화학식 5-43

화학식 5-44

화학식 5-45



상기 화학식 5-1 내지 5-80 중,

Y_{31} 은 O, S, $C(Z_{33})(Z_{34})$, $N(Z_{35})$ 또는 $Si(Z_{36})(Z_{37})$ 이고;

Z_{31} 내지 Z_{37} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오

레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조이미다졸일기, 페난트롤리닐기, 트리아지닐기, $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택되고,

[0097] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택되고,

[0098] e_3 은 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

[0099] e_4 은 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

[0100] e_5 은 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

[0101] e_6 은 0 내지 6 중에서 선택된 정수이고,

[0102] e_7 은 0 내지 7 중에서 선택된 정수이고,

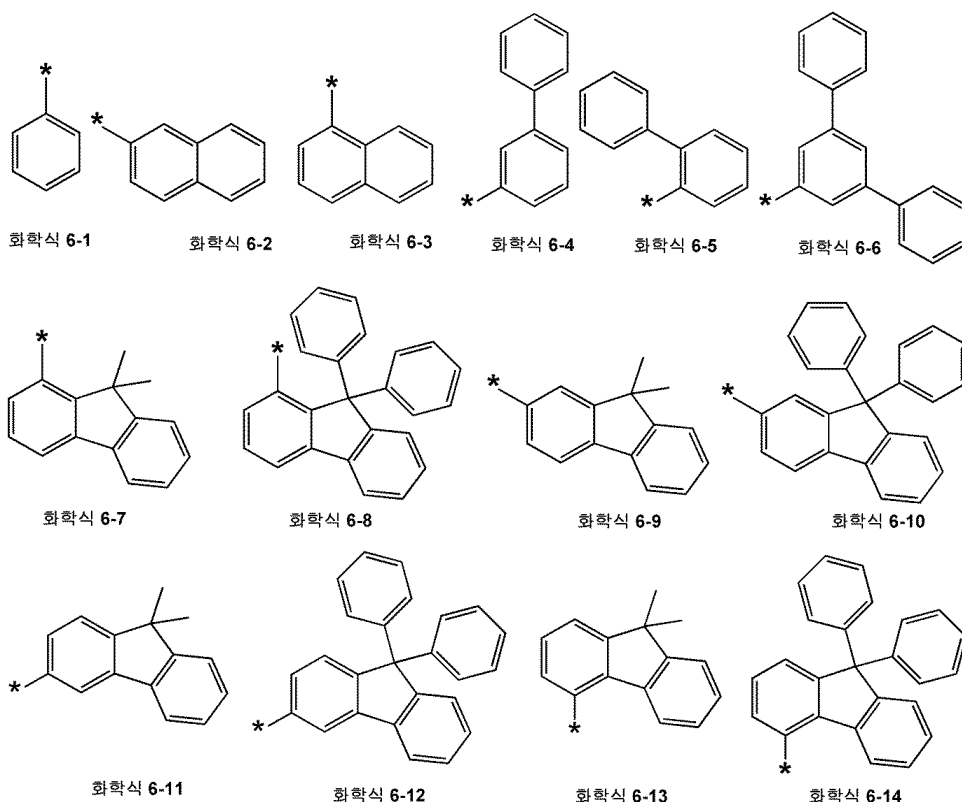
[0103] e_8 은 0 내지 8 중에서 선택된 정수이고,

[0104] e_9 은 0 내지 9 중에서 선택된 정수이고,

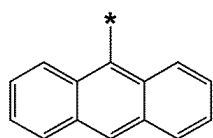
[0105] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0106] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 R_1 내지 R_6 , R_{11} 및 R_{12} 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 하기 화학식 6-1 내지 6-35으로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-129으로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

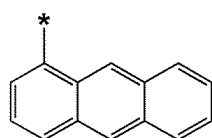
[0107] R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 하기 화학식 6-1 내지 6-35으로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-129로 표시되는 그룹 및 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ (단, 상기 Q_1 내지 Q_3 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택됨) 중에서 선택될 수 있다:



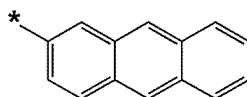
[0108]



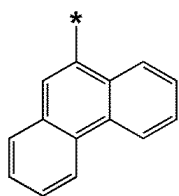
화학식 6-15



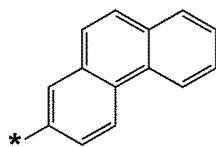
화학식 6-16



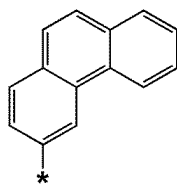
화학식 6-17



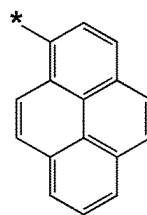
화학식 6-18



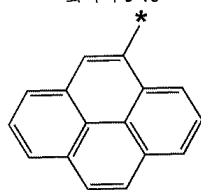
화학식 6-19



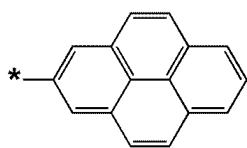
화학식 6-20



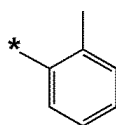
화학식 6-21



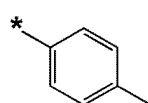
화학식 6-22



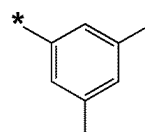
화학식 6-23



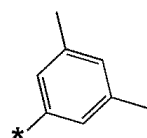
화학식 6-24



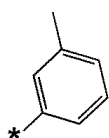
화학식 6-25



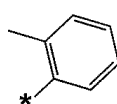
화학식 6-26



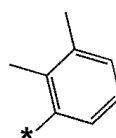
화학식 6-27



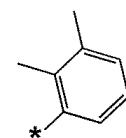
화학식 6-28



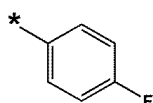
화학식 6-29



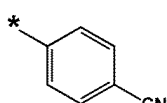
화학식 6-30



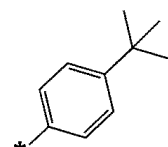
화학식 6-31



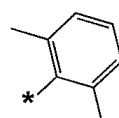
화학식 6-32



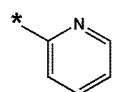
화학식 6-33



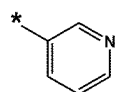
화학식 6-34



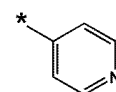
화학식 6-35



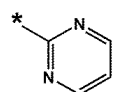
화학식 10-1



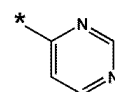
화학식 10-2



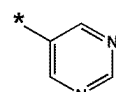
화학식 10-3



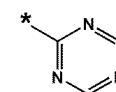
화학식 10-4



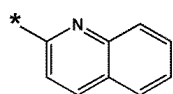
화학식 10-5



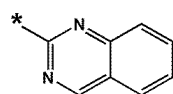
화학식 10-6



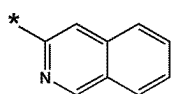
화학식 10-7



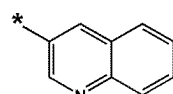
화학식 10-8



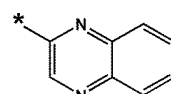
화학식 10-9



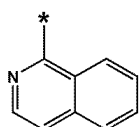
화학식 10-10



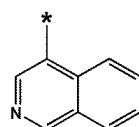
화학식 10-11



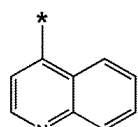
화학식 10-12



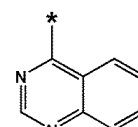
화학식 10-13



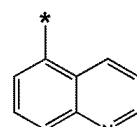
화학식 10-14



화학식 10-15



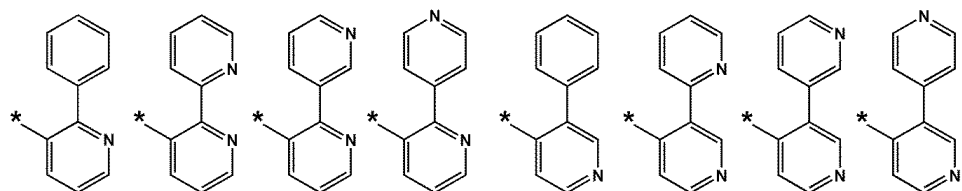
화학식 10-16



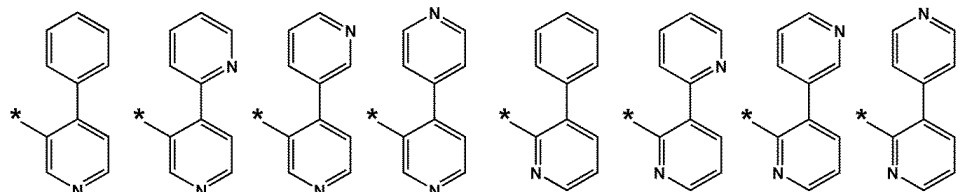
화학식 10-17

[0109]

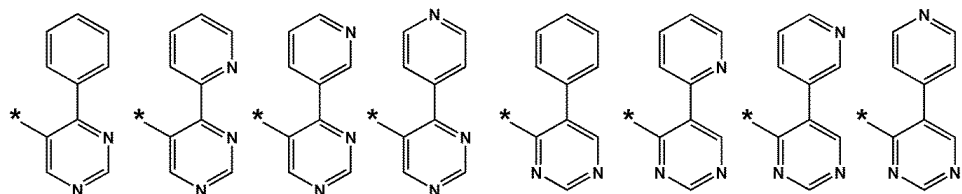
[0110]



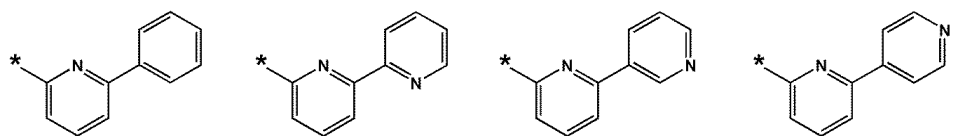
화학식 10-18 화학식 10-19 화학식 10-20 화학식 10-21 화학식 10-22 화학식 10-23 화학식 10-24 화학식 10-25



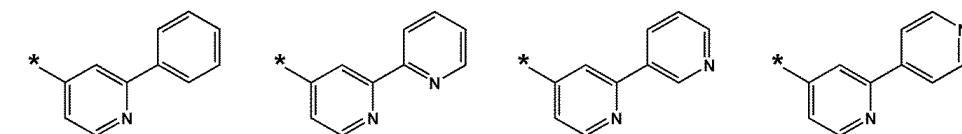
화학식 10-26 화학식 10-27 화학식 10-28 화학식 10-29 화학식 10-30 화학식 10-31 화학식 10-32 화학식 10-33



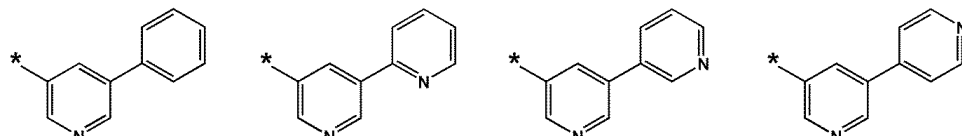
화학식 10-34 화학식 10-35 화학식 10-36 화학식 10-37 화학식 10-38 화학식 10-39 화학식 10-40 화학식 10-41



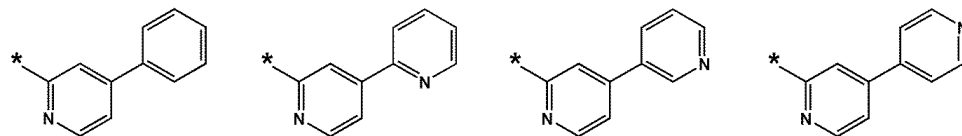
화학식 10-42 화학식 10-43 화학식 10-44 화학식 10-45



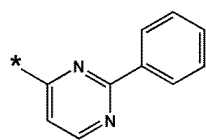
화학식 10-46 화학식 10-47 화학식 10-48 화학식 10-49



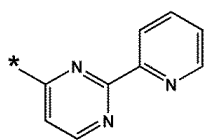
화학식 10-50 화학식 10-51 화학식 10-52 화학식 10-53



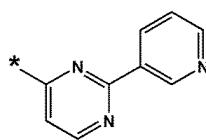
화학식 10-54 화학식 10-55 화학식 10-56 화학식 10-57



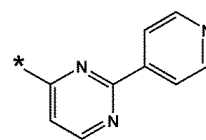
화학식 10-58



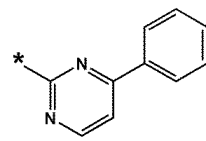
화학식 10-59



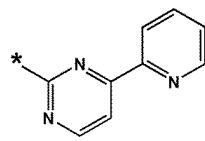
화학식 10-60



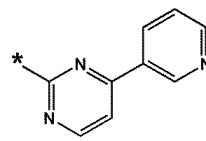
화학식 10-61



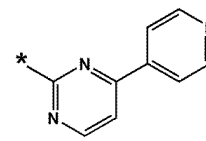
화학식 10-62



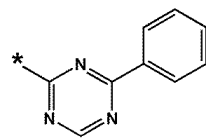
화학식 10-63



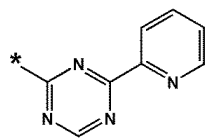
화학식 10-64



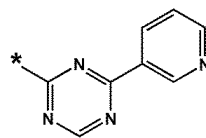
화학식 10-65



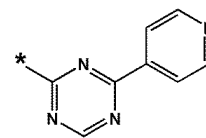
화학식 10-66



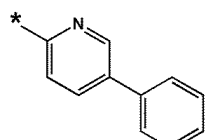
화학식 10-67



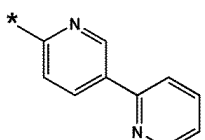
화학식 10-68



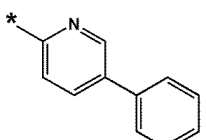
화학식 10-69



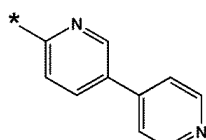
화학식 10-70



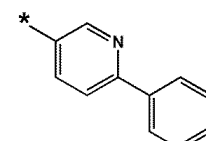
화학식 10-71



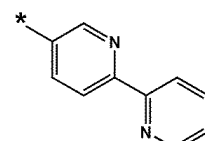
화학식 10-72



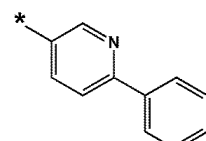
화학식 10-73



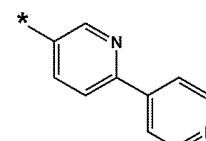
화학식 10-74



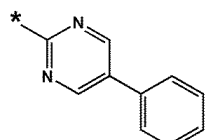
화학식 10-75



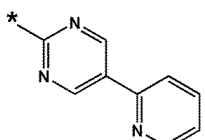
화학식 10-76



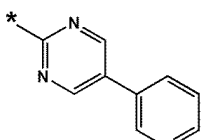
화학식 10-77



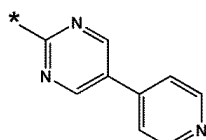
화학식 10-78



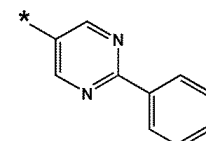
화학식 10-79



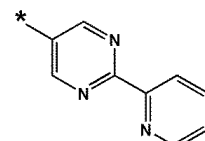
화학식 10-80



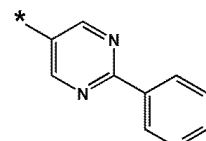
화학식 10-81



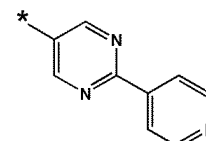
화학식 10-82



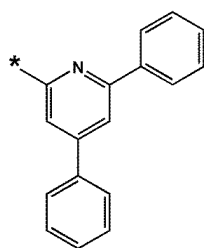
화학식 10-83



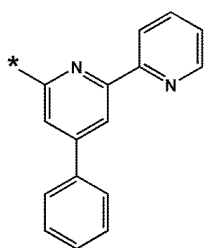
화학식 10-84



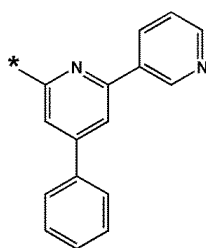
화학식 10-85



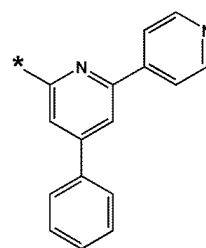
화학식 10-86



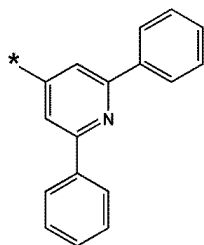
화학식 10-87



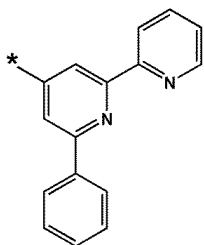
화학식 10-88



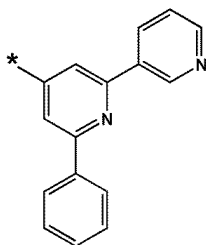
화학식 10-89



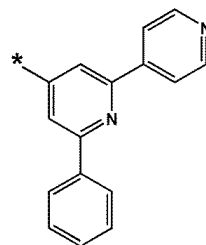
화학식 10-90



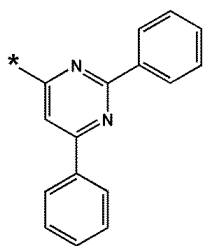
화학식 10-91



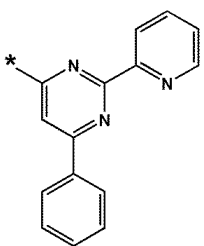
화학식 10-92



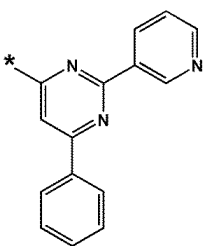
화학식 10-93



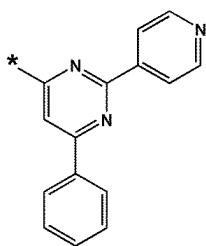
화학식 10-94



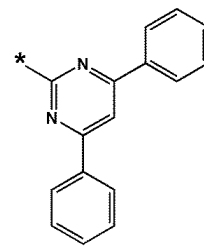
화학식 10-95



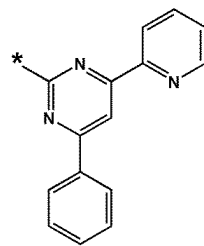
화학식 10-96



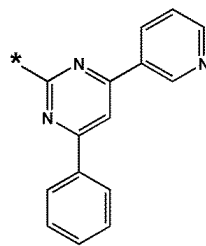
화학식 10-97



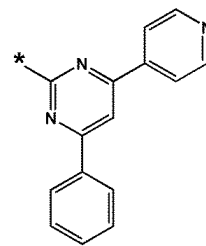
화학식 10-98



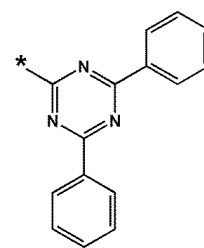
화학식 10-99



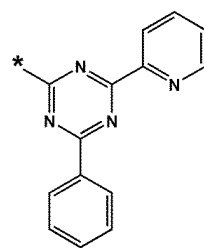
화학식 10-100



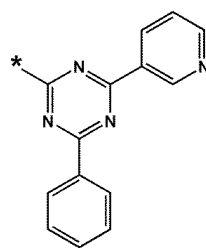
화학식 10-101



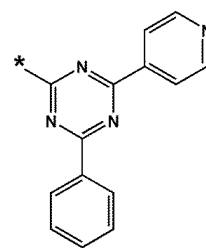
화학식 10-102



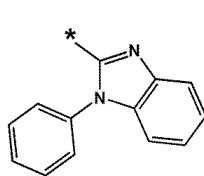
화학식 10-103



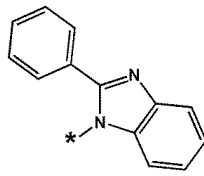
화학식 10-104



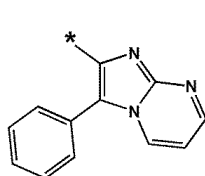
화학식 10-105



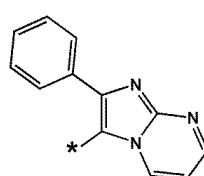
화학식 10-106



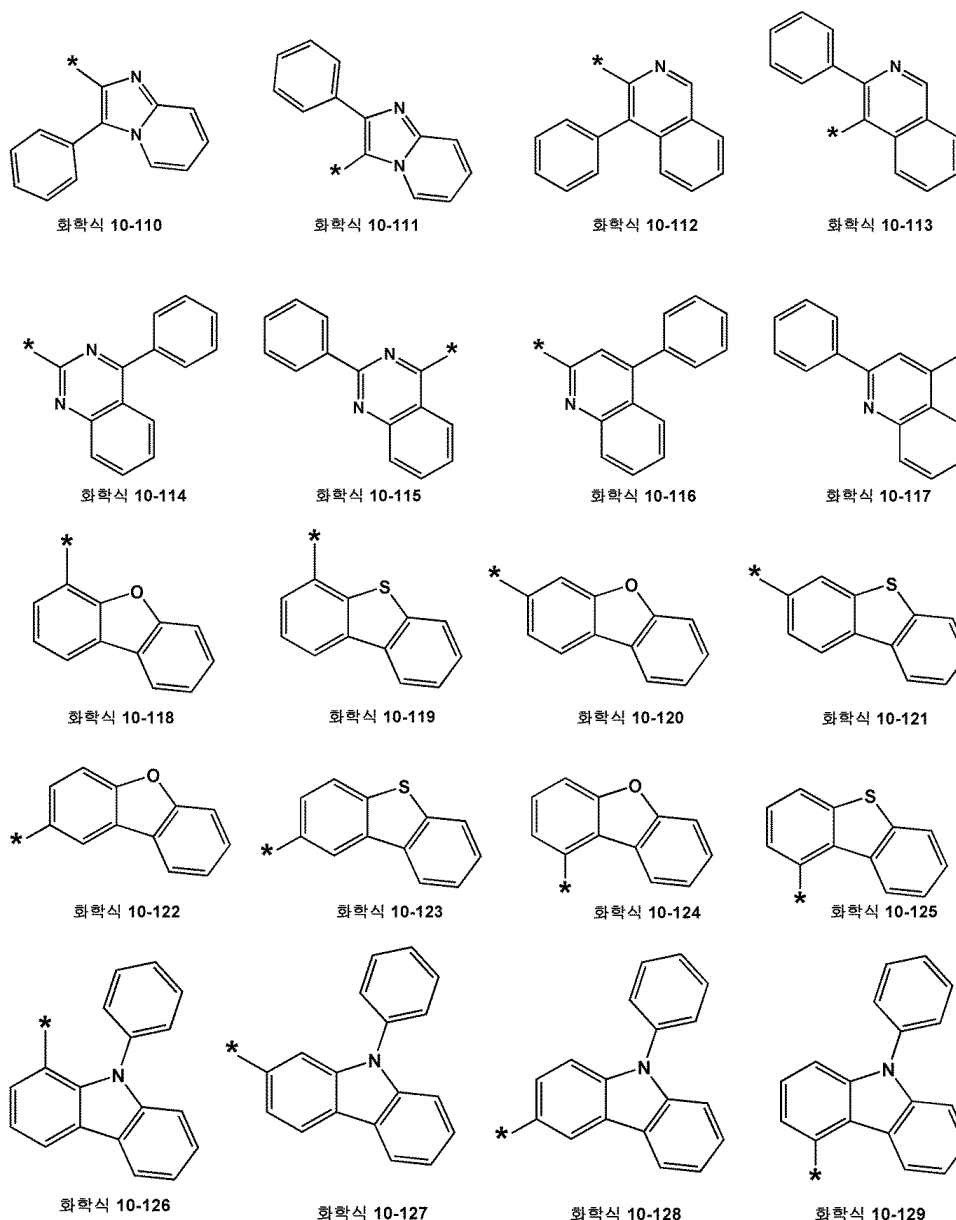
화학식 10-107



화학식 10-108



화학식 10-109

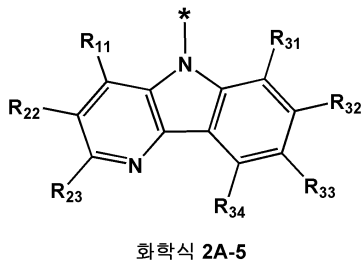
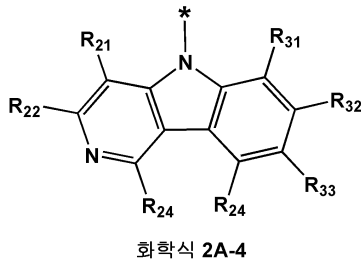
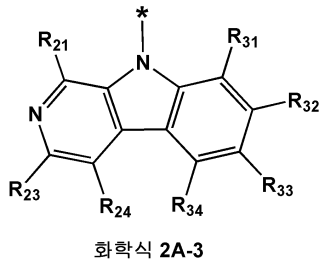
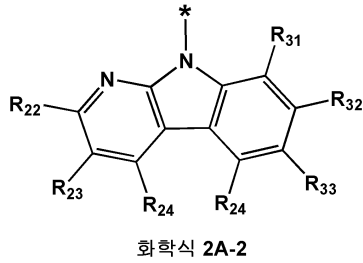
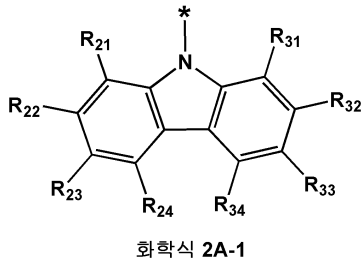


- [0111] 상기 화학식 6-1 내지 6-35 및 10-1 내지 10-129 중 *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0112] 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중 b1 내지 b6, b11, b12, b20, b30, b40 및 b50은 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택될 수 있다. b1은 상기 화학식 1 중 R₁의 개수를 나타낸 것으로서, b1이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. b2 내지 b6, b11, b12, b20, b30, b40 및 b50은 에 대한 설명은 상기 b1에 대한 설명과 상기 화학식 1, 2A 및 2B의 구조를 참조하여 이해될 수 있다.
- [0113] 일 구현예에 따르면, b1 내지 b6, b11, b12, b20, b30, b40 및 b50은 서로 독립적으로, 0 또는 1일 수 있다.
- [0114] 상기 화학식 1 중 R₁ 내지 R₆ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이고, R₁ 내지 R₆ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹일 수 있다.
- [0115] 즉, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹을 동시에 포함한다.
- [0116] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R₁ 내지 R₆ 중 1개 또는 2개가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이고, 상기 R₁ 내지 R₆ 중 1개가 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹일 수 있다.
- [0117] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R₁은 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이고, R₄는 상기 화학식 2A로 표

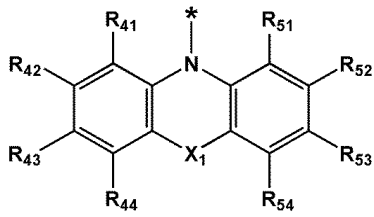
시되는 그룹이거나, 또는 상기 화학식 1 중 R_1 은 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이고, R_3 는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이거나, 또는 상기 화학식 1 중 R_1 은 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이고, R_3 및 R_5 는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0118]

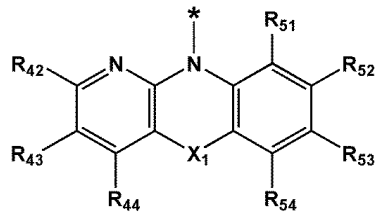
일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2A-1 내지 2A-5로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2B-1 내지 2B-5로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



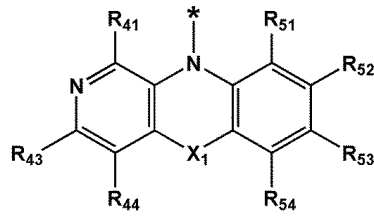
[0119]



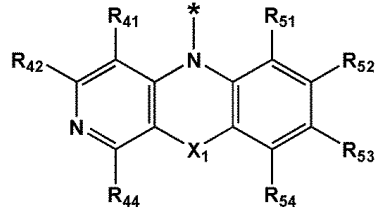
화학식 2B-1



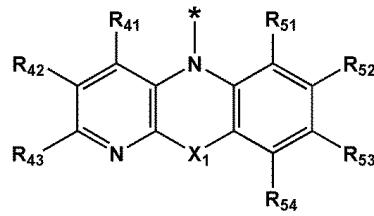
화학식 2B-2



화학식 2B-3



화학식 2B-4



화학식 2B-5

[0120]

[0121]

[0122]

[0123]

[0124]

[0125]

[0126]

[0127]

[0128]

상기 화학식 2A-1 내지 2A-5 및 2B-1 내지 2B-5 중,

X₁에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

R₂₁ 내 R₂₄에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀에 대한 설명을 참조하고,

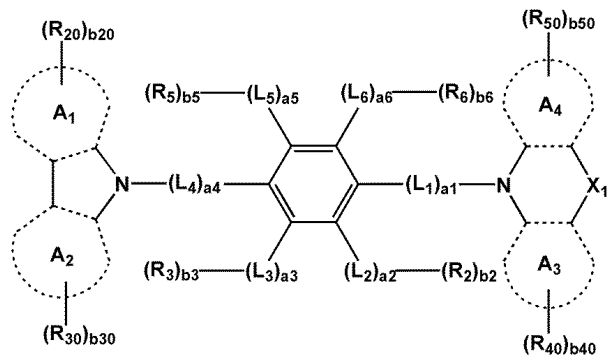
R₃₁ 내 R₃₄에 대한 설명은 본 명세서 중 R₃₀에 대한 설명을 참조하고,

R₄₁ 내 R₄₄에 대한 설명은 본 명세서 중 R₄₀에 대한 설명을 참조하고,

R₅₁ 내 R₅₄에 대한 설명은 본 명세서 중 R₅₀에 대한 설명을 참조한다.

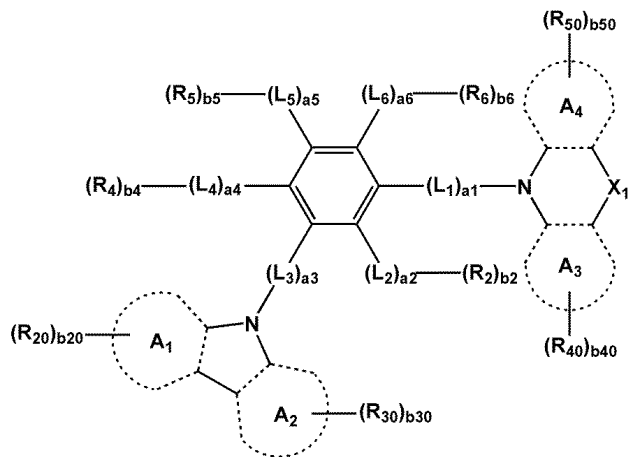
일 구현예에 따르면, 상기 카바졸계 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 하나로 표시될 수 있다:

<화학식 1-1>



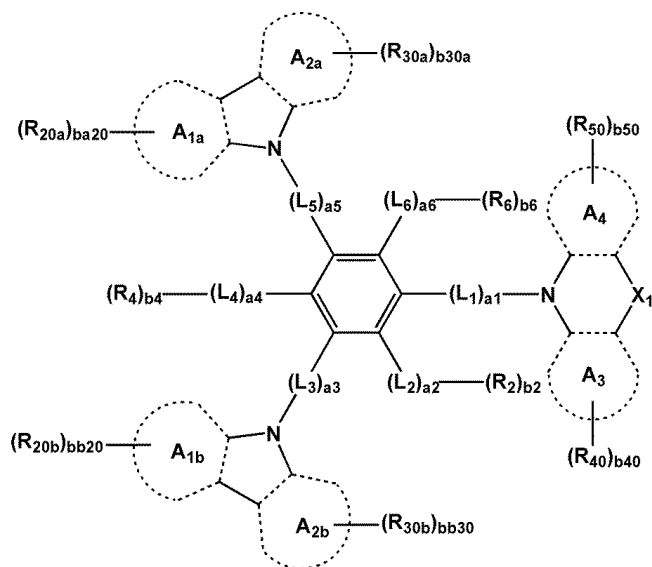
[0129]

[0130] <화학식 1-2>



[0131]

[0132] <화학식 1-3>



[0133]

[0134] 상기 화학식 1-1 내지 1-3 중 X_1 , 고리 A_1 내지 고리 A_4 , L_1 내지 L_6 , a_1 내지 a_6 , a_{11} , a_{12} , R_2 내지 R_6 , R_{20} , R_{30} , R_{40} , R_{50} , b_2 내지 b_6 , b_{20} , b_{30} , b_{40} 및 b_{50} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0135] 고리 A_{1a} 및 고리 A_{1b} 에 대한 설명은 본 명세서 중 고리 A_1 에 대한 설명을 참조하고,

[0136] 고리 A_{2a} 및 고리 A_{2b} 에 대한 설명은 본 명세서 중 고리 A_2 에 대한 설명을 참조하고,

[0137] R_{20a} 및 R_{20b} 에 대한 설명은 본 명세서 중 R_{20} 에 대한 설명을 참조하고,

[0138] ba_{20} 및 bb_{20} 에 대한 설명은 본 명세서 중 b_{20} 에 대한 설명을 참조하고,

[0139] R_{30a} 및 R_{30b} 에 대한 설명은 본 명세서 중 R_{30} 에 대한 설명을 참조하고,

[0140] ba_{30} 및 bb_{30} 에 대한 설명은 본 명세서 중 b_{30} 에 대한 설명을 참조한다.

[0141] 예를 들어, 상기 화학식 1-1 내지 1-3 중

[0142] X_1 은 $P(=O)[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ 이고,

[0143] 고리 A_1 내지 고리 A_4 , 고리 A_{1a} , 고리 A_{1b} , 고리 A_{2a} 및 고리 A_{2b} 는 서로 독립적으로, 벤젠 및 피리딘 중에서 선택되고,

[0144] L_1 내지 L_6 및 L_{11} 은 서로 독립적으로, 상기 화학식 3-1 내지 화학식 3-41로 표시되는 그룹 (예를 들어, 상기 화학식 4-1 내지 화학식 4-41로 표시되는 그룹) 중에서 선택되고,

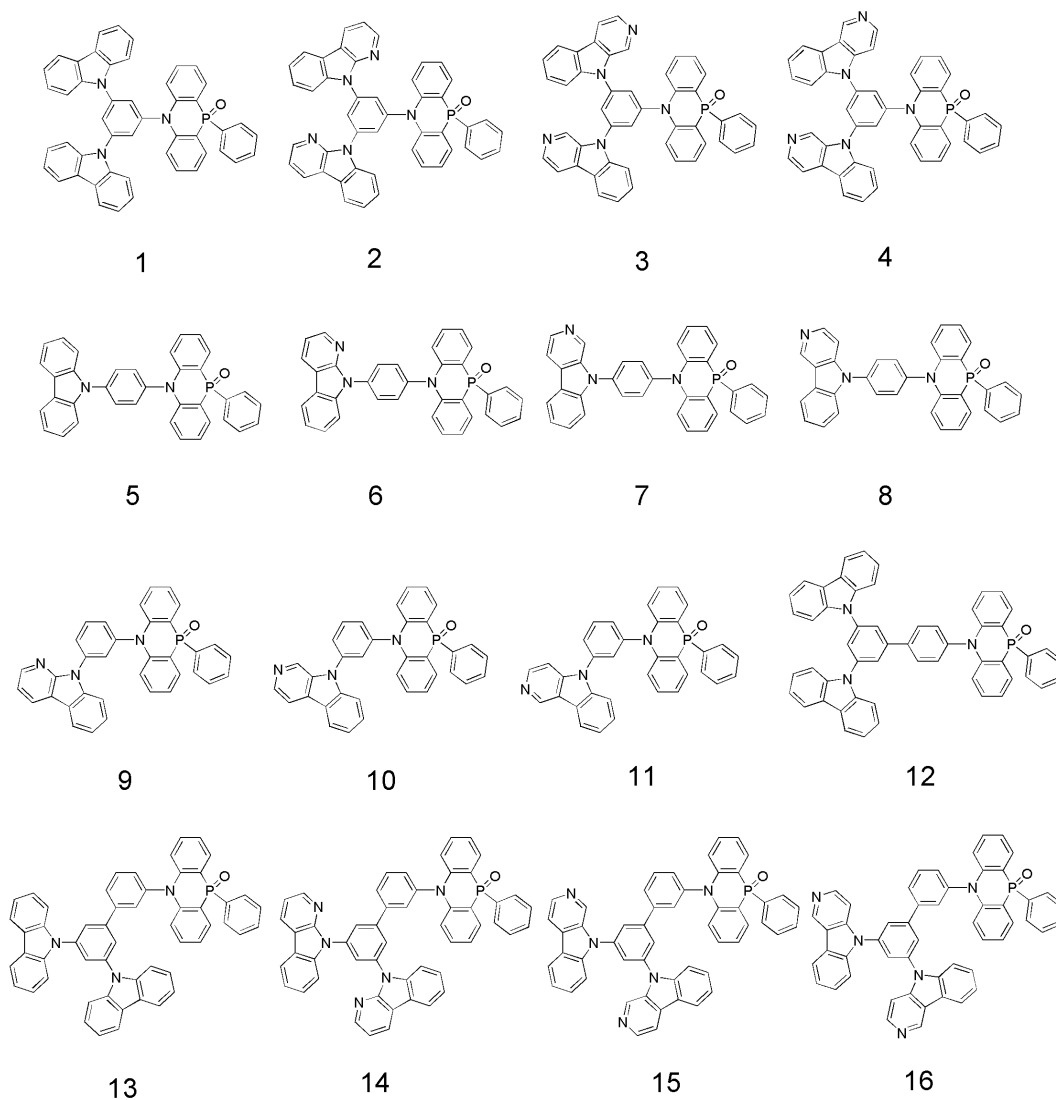
[0145] a_1 내지 a_6 및 a_{11} 은 서로 독립적으로, 0 또는 1이고,

[0146] R_1 내지 R_6 , R_{11} 및 R_{12} 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 상기 화학식 5-1 내지 5-80 (예를 들어, 상기 화학식 6-1 내지 6-35로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 10-1 내지 10-129로 표시되는 그룹)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

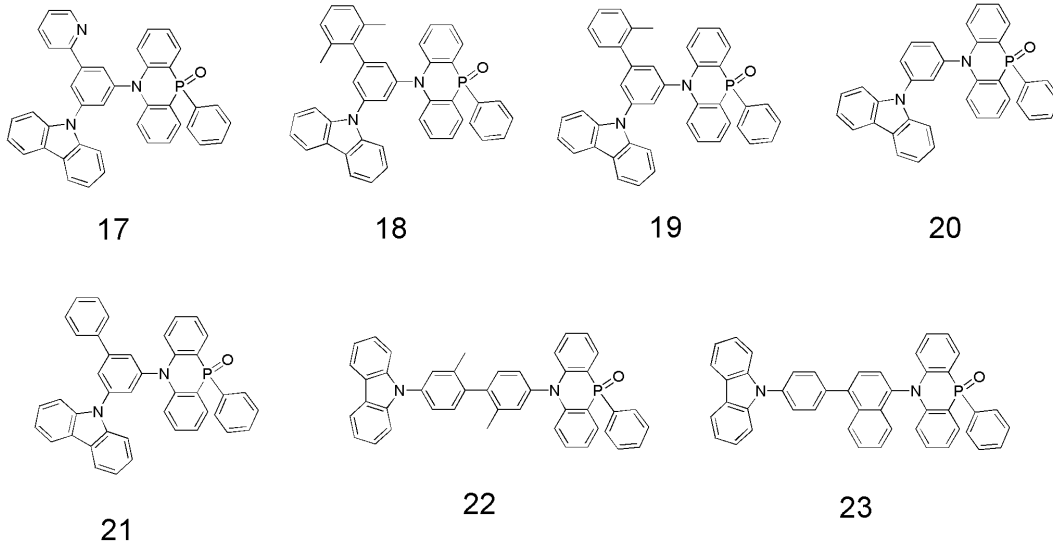
[0147] R_{20} , R_{30} , R_{40} , R_{50} , R_{20a} , R_{20b} , R_{30a} 및 R_{30b} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 상기 화학식 5-1 내지 5-80 (예를 들어, 상기 화학식 6-1 내지 6-35로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 10-1 내지 10-129로 표시되는 그룹)로 표시되는 그룹 및 -Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)(단, 상기 Q_1 내지 Q_3 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택됨) 중에서 선택되고,

[0148] b_2 내지 b_6 , b_{20} , b_{30} , b_{40} , b_{50} , ba_{20} , bb_{20} , ba_{30} 및 bb_{30} 은 서로 독립적으로, 0 또는 1일 수 있다.

[0149] 일 구현예에 따르면, 상기 카바졸계 화합물은 하기 화합물 1 내지 23 중 하나일 수 있다:



[0150]

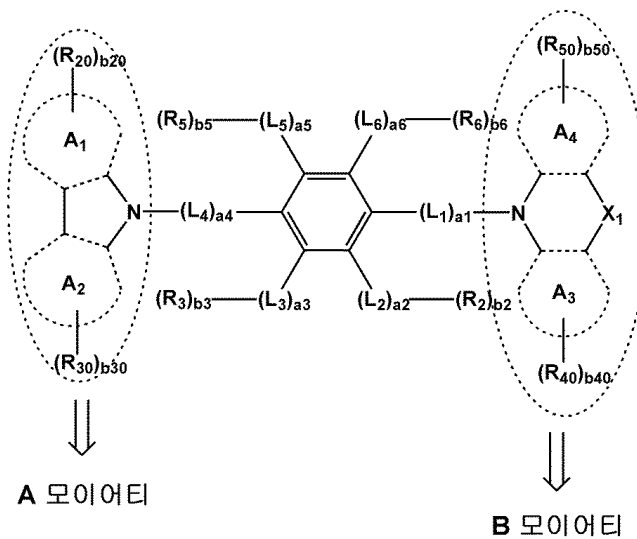


[0151]

[0152] 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은 양쪽성 화합물로서 하기 화학식 1-1'에서 표시된 바와 같은 A 모이어티 및 B 모이어티를 동시에 포함하므로, 정공 및 전자의 주입 특성이 우수하다. 또한 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은 삼중항 에너지가 충분히 높기 때문에 상기 카바졸계 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는, 고효율 및 장수명을 가질 수 있다.

[0153]

<화학식 1-1'>



[0154]

[0155] 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 카바졸계 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.

[0156]

상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 카바졸계 화합물은 발광층에 포함될 수 있다. 또는, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극의 외측에 위치한 캡핑층 재료로 사용될 수 있다.

[0157]

따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0158]

본 명세서 중 "(유기층이) 카바졸계 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 카바졸계 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 카바졸계 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0159]

예를 들어, 상기 유기층은, 상기 카바졸계 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 카바졸계 화합물로서, 상

기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1은 정공 수송층에 존재하고 상기 화합물 2는 발광층에 존재할 수 있음)할 수 있다.

[0160] 상기 유기층은, i) 상기 제1전극(애노드)과 상기 발광층 사이에 개재되며, 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함한, 정공 수송 영역을 포함하고, ii) 상기 발광층과 상기 제2전극(캐소드) 사이에 개재되며, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한, 전자 수송 영역을 포함할 수 있다. 상기 정공 수송 영역 및 발광층 중 적어도 하나에 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물 중 적어도 하나가 포함될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 발광층에 포함된 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은 호스트의 역할을 할 수 있으며, 이 때, 상기 발광층은 도펀트를 더 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 또는 형광 도펀트일 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 도펀트는 인광 도펀트일 수 있다.

[0161] 상기 유기 발광 소자는, 발광층에서 생성된 광이 상기 제1전극을 지나 외부로 추출되는 경로에 배치된 제1캐핑층 및 상기 발광층에서 생성된 광이 상기 제2전극을 지나 외부로 추출되는 경로에 배치된 제2캐핑층 중 적어도 하나를 더 포함하고, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나가 상기 카바졸계 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0162] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자는, i) 제1전극, 유기층, 제2전극 및 제2캐핑층이 순차적으로 적층된 구조, ii) 제1캐핑층, 제1전극, 유기층 및 제2전극이 순차적으로 적층된 구조 또는 iii) 제1캐핑층, 제1전극, 유기층, 제2전극 및 제2캐핑층이 순차적으로 적층된 구조를 갖고, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나에 상기 카바졸계 화합물이 포함될 수 있다.

[0163] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.

[0164] [도 1에 대한 설명]

[0165] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 유기 발광 소자(10)는 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)을 포함한다.

[0166] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.

[0167] [제1전극(110)]

[0168] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

[0169] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록, 제1전극용 물질은, 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다.

[0170] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 은(Ag), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0171] 상기 제1전극(110)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0172] [유기층(150)]

[0173] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.

[0174] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극(110)과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.

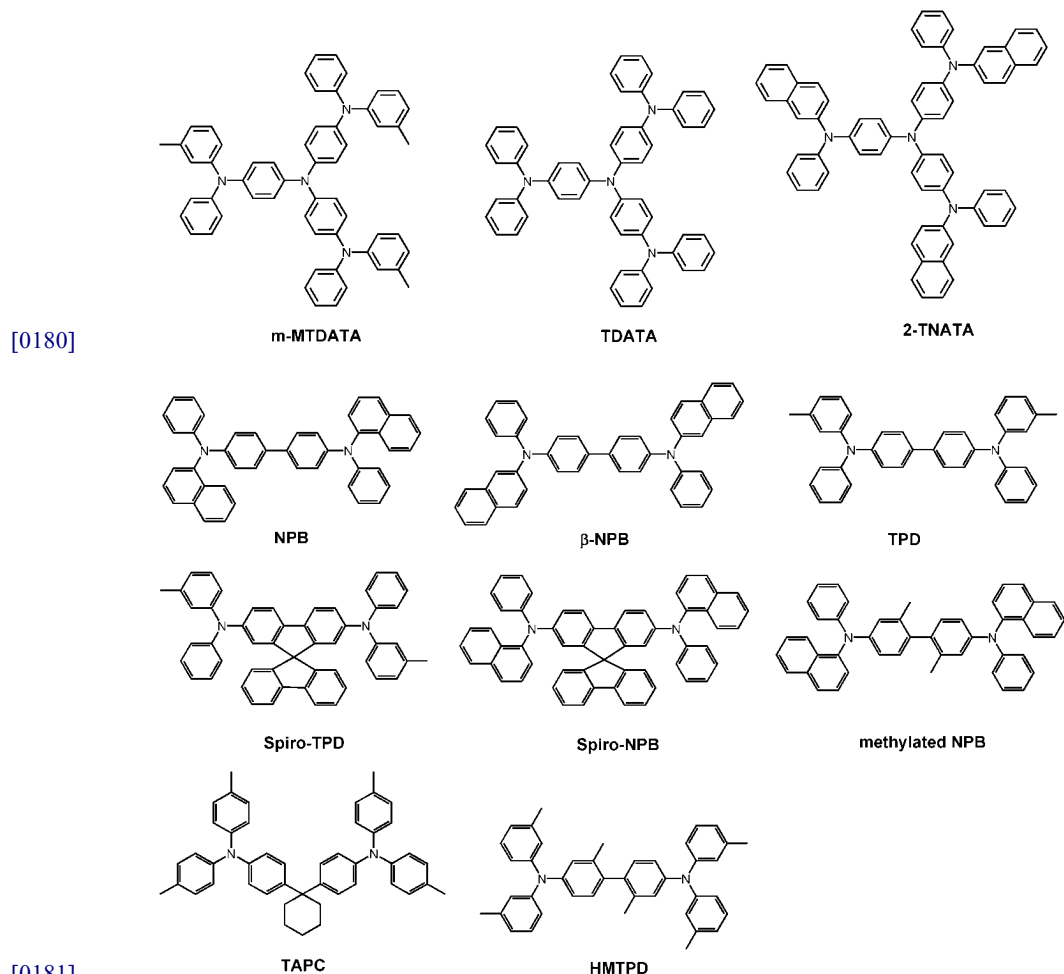
[0175] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]

[0176] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

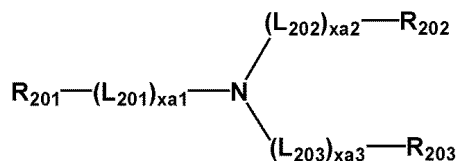
[0177] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.

[0178] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조를 갖거나, 제1전극(110)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/발광 보조층, 정공 주입층/발광 보조층, 정공 수송층/발광 보조층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 다층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0179] 상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β -NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMTDP, TCTA(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine (4,4',4''-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐린/도데실벤젠술포산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트))), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페르술포산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트))), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다:

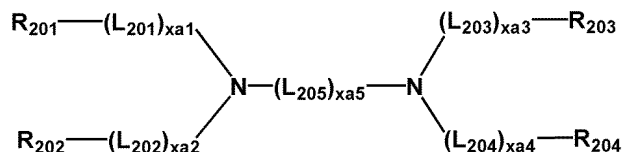


[0182] <화학식 201>



[0183]

[0184] <화학식 202>



[0185]

[0186] 상기 화학식 201 및 202 중,

[0187] L_{201} 내지 L_{204} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0188] L_{205} 은, $-O-$, $-S-$, $-N(Q_{201})-$, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{20} 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{20} 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0189] $xa1$ 내지 $xa4$ 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0190] $xa5$ 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0191] R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0192] 예를 들어, 상기 화학식 202 중 R_{201} 과 R_{202} 는, 선택적으로(optionally), 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있고, R_{203} 과 R_{204} 는, 선택적으로, 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있다.

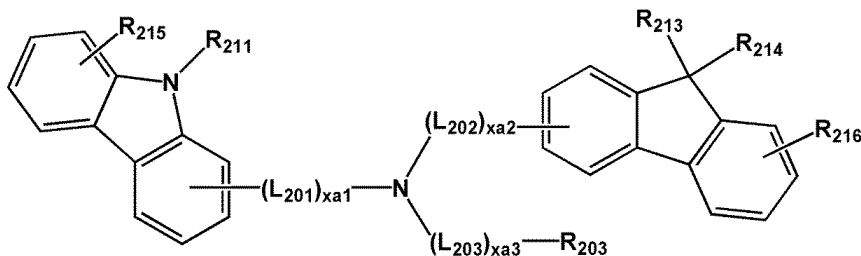
[0193] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,

[0194] L_{201} 내지 L_{205} 는 서로 독립적으로,

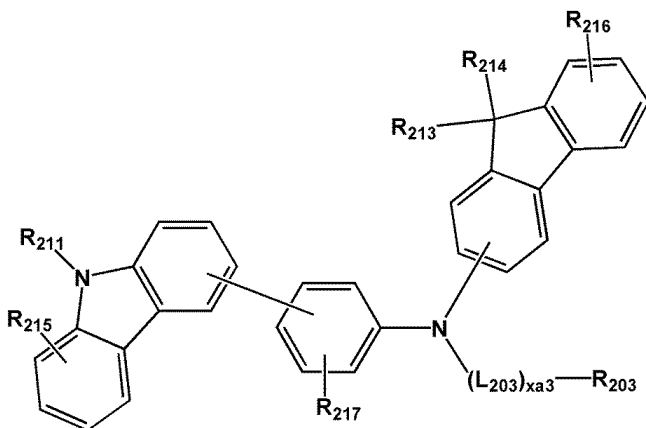
[0195] 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵타레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴아로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기; 및

- [0196] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;
- [0197] 중에서 선택되고,
- [0198] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0199] 다른 구현예에 따르면, xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0200] 또 다른 구현예에 따르면, xa5는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.
- [0201] 또 다른 구현예에 따르면, R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 및 Q₂₀₁은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0202] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;
- [0203] 중에서 선택될 수 있고,
- [0204] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

- [0205] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R_{201} 내지 R_{203} 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0206] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜일기; 및
- [0207] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1 - C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜일기;
- [0208] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0209] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R_{201} 과 R_{202} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R_{203} 과 R_{204} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0210] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R_{201} 내지 R_{204} 중 적어도 하나는,
- [0211] 카바졸일기; 및
- [0212] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1 - C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;
- [0213] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0214] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:
- [0215] <화학식 201A>



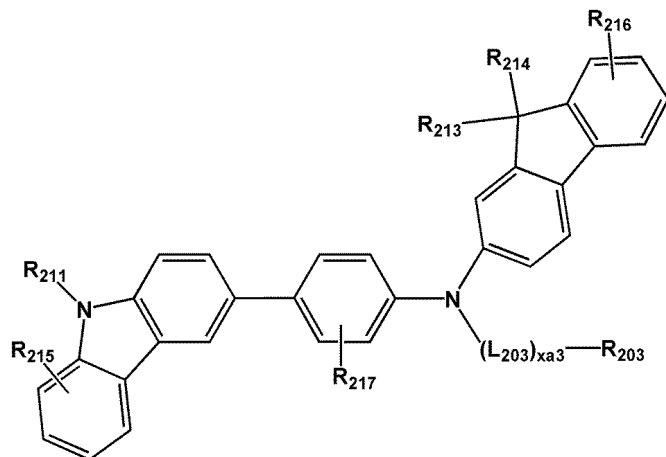
- [0216]
- [0217] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0218] <화학식 201A(1)>



[0219]

[0220] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

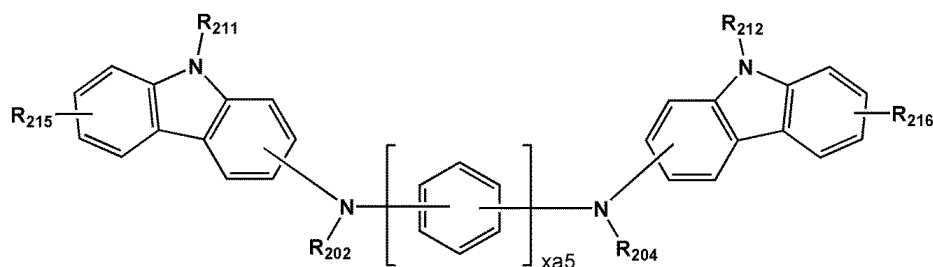
[0221] <화학식 201A-1>



[0222]

[0223] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

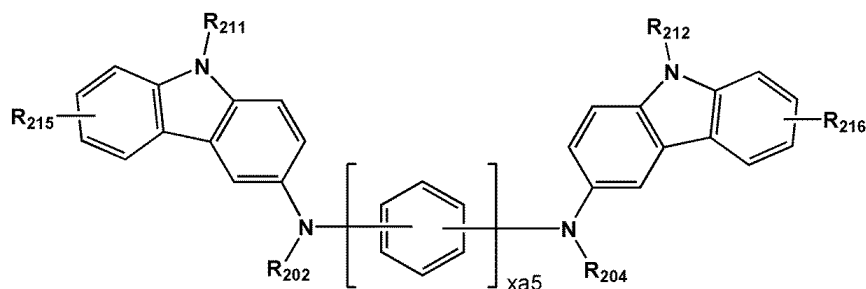
[0224] <화학식 202A>



[0225]

[0226] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0227] <화학식 202A-1>



[0228]

[0229] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

[0230] L201 내지 L203, xa1 내지 xa3 및 R202 내지 R204에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

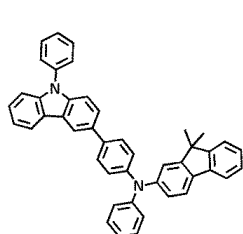
[0231] R211 및 R212에 대한 설명은 본 명세서 중 R203에 대한 설명을 참조하고,

[0232] R213 내지 R217은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C1-C20알킬기, C1-C20알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C1-C10알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴아노-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 핵

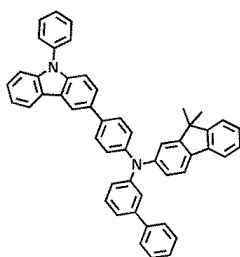
사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0233]

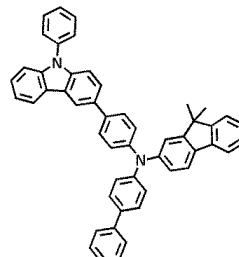
상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



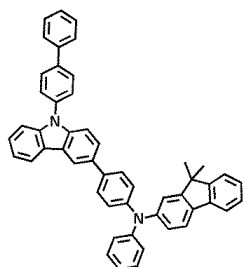
HT1



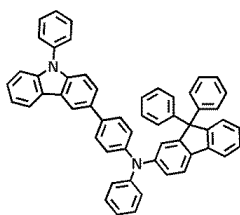
HT2



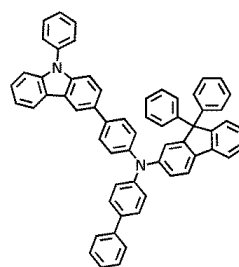
HT3



HT4

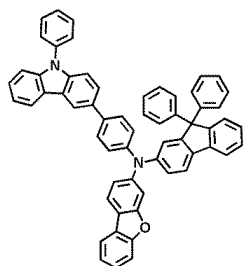


HT5

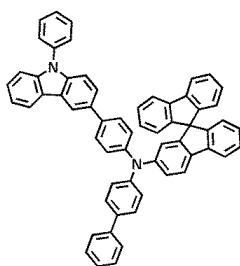


HT6

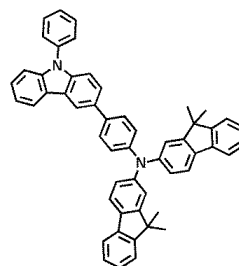
[0234]



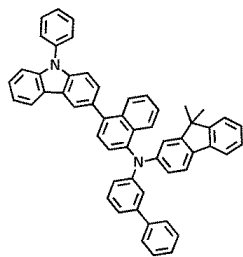
HT7



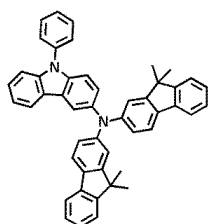
HT8



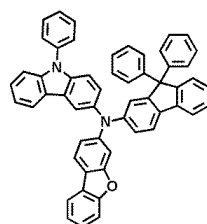
HT9



HT10

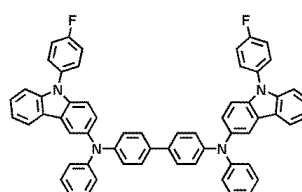
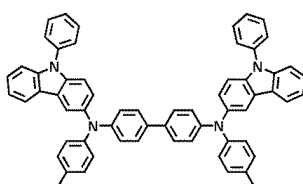
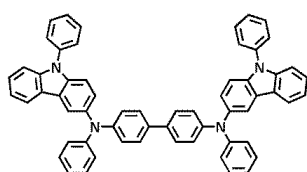
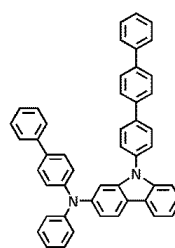
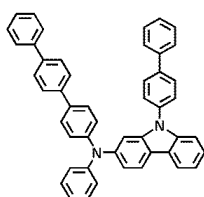
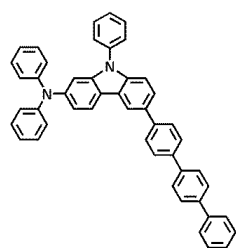
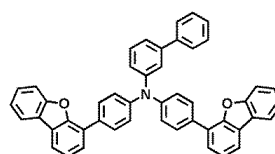
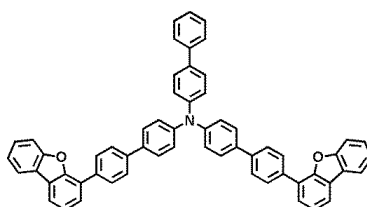
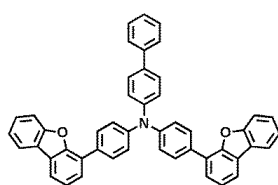
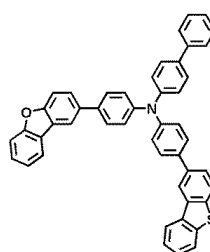
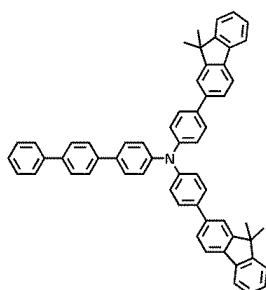
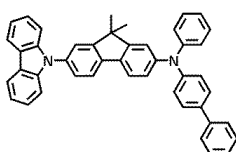
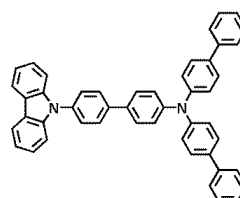
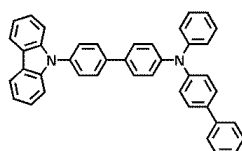
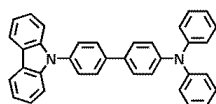
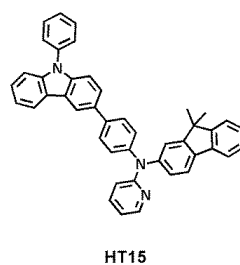
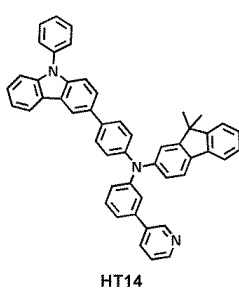
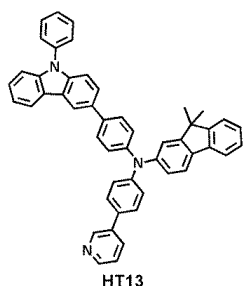


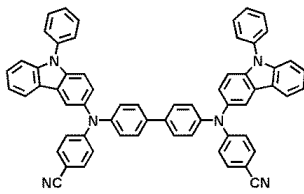
HT11



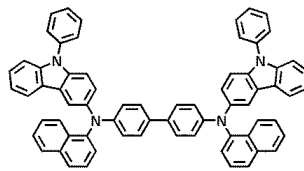
HT12

[0235]

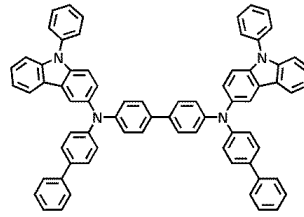




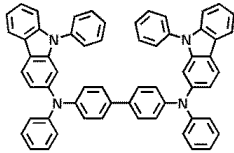
HT31



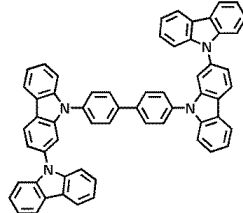
HT32



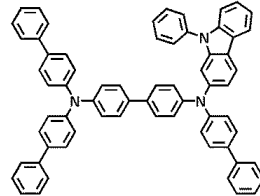
HT33



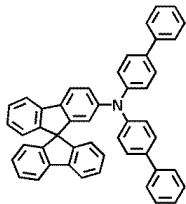
HT34



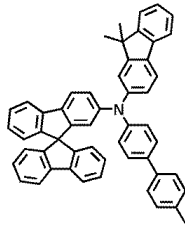
HT35



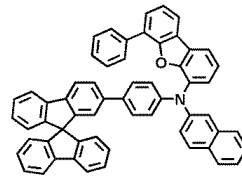
HT36



HT37



HT38



HT39

상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 하나를 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 9000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

상기 발광 보조층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시키는 역할을 하는 층이고, 상기 전자 저지층은 전자 수송 영역으로부터의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다. 상기 발광 보조층 및 전자 저지층에는 상술한 바와 같은 물질이 포함될 수 있다.

[p-도펀트]

상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 전하-생성 물질은 상기 정공 수송 영역 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

예를 들어, 상기 p-도펀트는,

TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체;

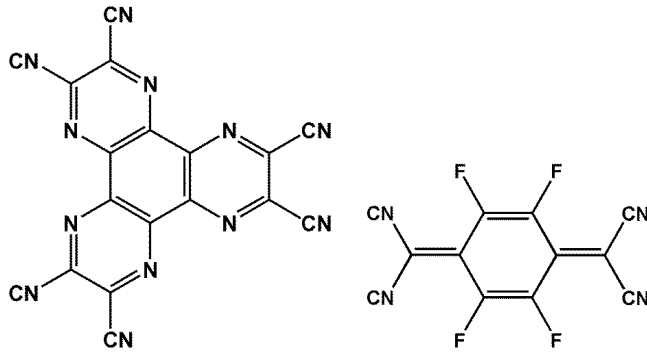
텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

HAT-CN (1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및

하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

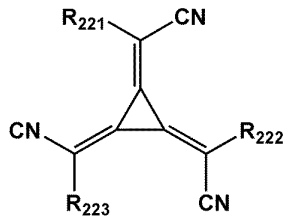
중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0253] <HAT-CN> <F4-TCNQ>



[0254]

[0255] <화학식 221>



[0256]

[0257] 상기 화학식 221 중,

[0258] R_{221} 내지 R_{223} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R_{221} 내지 R_{223} 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기, -Cl로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기, -Br로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기 및 -I로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0259] [유기층(150) 중 발광층]

[0260] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

[0261] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0262] 상기 발광층은 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 포함할 수 있다.

[0263] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0264] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

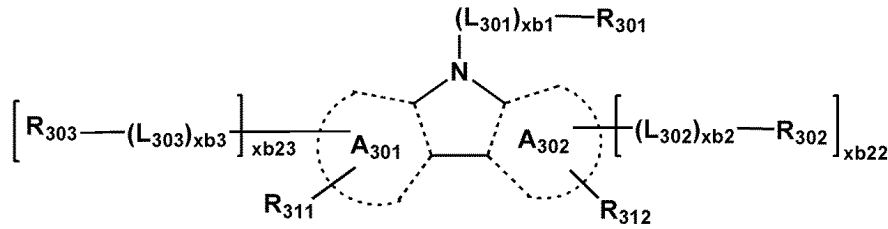
[0265] [발광층 중 호스트]

[0266] 상기 호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 포함할 수 있다.

[0267] 이와는 별개로, 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

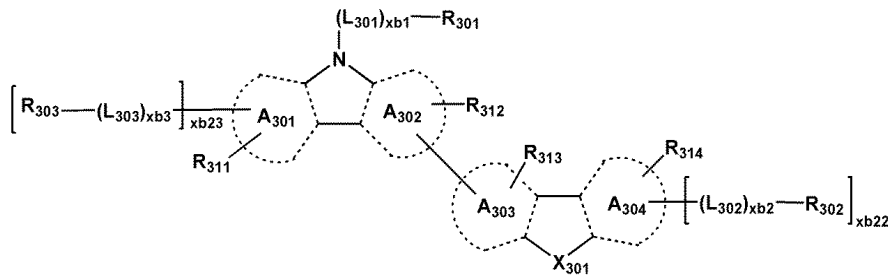
- [0268] <화학식 301>
- [0269] $[Ar_{301}]_{xb11} - [(L_{301})_{xb1} - R_{301}]_{xb21}$
- [0270] 상기 화학식 301 중,
- [0271] Ar_{301} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0272] $Xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0273] L_{301} 은, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0274] $xb1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0275] R_{301} 은, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$, $-N(Q_{301})(Q_{302})$, $-B(Q_{301})(Q_{302})$, $-C(=O)(Q_{301})$, $-S(=O)_2(Q_{301})$ 및 $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$ 중에서 선택되고,
- [0276] $xb21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0277] Q_{301} 내지 Q_{303} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0278] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar_{301} 은,
- [0279] 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹; 및
- [0280] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;
- [0281] 중에서 선택되고,
- [0282] Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0283] 상기 화학식 301 중 $xb11$ 이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{301} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0284] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0285] <화학식 301-1>



[0286]

[0287] <화학식 301-2>



[0288]

[0289] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0290] A₃₀₁ 내지 A₃₀₄는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 피리딘, 피리미딘, 인텐, 플루오렌, 스파이로-비플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 인돌, 카바졸, 벤조카바졸, 디벤조카바졸, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 나프토피란, 벤조나프토피란, 디나프토피란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 나프토티오펜, 벤조나프토티오펜 및 디나프토티오펜 중에서 선택되고,

[0291] X₃₀₁은 O, S 또는 N-[(L₃₀₄)_{xb4}-R₃₀₄]이고,

[0292] R₃₁₁ 내지 R₃₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택되고,

[0293] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0294] L₃₀₁, xb1, R₃₀₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0295] L₃₀₂ 내지 L₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L₃₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0296] Xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,

[0297] R₃₀₂ 내지 R₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R₃₀₁에 대한 설명을 참조한다.

[0298] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L₃₀₁ 내지 L₃₀₄는 서로 독립적으로,

[0299] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리다닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이소옥사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0300] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;

[0301] 중에서 선택되고,

[0302] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0303] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R₃₀₁ 내지 R₃₀₄는 서로 독립적으로,

[0304] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0305] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁),

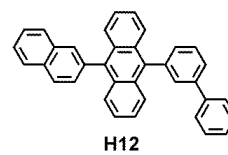
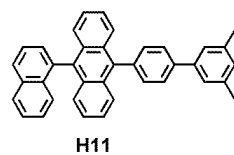
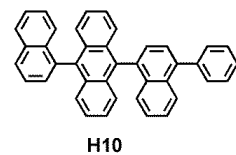
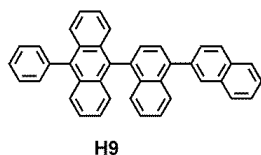
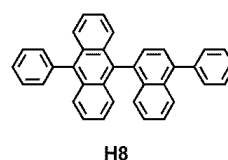
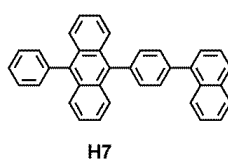
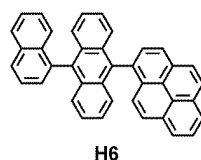
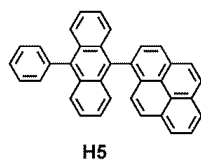
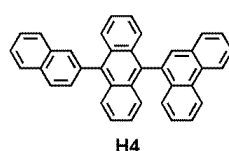
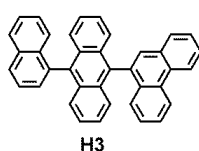
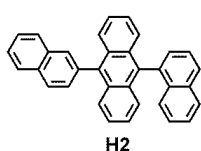
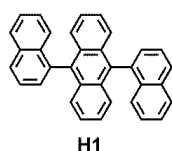
-S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

[0306] 중에서 선택되고, 중에서 선택되고,

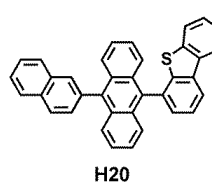
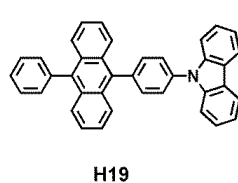
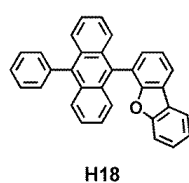
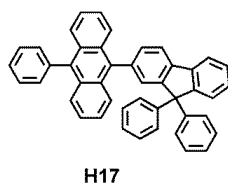
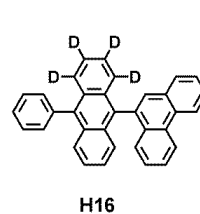
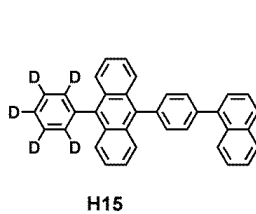
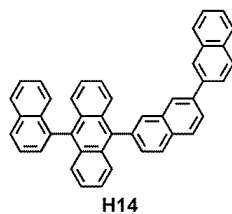
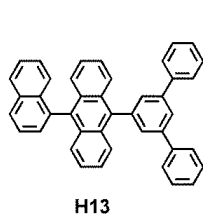
[0307] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0308] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 알칼리토 금속 착체를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 Be 착체 (예를 들면, 하기 화합물 H55), Mg 착체 및 Zn 착체 중에서 선택될 수 있다.

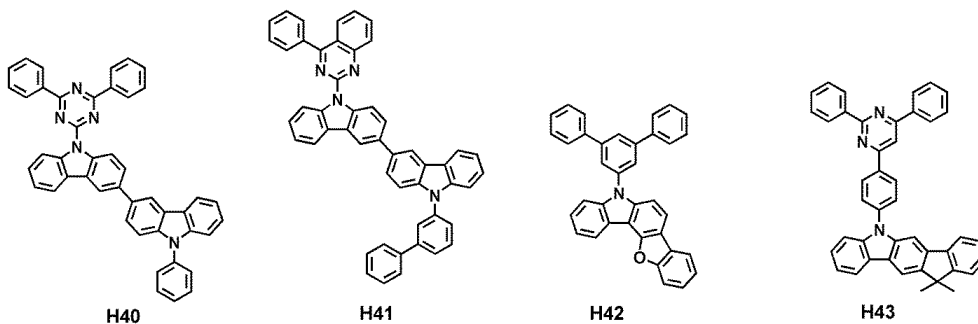
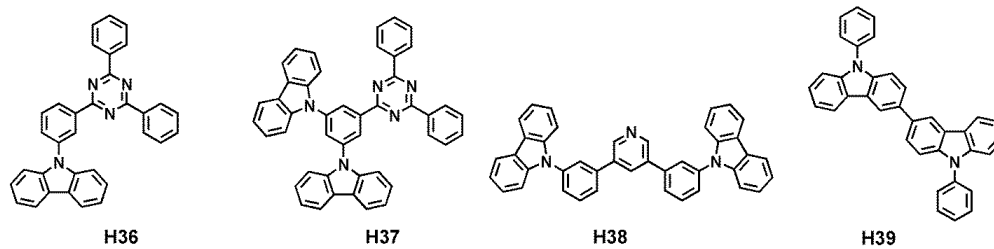
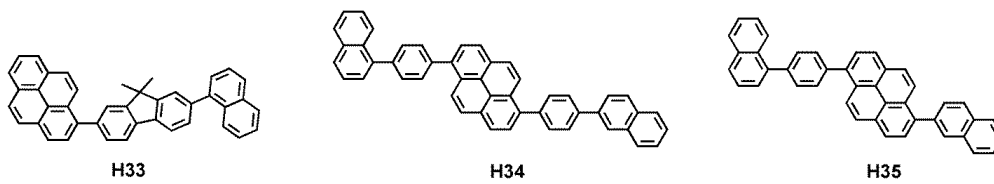
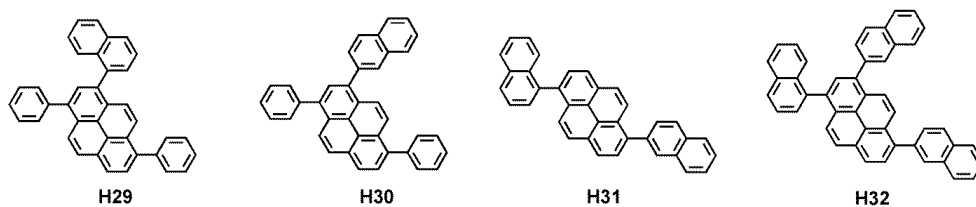
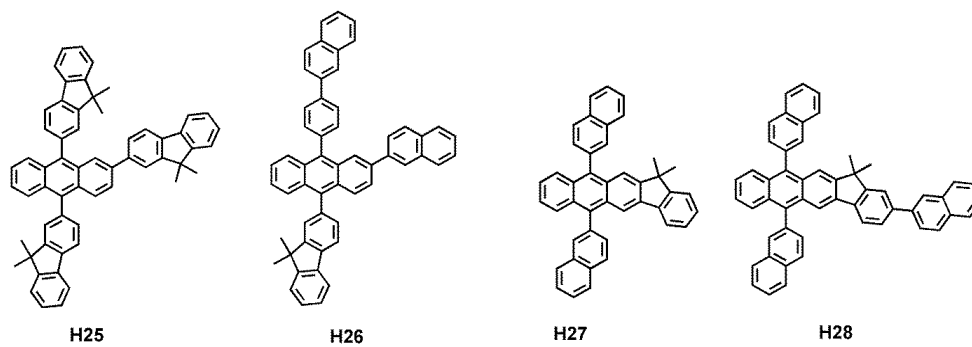
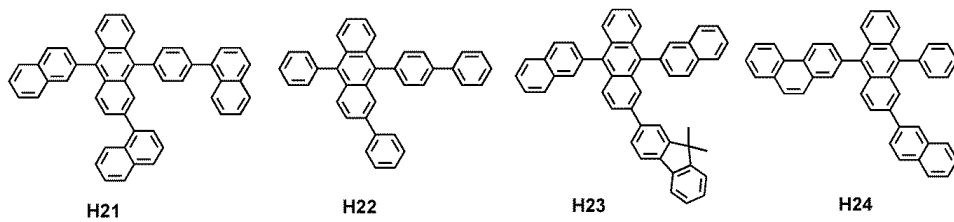
[0309] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0310]



[0311]





[0318]

[0319]

[0320]

[0321]

[0322]

[0324]

[0325]

– 64 –

- [0326] L_{402} 는 유기 리간드이고, xc_2 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, xc_2 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_{402} 는 서로 동일하거나 상이하고,
- [0327] X_{401} 내지 X_{404} 는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,
- [0328] X_{401} 과 X_{403} 은 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고, X_{402} 와 X_{404} 는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,
- [0329] A_{401} 및 A_{402} 는 서로 독립적으로, C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0330] X_{405} 는 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(=O)-*, *-N(Q_{411})-*, *-C(Q_{411})(Q_{412})-*, *-C(Q_{411})=C(Q_{412})-*, *-C(Q_{411})=* 또는 *=C(Q_{411})=*이고, 상기 Q_{411} 및 Q_{412} 는, 수소, 중수소, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0331] X_{406} 은 단일 결합, O 또는 S이고,
- [0332] R_{401} 및 R_{402} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{20} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{20} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 -Si(Q_{401})(Q_{402})(Q_{403}), -N(Q_{401})(Q_{402}), -B(Q_{401})(Q_{402}), -C(=O)(Q_{401}), -S(=O)₂(Q_{401}) 및 -P(=O)(Q_{401})(Q_{402}) 중에서 선택되고, 상기 Q_{401} 내지 Q_{403} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, C_6 - C_{20} 아릴기 및 C_1 - C_{20} 헤테로아릴기 중에서 선택되고,
- [0333] xc_{11} 및 xc_{12} 는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,
- [0334] 상기 화학식 402 중 * 및 *'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.
- [0335] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 A_{401} 및 A_{402} 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 인덴 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란(furan) 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸(isoxazole) 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 카바졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조퓨란(benzofuran) 그룹, 벤조티오펜 그룹, 이소벤조티오펜 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 디벤조퓨란(dibenzofuran) 그룹 및 디벤조티오펜 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0336] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 i) X_{401} 은 질소이고, X_{402} 는 탄소이거나, 또는 ii) X_{401} 과 X_{402} 가 모두 질소일 수 있다.
- [0337] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 R_{401} 및 R_{402} 는 서로 독립적으로,
- [0338] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0339] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 페닐기, 나프틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기 및 노르보네닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0340] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸리닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜리닐기;

[0341] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기; 및

[0342] -Si(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)(Q₄₀₃), -N(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -B(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -C(=O)(Q₄₀₁), -S(=O)₂(Q₄₀₁) 및 -P(=O)(Q₄₀₁)(Q₄₀₂);

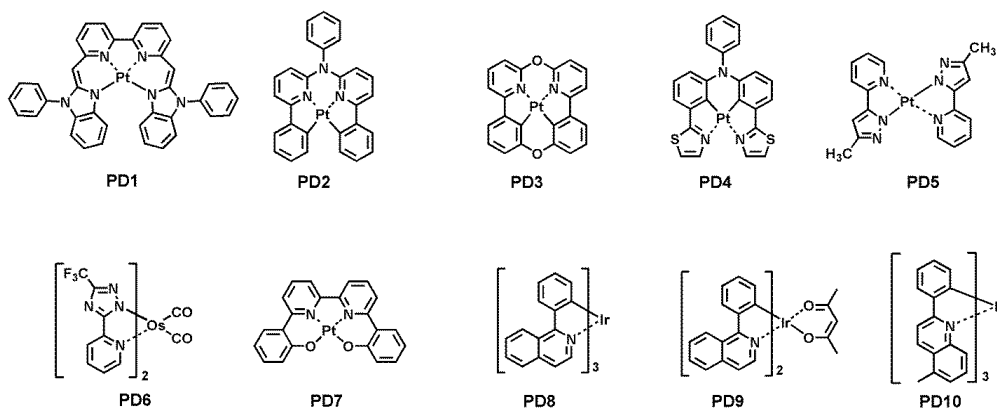
[0343] 중에서 선택되고,

[0344] 상기 Q₄₀₁ 내지 Q₄₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

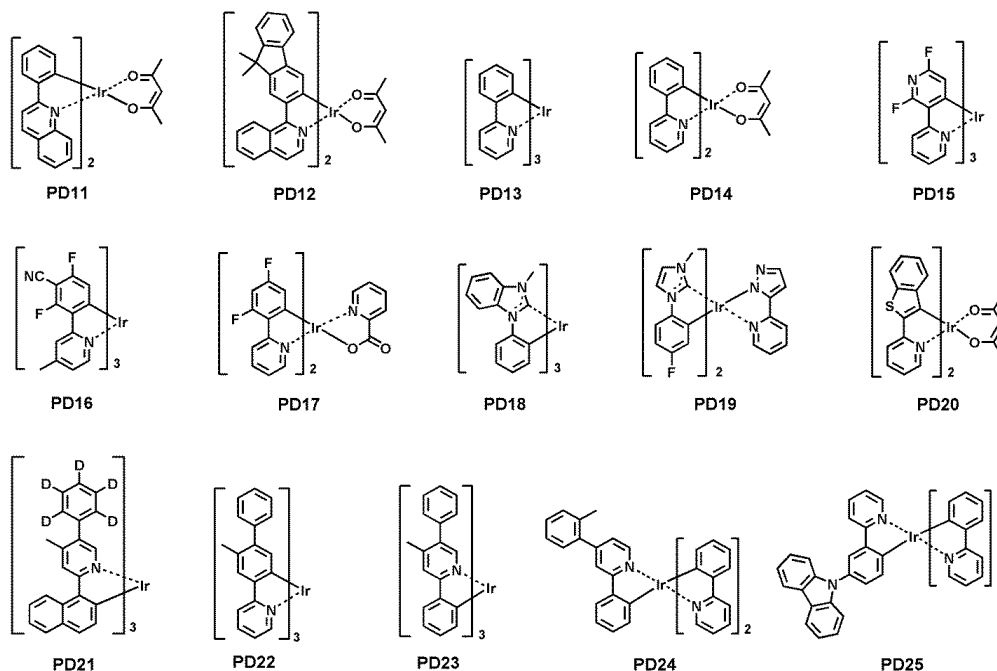
[0345] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 401 중 xc1이 2 이상일 경우, 2 이상의 L₄₀₁ 중 2개의 A₄₀₁은 선택적으로 (optionally), 연결기인 X₄₀₇을 통하여 서로 연결되거나, 2개의 A₄₀₂는 선택적으로, 연결기인 X₄₀₈을 통하여 서로 연결될 수 있다 (하기 화합물 PD1 내지 PD4 및 PD7 참조). 상기 X₄₀₇ 및 X₄₀₈은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(=O)-*, *-N(Q₄₁₃)-*, *-C(Q₄₁₃)(Q₄₁₄)-* 또는 *-C(Q₄₁₃)=C(Q₄₁₄)-* (여기서, Q₄₁₃ 및 Q₄₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기임)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0346] 상기 화학식 401 중 L₄₀₂는 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기 L₄₀₂는 할로겐, 디케톤 (예를 들면, 아세틸아세토네이트), 카르복실산 (예를 들면, 피콜리네이트), -C(=O), 이소니트릴, -CN 및 포스포러스 (예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphite)) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0347] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



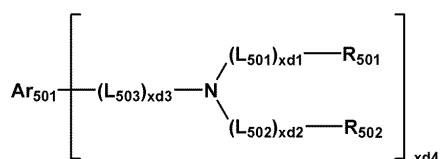
[0348]



[발광층 중 형광 도펀트]

상기 형광 도펀트는 하기 화학식 501로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

<화학식 501>



상기 화학식 501 중,

Ar₅₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

xd1 내지 xd3는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

Xd4는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar₅₀₁은,

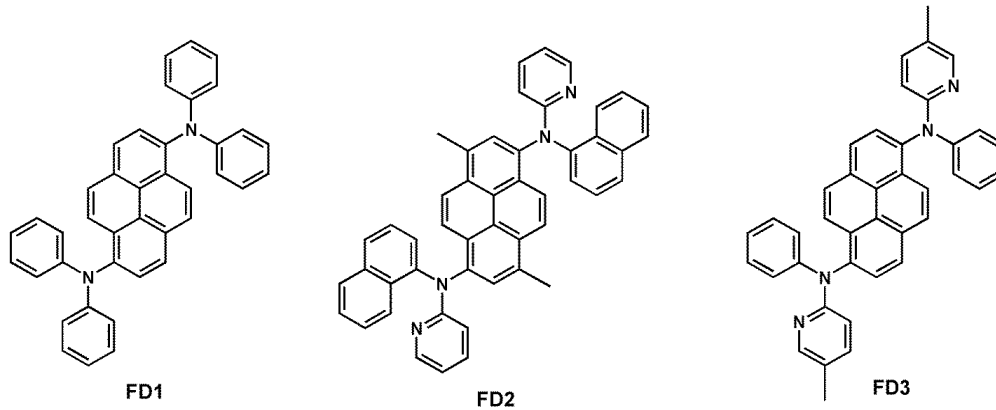
나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹 및 인데노안트라센 그룹; 및

- [0363] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란테 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹 및 인데노안트라센 그룹;
- [0364] 중에서 선택될 수 있다.
- [0365] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로,
- [0366] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및
- [0367] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기;
- [0368] 중에서 선택될 수 있다.
- [0369] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로,
- [0370] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0371] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 및 -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;
- [0372] 중에서 선택되고,
- [0373] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있

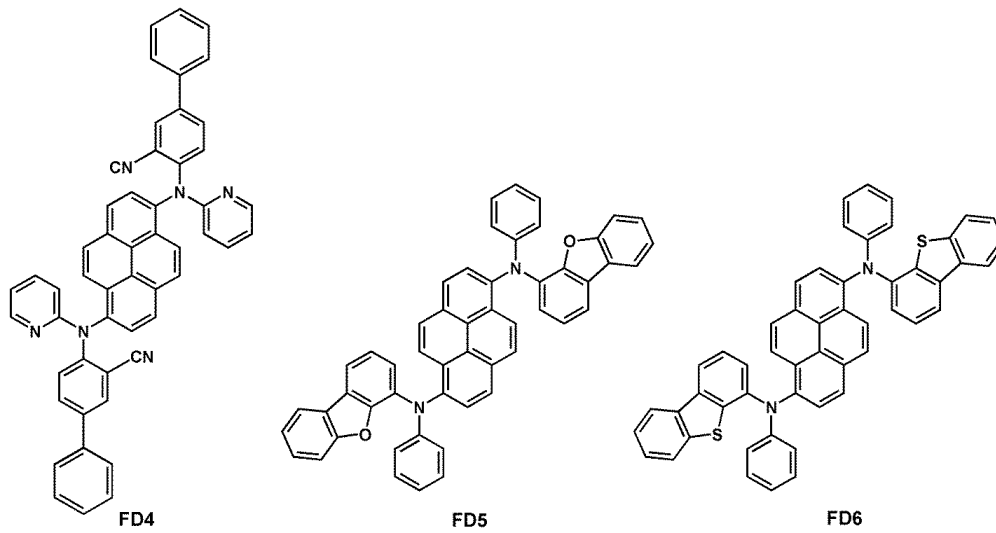
다.

[0374] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd4는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

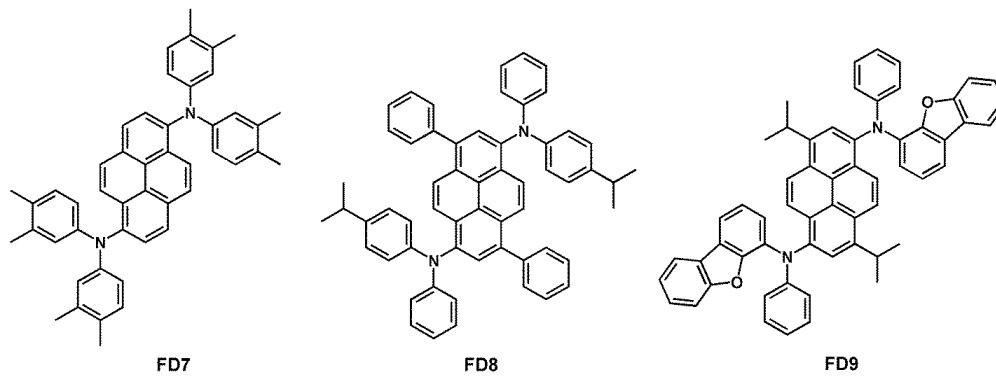
[0375] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:



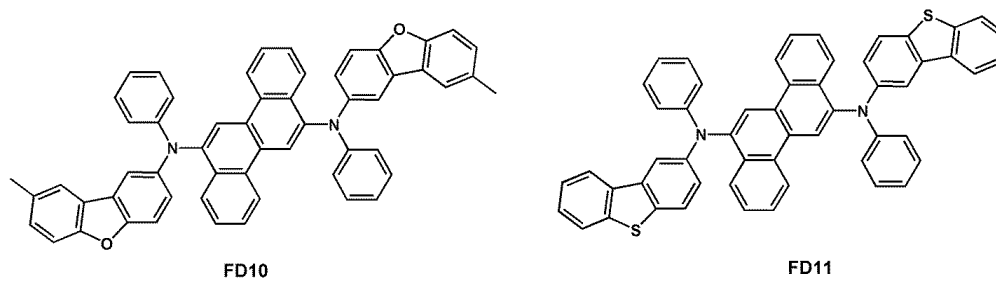
[0376]



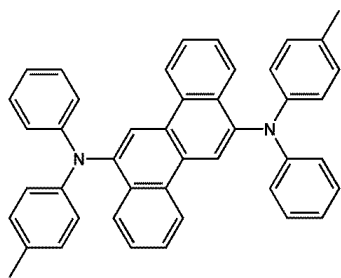
[0377]



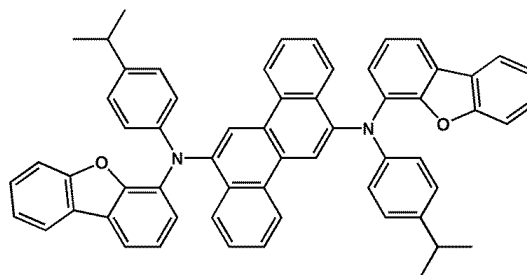
[0378]



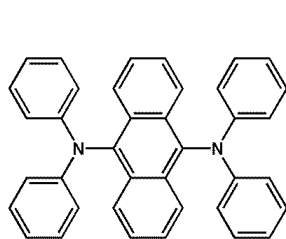
[0379]



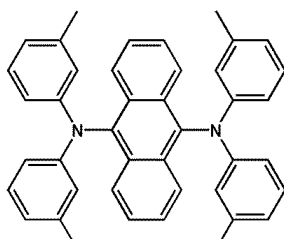
FD12



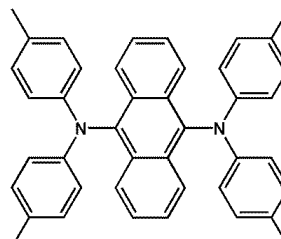
FD13



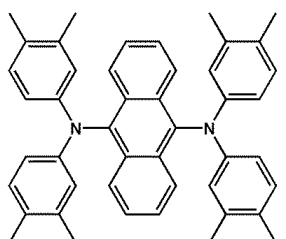
FD14



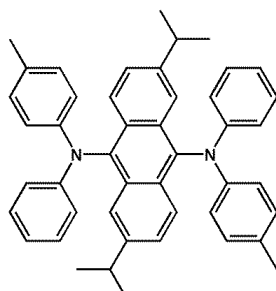
FD15



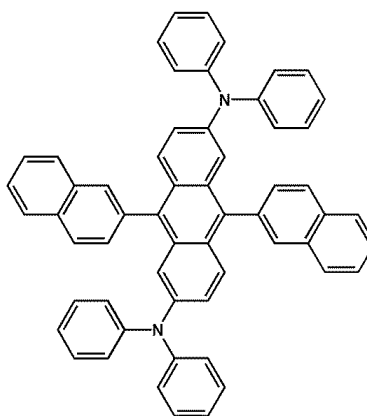
FD16



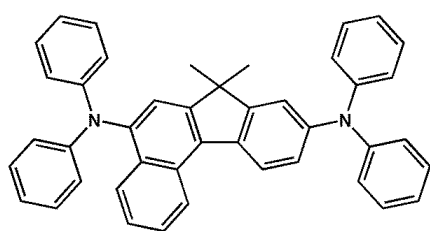
FD17



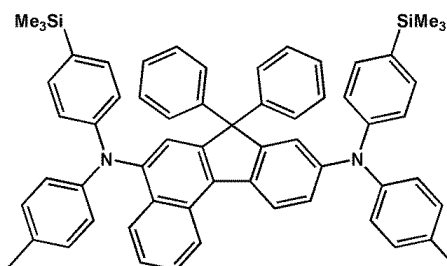
FD18



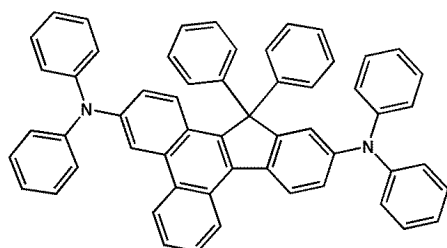
FD19



FD20

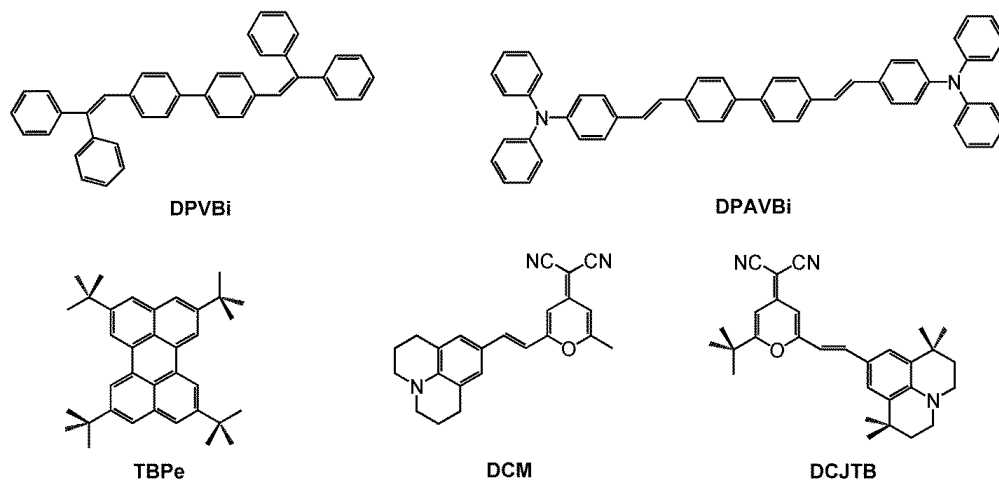


FD21

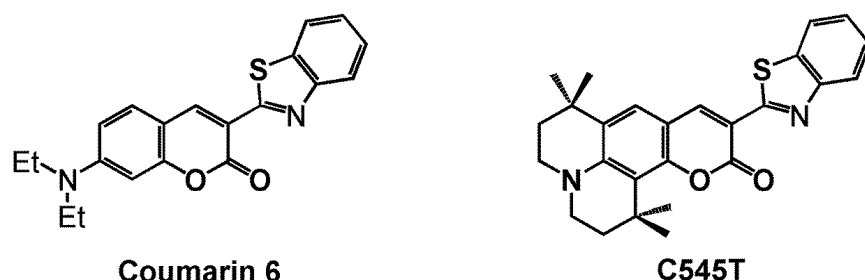


FD22

[0385] 또는, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물들 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0386]



[0387]

[0388] [유기층(150) 중 전자 수송 영역]

[0389] 상기 전자 수송 영역은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0390] 상기 전자 수송 영역은, 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0391] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적층된 전자 수송층/전자 주입층, 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층, 전자 조절층/전자 수송층/전자 주입층, 또는 버퍼층/전자 수송층/전자 주입층 등의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0392] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은, π 전자 결핍성 함질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.

[0393] 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 $*-N=*$ 모이어티를 갖는 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 의미한다.

[0394] 예를 들어, 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, i) 적어도 하나의 $*-N=*$ 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹이거나, ii) 적어도 하나의 $*-N=*$ 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 2 이상이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹이거나, 또는 iii) 적어도 하나의 $*-N=*$ 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 적어도 하나와, 적어도 하나의 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.

[0395] 상기 π 전자 결핍성 함질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이소옥사졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 인다졸, 푸린(purine), 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴놀살린, 퀴나졸린, 시놀린, 페난트리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 벤조이미다졸, 이소벤조티아졸, 벤조옥사졸, 이소벤조옥사졸, 트리아졸, 테트라졸, 옥사디아졸, 트리아진, 티아디아졸, 이미다조피리딘, 이미다조피리미딘, 아자카바졸 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0396] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0397] <화학식 601>
- [0398] $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$
- [0399] 상기 화학식 601 중,
- [0400] Ar_{601} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0401] $xe11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0402] L_{601} 은, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0403] $xe1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0404] R_{601} 은, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{601})(Q_{602})(Q_{603})$, $-C(=O)(Q_{601})$, $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$ 중에서 선택되고,
- [0405] 상기 Q_{601} 내지 Q_{603} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0406] $xe21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0407] 일 구현예에 따르면, 상기 $xe11$ 개의 Ar_{601} 및 $xe21$ 개의 R_{601} 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 합질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0408] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar_{601} 은,
- [0409] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹; 및
- [0410] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹,

테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹;

[0411] 중에서 선택될 수 있고,

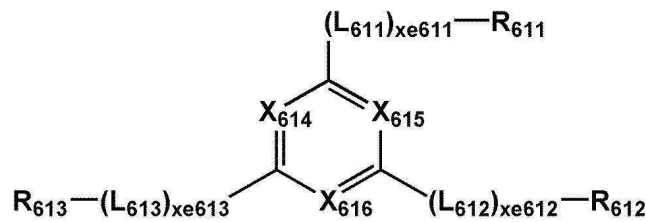
[0412] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0413] 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0414] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0415] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

[0416] <화학식 601-1>



[0417]

[0418] 상기 화학식 601-1 중,

[0419] X₆₁₄는 N 또는 C(R₆₁₄)이고, X₆₁₅는 N 또는 C(R₆₁₅)이고, X₆₁₆는 N 또는 C(R₆₁₆)이고, X₆₁₄ 내지 X₆₁₆ 중 적어도 하나는 N이고,

[0420] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0421] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0422] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0423] R₆₁₄ 내지 R₆₁₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0424] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L₆₀₁ 및 L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로,

[0425] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리다닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이소옥사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트룰리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0426] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤

조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜일렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜일렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜일렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;

[0427] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0428] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0429] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R₆₀₁ 및 R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로,

[0430] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

[0431] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아

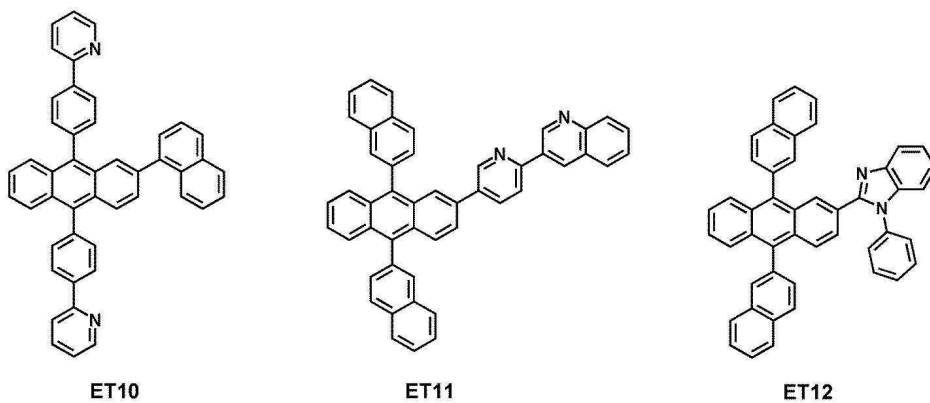
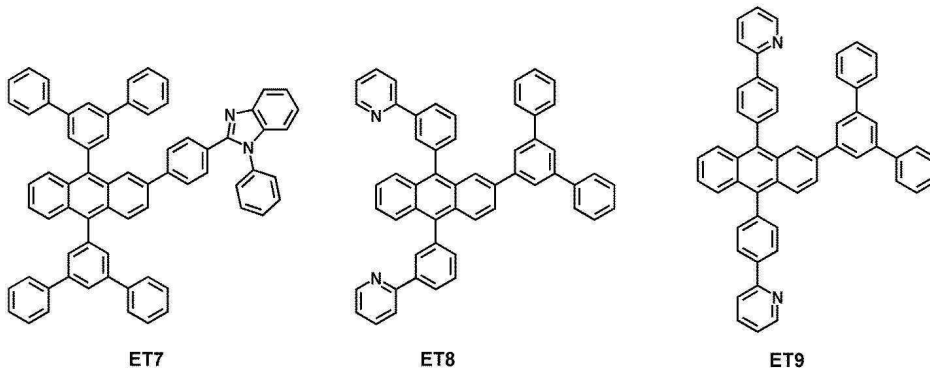
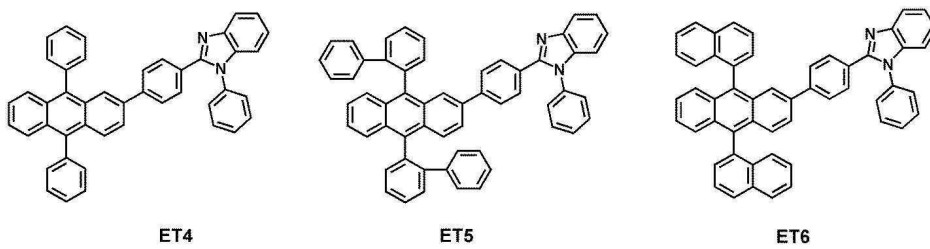
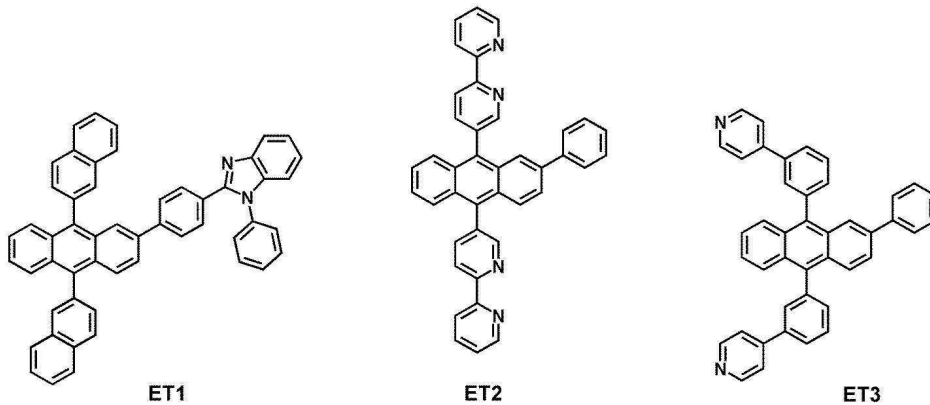
크리디닐기, 페난트릴리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

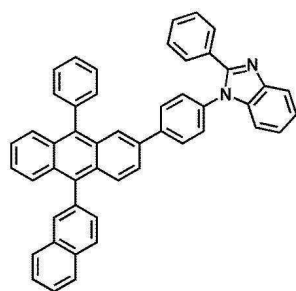
[0432] $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$;

[0433] 중에서 선택되고,

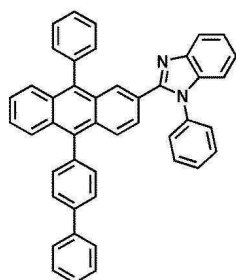
[0434] 상기 Q_{601} 및 Q_{602} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0435] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

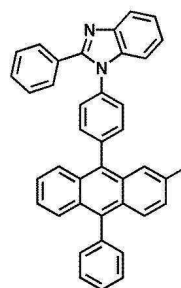




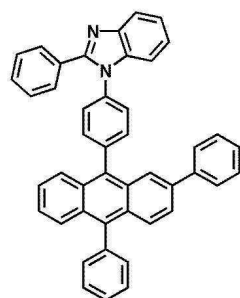
ET13



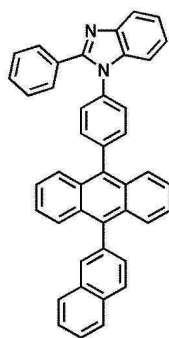
ET14



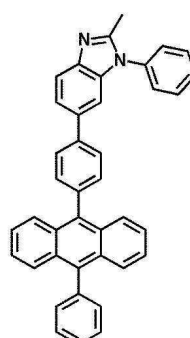
ET15



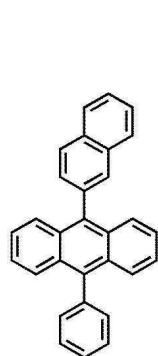
ET16



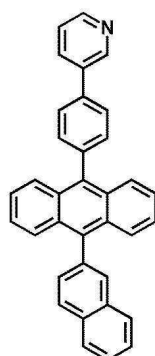
ET17



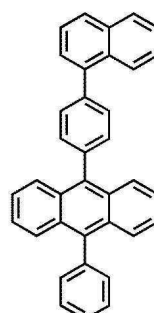
ET18



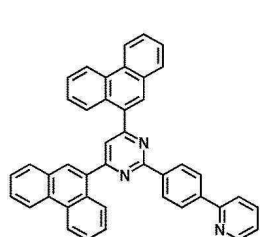
ET19



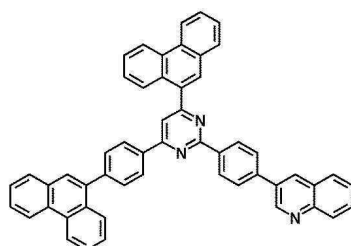
ET20



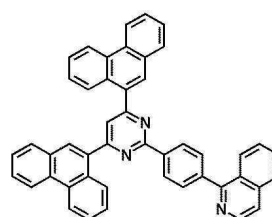
ET21



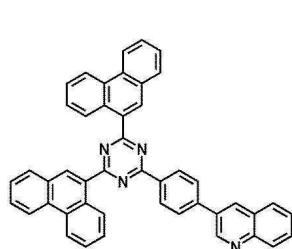
ET22



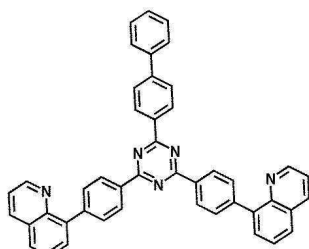
ET23



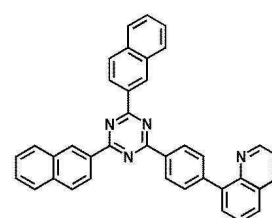
ET24



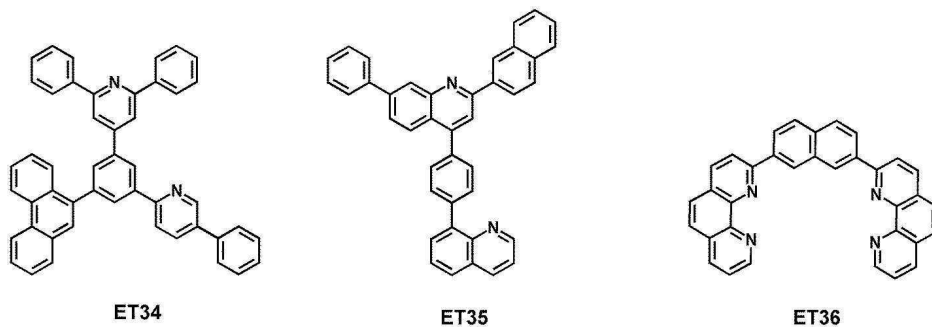
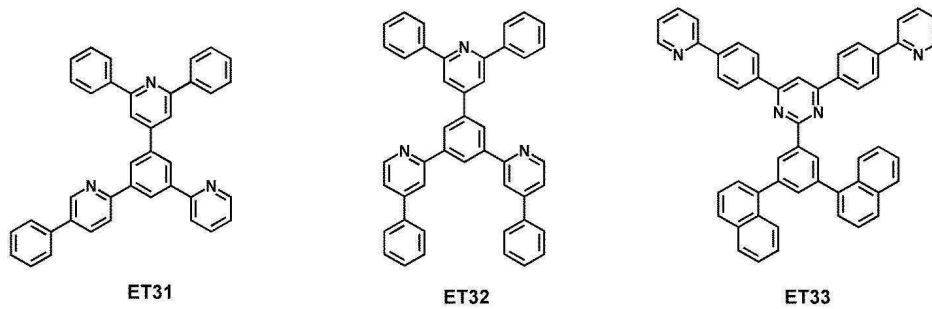
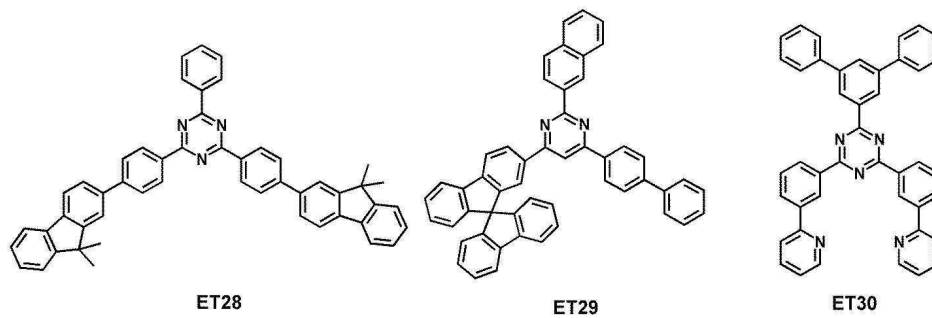
ET25



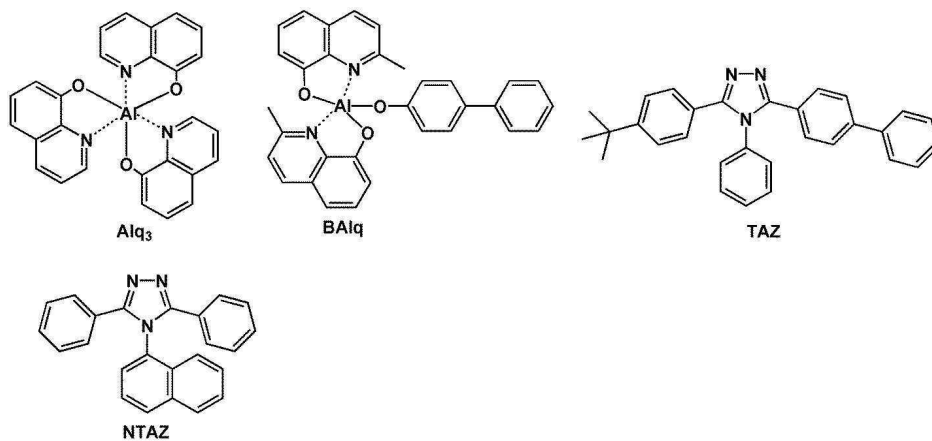
ET26



ET27



또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, Balq, TAZ(3-(Biphenyl-4-yl)-5-(4-*tert*-butylphenyl)-4-phenyl-4*H*-1,2,4-triazole) 및 NTAZ 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다.



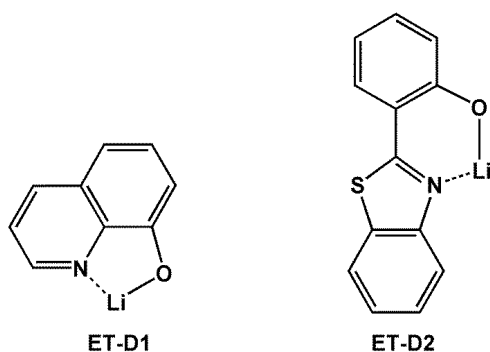
상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성 또는 전자 조절 특성을 얻을 수 있다.

상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0452] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0453] 상기 금속-함유 물질은 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체의 금속 이온은, Li 이온, Na 이온, K 이온, Rb 이온 및 Cs 이온 중에서 선택될 수 있고, 상기 알칼리 토금속 착체의 금속 이온은 Be 이온, Mg 이온, Ca 이온, Sr 이온 및 Ba 이온 중에서 선택될 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0454] 예를 들면, 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다.



[0455]

[0456] 상기 전자 수송 영역은, 제2전극(190)으로부터의 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층은 상기 제2전극(190)과 직접(directly) 접촉할 수 있다.

[0457] 상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0458] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0459] 상기 알칼리 금속은, Na, K, Rb 및 Cs 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 K, Rb 또는 Cs일 수 있다. 다른 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Rb 또는 Cs일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0460] 상기 알칼리 토금속은, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.

[0461] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb, Gd 및 Tb 중에서 선택될 수 있다.

[0462] 상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.

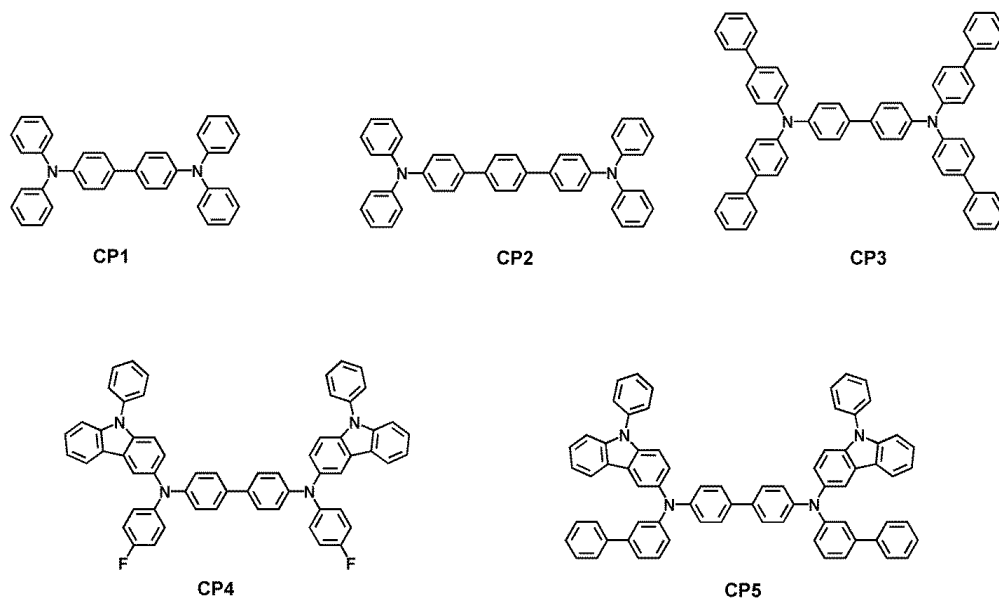
[0463] 상기 알칼리 금속 화합물은, Li_2O , Cs_2O , K_2O 등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속 화합물은, LiF, Li_2O , NaF, LiI, NaI, CsI, KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0464] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO, $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$), $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$) 등과 같은 알칼리 토금속 화합물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0465] 상기 희토류 금속 화합물은, YbF_3 , ScF_3 , ScO_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , 및 TbF_3 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은 YbF_3 , ScF_3 , TbF_3 , YbI_3 , ScI_3 , TbI_3 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0466] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트릴린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0467] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 환원성 도펀트만으로 이루어져 있거나, 상기 환원성 도펀트 외에 유기물을 더 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층이 상기 환원성 도펀트 및 유기물을 포함할 경우, 상기 환원성 도펀트는 상기 유기물로 이루어진 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.
- [0468] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0469] [제2전극(190)]
- [0470] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극인 캐소드(cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(190)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다.
- [0471] 상기 제2전극(190)은, 리튬(Li), 은(Ag), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), ITO 및 IZO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 제2전극(190)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다.
- [0472] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0473] [도 2 내지 4에 대한 설명]
- [0474] 한편, 도 2의 유기 발광 소자(20)는 제1캐핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 3의 유기 발광 소자(30)는 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 4의 유기 발광 소자(40)는 제1캐핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.
- [0475] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.
- [0476] 유기 발광 소자(20, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제1전극(110) 및 제1캐핑층(210)을 지나 외부로 추출될 수 있고, 유기 발광 소자(30, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)을 지나 외부로 추출될 수 있다.
- [0477] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.
- [0478] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 서로 독립적으로, 유기물로 이루어진 유기 캐핑층, 무기물로 이루어진 무기 캐핑층, 또는 유기물 및 무기물을 포함한 복합 캐핑층일 수 있다.
- [0479] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물, 아민계 화합물, 포르핀 유도체 (porphine derivatives), 프탈로시아닌 유도체 (phthalocyanine derivatives), 나프탈로시아닌 유도체 (naphthalocyanine derivatives), 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나의 물질을 포함할 수 있다. 상기 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물 및 아민계 화합물은, 선택적으로, O, N, S, Se, Si, F, Cl, Br 및 I 중에서 선택된 적어도 하나의 원소를 포함한 치환기로 치환될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민계 화합물을 포함할 수 있다.

[0480] 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 또는 상기 화학식 202로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0481] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화합물 HT28 내지 HT33 및 하기 화합물 CP1 내지 CP5 중에서 선택된 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0482]

[0483] 도 2의 제1캐핑층(210) 및 도 3의 제2캐핑층(220)은 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 포함할 수 있다.

[0484] 도 4의 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 포함할 수 있다.

[0485] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1 내지 4를 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0486] 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층은 각각, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 소정 영역에 형성될 수 있다.

[0487] 진공 증착법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 증착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500℃의 증착 온도, 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 화합물 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

[0488] 스핀 코팅법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 코팅 조건은, 예를 들면, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도 및 약 80℃ 내지 200℃의 열처리 온도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 화합물 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

[0489] [치환기의 일반적인 정의]

[0490] 본 명세서 중 C_1-C_{60} 알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1-C_{60} 알킬렌기는 상기 C_1-C_{60} 알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

[0491] 본 명세서 중 C_2-C_{60} 알케닐기는, 상기 C_2-C_{60} 알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서

중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0492] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알킬닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에틸닐기, 프로필닐기, 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알킬렌기는 상기 C₂-C₆₀알킬닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0493] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는, -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0494] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0495] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리아졸리딘닐기(1,2,3,4-oxatriazolidinyl), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranlyl), 테트라히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0496] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0497] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸닐기, 2,3-히드로퓨라닐기, 2,3-히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0498] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0499] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함된다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0500] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.
- [0501] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 8 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예에는,

플루오레닐기 등이 포함되다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0502] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 구체예에는, 카바졸일기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0503] 본 명세서 중 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 5 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

[0504] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이란, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹과 동일한 구조를 갖되, 고리-형성 원자로서, 탄소(탄소수는 1 내지 60일 수 있음) 외에, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 그룹을 의미한다.

[0505] 본 명세서 중, 상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0506] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0507] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0508] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0509] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴

옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0510] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0511] 중에서 선택되고,

[0512] 상기 Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0513] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu^t"은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"는 메톡시기를 의미한다.

[0514] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0515] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0516] 본 명세서 중 * 및 *'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0517] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성에 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.

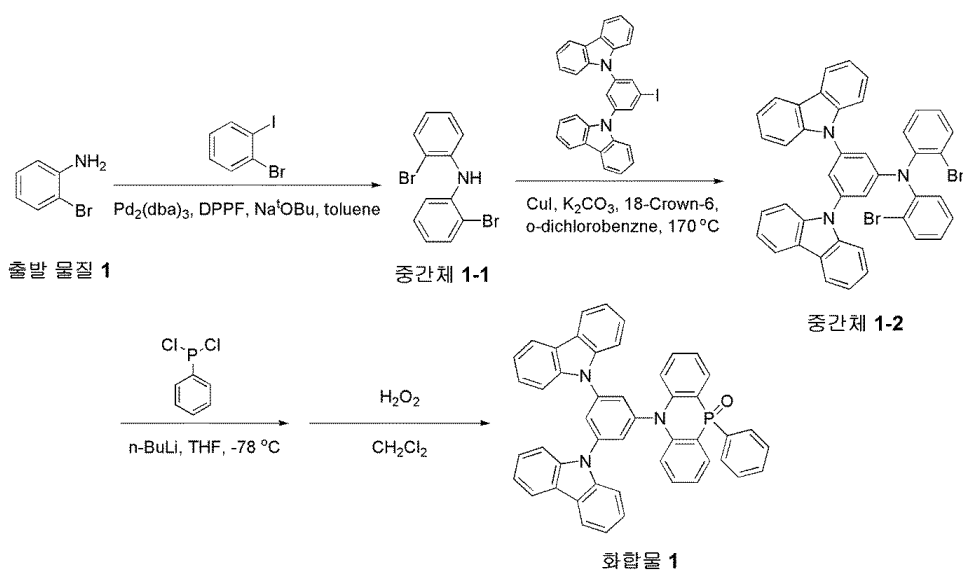
[0518] [실시예]

[0519] 합성예

[0520] 합성예 1: 화합물 1의 합성

[0521] 하기 반응식 1에 따라 화합물 1를 합성하였다:

[0522] <반응식 1>



[0523] 중간체 1-1의 합성

[0524] 출발 물질 1 (22.8 g, 132.5 mmol), 2-bromoiodobenzene (46.85 g, 165.6 mmol), Na^tOBu (17.8 g, 185.2 mmol), Pd₂(dba)₃ (6.07g, 6.6 mmol), DPPF (10.82, 13.2 mmol), 무수 toluene (300 mL)를 넣고, 120°C에서 10

시간 동안 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시킨 후, Celit로 필터하였다. 유기 용매를 제거한 후 생성된 반응 혼합물을 n-hexane으로 컬럼 분리하여, 중간체 1-1 (35.5 g, 82%)을 얻었다. 생성된 화합물을 ^1H NMR 및 ^{13}C NMR을 통하여 확인하였다.

[0525] ^1H NMR (CD_2Cl_2 , ppm) : 7.63 (d, 2H), 7.34-7.27 (m, 2H), 6.94-6.88 (m, 2H), 6.48 (s, 1H), ^{13}C NMR (CD_2Cl_2 , ppm) : 140.02, 133.18, 128.21, 122.67, 118.11, 114.20.

[0526] 중간체 1-2의 합성

[0527] 중간체 1-1 (3.58 g, 10.93 mmol, 7.47 g, 22.8 mmol), 9,9'-(5-iodo-1,3-phenylene)bis(9H-carbazole) (13.36 g, 25 mmol), 18-crown-6 (0.79 g, 3 mmol), K_2CO_3 (8.29 g, 60 mmol)와 CuI (1.14 g, 6 mmol)를 o-dichlorobenzene (80 mL)에 녹인 후 180°C에서 48시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시킨 후 감압 증류하여 반응 용매를 제거하였다. 생성된 반응 혼합물을 EtOAc에 녹인 후 Celite로 필터하였다. EtOAc를 추출하고, 증류수로 씻어 준 후 유기층을 감압 증류하고, n-hexane: dichloromethane (4:1)로 컬럼 분리하여, 중간체 1-2 (5.02g, 30 %)를 얻었다. 생성된 화합물을 ^1H NMR 및 MS/FAB을 통하여 확인하였다.

[0528] ^1H NMR ($\text{DMSO}-d_6$, ppm) : 8.29 (d, 4H), 8.18 (s, 1H), 8.11 (d, 2H), 7.74 (d, 4H), 7.67-7.60 (m, 6H), 7.57-7.48 (m, 7H), 7.45-7.42 (m, 4H), Mass (EI, m/z): 733 [M+2].

[0529] 화합물 1의 합성

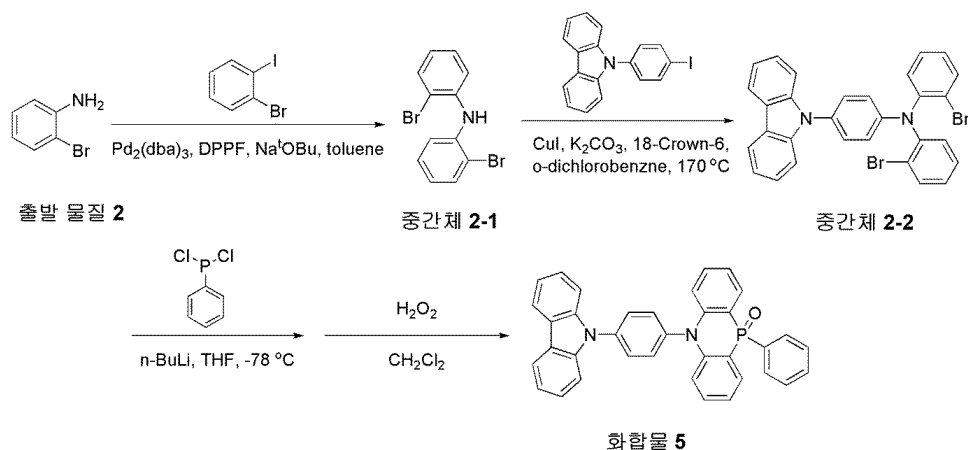
[0530] 중간체 1-2 (2.0 g, 3.52 mmol, 3.5 g, 4.77 mmol)를 무수 THF (70 mL)에 녹인 후 온도를 -78°C까지 내렸다. 반응 온도를 유지하면서, 반응 혼합물에 n-BuLi (4.2 mL, 10.5 mmol, 2.5M in hexane)를 천천히 적가한 후 같은 온도에서 1시간 동안 교반하였다. 이 반응 혼합물에 dichlorophenylphosphine (0.94 g, 5.25 mmol)를 무수 THF (5 mL)에 녹여 적가한 후 실온에서 24시간 교반하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 추출하고 증류수로 씻은 후 유기층을 감압 증류한 후 더 이상 정제하지 않고, 형성된 화합물을 dichloromethane (50 mL)에 녹인 후 H_2O_2 (5mL)를 가하여 실온에서 24시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 추출하고, 증류수로 씻어준 후, n-hexane: THF (3:1)로 컬럼 분리하여, 화합물 1 (1.02 g, 31 %)를 얻었다. 생성된 화합물을 ^1H NMR, ^{13}C NMR 및 MS/FAB을 통하여 확인하였다.

[0531] ^1H NMR ($\text{DMSO}-d_6$, 300MHz, ppm) : 8.27 (d, 4H), 8.20 (s, 1H), 8.07 (d, 2H), 7.72 (d, 4H), 7.68-7.61 (m, 6H), 7.54-7.51 (m, 5H), 7.49-7.44 (m, 2H), 7.36-7.31 (m, 4H), 7.21-7.16 (m, 2H), 7.09-7.04 (m, 2H), ^{13}C NMR ($\text{DMSO}-d_6$, 75MHz, ppm) : 143.7, 142.1, 141.8, 140.8, 135.6, 134.1, 134.0, 132.4, 132.0, 129.8, 128.8, 128.4, 127.6, 124.2, 123.8, 123.4, 120.4, 119.7, 110.0, 108.7, 97.8. Mass (EI, m/z): 697.

[0532] 합성예 2: 화합물 5의 합성

[0533] 하기 반응식 2에 따라 화합물 5를 합성하였다:

[0534] <반응식 2>



[0535]

[0536] 중간체 2-1의 합성

[0537] 출발 물질 2 (22.8 g, 132.5 mmol), 2-bromoiodobenzene (46.85 g, 165.6 mmol), Na^tOBu (17.8 g, 185.2 mmol), Pd₂(dba)₃ (6.07g, 6.6 mmol), DPPF (10.82, 13.2 mmol), 무수 toluene (300 mL)를 넣고, 120℃에서 10 시간 동안 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시킨 후, Celite로 필터하였다. 유기 용매를 제거한 후 생성된 반응 혼합물을 n-hexane으로 컬럼 분리하여, 중간체 2-1 (35.5 g, 82%)을 얻었다. 생성된 화합물을 ¹H NMR 및 ¹³C NMR을 통하여 확인하였다.

[0538] ¹H NMR (CD₂Cl₂, ppm) : 7.63 (d, 2H), 7.34-7.27 (m, 2H), 6.94-6.88 (m, 2H), 6.48 (s, 1H), ¹³C NMR (CD₂Cl₂, ppm) : 140.02, 133.18, 128.21, 122.67, 118.11, 114.20.

[0539] 중간체 2-2의 합성

[0540] 중간체 2-1 (3.58 g, 10.93 mmol), 9-(4-iodophenyl)-9H-carbazole (11.08g, 30 mmol), 18-crown-6 (0.40 g, 1.5 mmol), K₂CO₃ (4.14 g, 30 mmol)와 CuI (0.57 g, 3 mmol)를 o-dichlorobenzene (50 mL)에 녹인 후 180℃에서 32시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시킨 후 감압 증류하여 반응 용매를 제거하였다. 생성된 반응 혼합물을 EtOAc에 녹인 후 Celite로 필터하였다. EtOAc를 추출하고, 증류수로 씻어 준 후 유기층을 감압 증류하여, n-hexane: dichloromethane (4:1)로 컬럼 분리하여, 중간체 2-2 (1.99 g, 32 %)를 얻었다. 생성된 화합물을 ¹H NMR 및 MS/FAB을 통하여 확인하였다.

[0541] ¹H NMR (DMSO-d₆, ppm) : 8.23 (d, 2H), 7.77 (d, 2H), 7.49-7.42 (m, 6H), 7.39-7.21 (m, 8H), 6.80 (d, 2H), Mass (EI, m/z): 568 [M+2].

[0542] 화합물 5의 합성

[0543] 중간체 2-2 (2.0 g, 3.52 mmol)를 무수 THF (50 mL)에 녹인 후 온도를 -78℃까지 내렸다. 반응 온도를 유지하면서, 반응 혼합물에 n-BuLi (3.1 mL, 7.75 mmol, 2.5M in hexane)를 천천히 적가한 후 같은 온도에서 1시간 동안 교반하였다. 이 반응 혼합물에 dichlorophenylphosphine (0.64g, 3.55 mmol)를 무수 THF (5 mL)에 녹여 적가한 후 실온에서 24시간 교반하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 추출하고 증류수로 씻은 후 유기층을 감압 증류한 후 더 이상 정제하지 않고, 형성된 화합물을 dichloromethane (50 mL)에 녹인 후 H₂O₂ (5mL)를 가하여 실온에서 24시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 EtOAc로 추출하고, 증류수로 씻어준 후, n-hexane: THF (3:1)로 컬럼 분리하여, 화합물 5 (0.54 g, 29%)를 얻었다. 생성된 화합물을 ¹H NMR, ¹³C NMR 및 MS/FAB을 통하여 확인하였다.

[0544] ^1H NMR (DMSO- d_6 , 300MHz, ppm) : 8.23 (d, 2H), 7.51-7.25 (m, 15H), 7.20-7.05 (m, 8H), ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 75MHz, ppm) : 143.8, 140.2, 139.6, 134.5, 133.5, 133.2, 131.4, 129.4, 128.4, 128.1, 127.4, 126.4, 124.4, 124.1, 120.3, 124.1, 109.8. Mass (EI, m/z): 532.

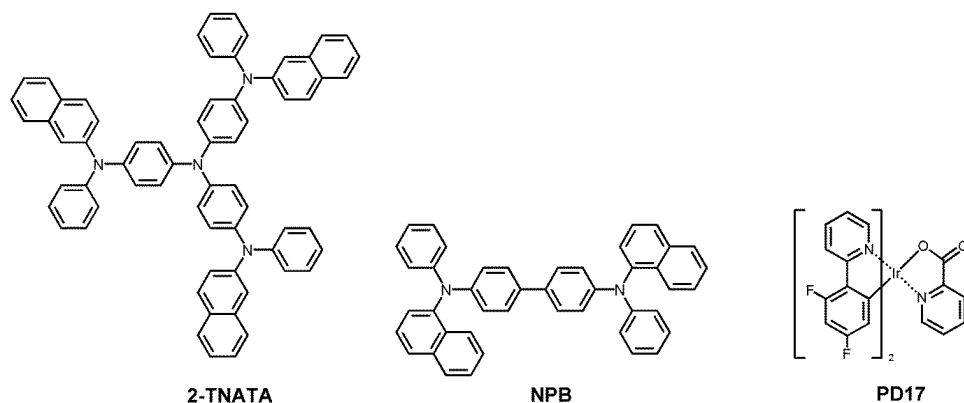
[0545] **실시예 1**

[0546] 기판 및 애노드로서 코닝(corning) 15 Ω/cm^2 (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착 장치에 이 유리기판을 설치하였다.

[0547] 상기 ITO 애노드 상에 2-TNATA를 진공 증착하여 700Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 NPB를 진공 증착하여 100Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0548] 상기 정공 수송층 상부에 화합물 1(호스트) 및 PD17(도펀트)를 90:10의 중량비로 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0549] 상기 발광층 상부에 Alq₃을 진공 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상부에 Al를 진공 증착하여 1200Å 두께의 캐소드를 형성하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0550]

[0551] **실시예 2 및 비교예 1 및 2**

[0552] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

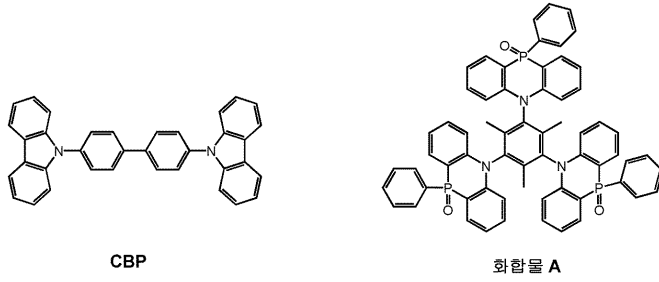
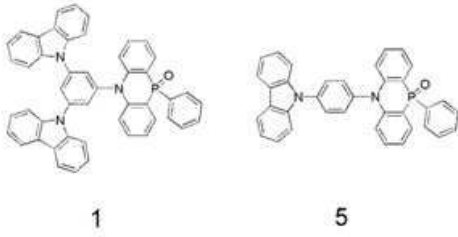
[0553] **평가예**

[0554] 상기 실시예 1, 2 및 비교예 1, 2에서 제작된 유기 발광 소자의 구동 전압, 효율 및 색좌표를 Kethley SMU 236 (600 nit)를 이용하여 측정하여, 그 결과를 표 1에 나타내었다.

표 1

	발광층 호스트	구동전압(V)	효율(cd/A)	색좌표
실시예 1	화합물 1	6.1	10.8	(0.195, 0.318)
실시예 2	화합물 5	6.2	9.7	(0.191, 0.315)
비교예 1	CBP	7.8	4.0	(0.189, 0.311)
비교예 2	화합물 A	6.7	2.8	(0.189, 0.307)

[0555]



상기 표 1로부터 실시예 1 및 2의 유기 발광 소자는 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자에 비하여 저구동전압 및 고효율을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

10, 20, 30, 40: 유기 발광 소자

110: 제1전극

130: 정공 수송 영역

150: 발광층

170: 전자 수송 영역

190: 제2전극

210: 제1캐핑층

220: 제2캐핑층

도면

도면1

10

190
150
110

도면2

20

190
150
110
210

도면3

30

220
190
150
110

도면4

40

220
190
150
110
210