(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0119701
(43) 공개일자 2019년10월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07F 5/02* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07F 5/02 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0042914
(22) 출원일자 2018년04월12일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
경희대학교 산학협력단
경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732 (서천동, 경희대학교 국제캠퍼스내)
(72) 발명자
박미화
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
권장혁
경기도 성남시 수정구 위례순환로 100, 3306동 203호(창곡동, 위례자이)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리앤목특허법인

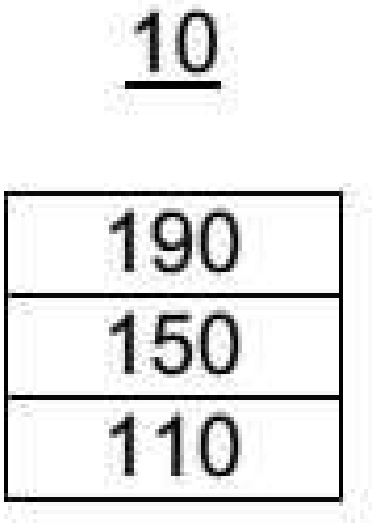
전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요 약

소정 화학식을 갖는 헤테로시클릭 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
H01L 51/50 (2013.01)
C09K 2211/1096 (2013.01)
(72) 발명자
김태경
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
이주영
경기도 수원시 팔달구 일월로18번길 4-26, 172동 1604호(화서동, 꽃뫼버들마을 코오롱아파트)
정혜인
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
안대현
서울특별시 동대문구 회기로23길 67, 리더벨리 103호(이문동)
신대엽
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
김시우
서울특별시 동대문구 회기로29길 11, 402호(휘경동)
문지수
서울특별시 도봉구 시루봉로 107, 29동 801호(방학동, 신동아1단지아파트)

명 세 서

청구범위

청구항 1

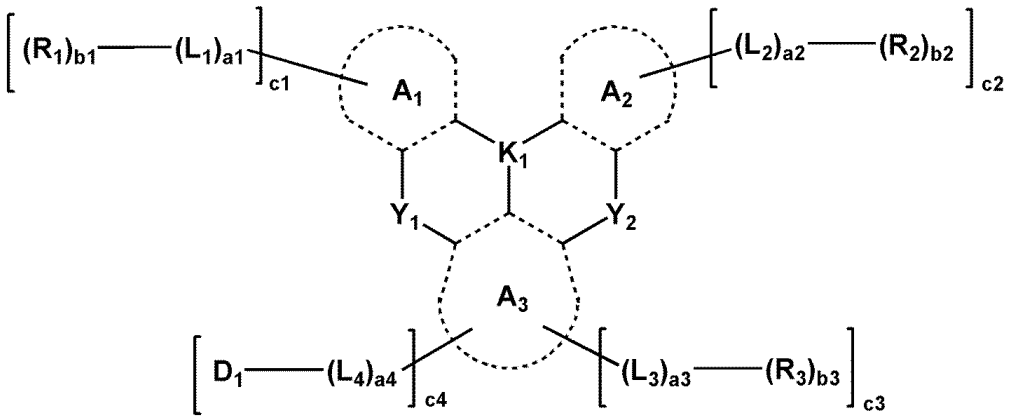
제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

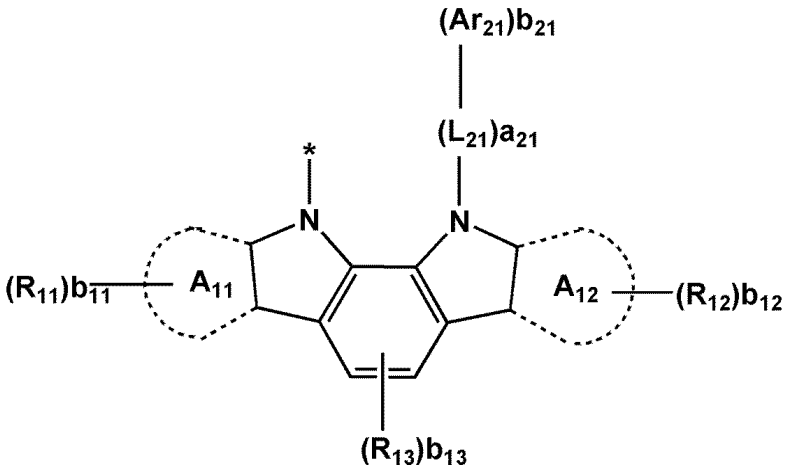
상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고,

상기 유기층은 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 포함한, 유기 발광 소자:

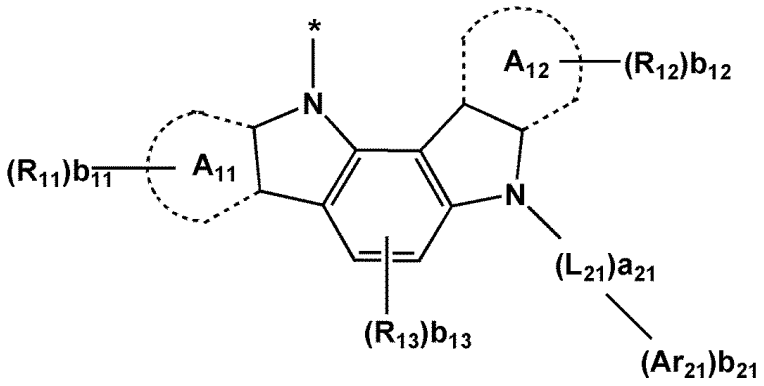
<화학식 1>



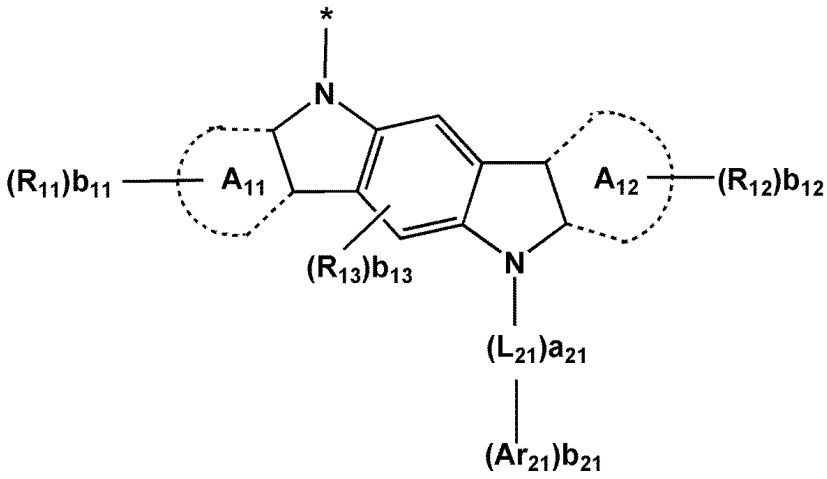
<화학식 2A>



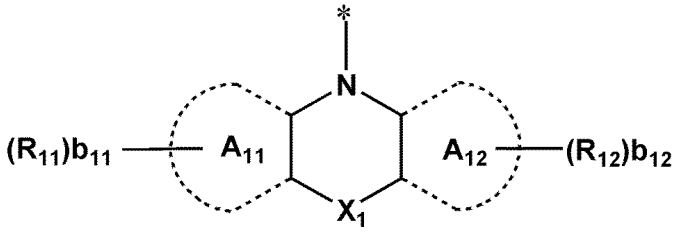
<화학식 2B>



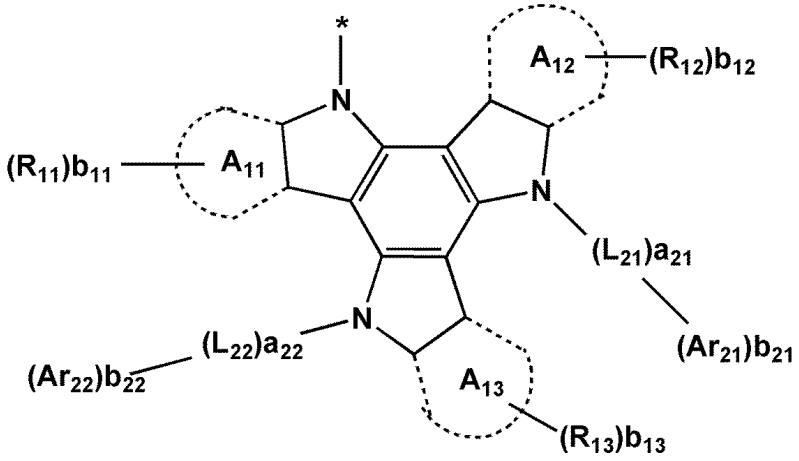
<화학식 2C>



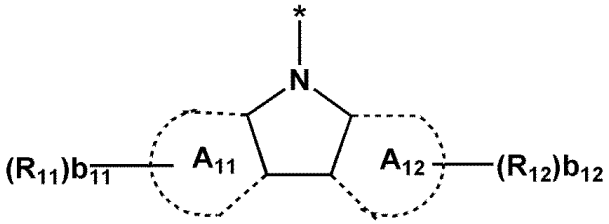
<화학식 2D>



<화학식 2E>



<화학식 2F>



상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중,

고리 A_1 내지 A_3 및 A_{11} 내지 A_{13}은 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 또는 C_2-C_{60}헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

K_1은 B, Al, Ga, P, P=O, 또는 P=S이고,

Y_1 및 Y_2는 서로 독립적으로 O, S 또는 N(R_{52})이고,

D_1은 화학식 2A 내지 화학식 2F 중에서 선택되고,

X_1은 C(R_{53})(R_{54}) 또는 N(R_{55})이고,

L_1 내지 L_4, L_{21} 및 L_{22}는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

a1 내지 a4, a21 및 a22는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a1이 2 이상일 경우 2 이상의 L_1은 서로 동일하거나 상이하고, a2가 2 이상일 경우 2 이상의 L_2는 서로 동일하거나 상이하고, a3가 2 이상일 경우 2 이상의 L_3는 서로 동일하거나 상이하고, a4가 2 이상일 경우 2 이상의 L_4는 서로 동일하거나 상이하고, a21이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{21}는 서로 동일하거나 상이하고, a22가 2 이상일 경우 2 이상의 L_{22}는 서로 동일하거나 상이하고,

a1이 0일 경우 *-$(L_1)_{a1}$-*'은 단일결합이고, a2가 0일 경우 *-$(L_2)_{a2}$-*'는 단일결합이고, a3가 0일 경우 *-$(L_3)_{a3}$-*'는 단일결합이고, a4가 0일 경우 *-$(L_4)_{a4}$-*'은 단일결합이고, a21가 0일 경우 *-$(L_{21})_{a21}$-*'은 단일결합이고, a22가 0일 경우 *-$(L_{22})_{a22}$-*'은 단일결합이고,

R_1 내지 R_3, R_{11} 내지 R_{13}, R_{52} 내지 R_{55} 및 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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_2-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-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 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q_1)(Q_2)(Q_3), -B(Q_1)(Q_2), -C(=O)(Q_1), -N(Q_1)(Q_2), -P(=O)(Q_1)(Q_2), -P(=S)(Q_1)(Q_2), -S(=O)(Q_1)(Q_2) 및 -$S(=O)_2$(Q_1)(Q_2) 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아니고,

b1 내지 b3, b11 내지 b13, 및 b21 내지 b22는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

b1이 2 이상일 경우 2 이상의 R_1은 서로 동일하거나 상이하고, b2가 2 이상일 경우 2 이상의 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, b3가 2 이상일 경우 2 이상의 R_3는 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, b13이 2 이상일

경우 2 이상의 R_{13}는 서로 동일하거나 상이하고, b21이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{21}은 서로 동일하거나 상이하고, b22가 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{22}는 서로 동일하거나 상이하고,

c1 내지 c3는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

c4는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

상기 치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹, 치환된 C_2-C_{60}헤테로시클릭 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 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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;

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, 비페닐기 및 터페닐기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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, 비페닐기, 터페닐기, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$ 및 $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10}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, 비페닐기 및 터페닐기; 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, 아미노기, 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}알킬기로 치환된 C_6-C_{60}아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

* 및 *'는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

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

상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,

상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 3

제1항에 있어서,

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

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 발광층에 상기 헤테로시클릭 화합물이 도펀트이고, 상기 발광층이 호스트를 더 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 발광층에 포함된 상기 헤테로시클릭 화합물이 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고,

상기 발광층이 지연 형광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 6

제2항에 있어서,

상기 정공 수송 영역이 p-도펀트를 포함하고,

상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하인, 유기 발광 소자.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 p-도펀트는 퀴논 유도체를 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 8

제2항에 있어서,

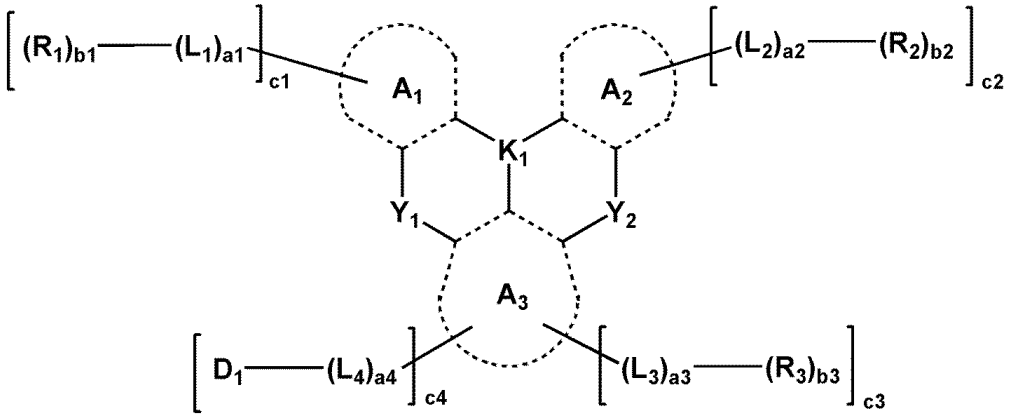
상기 전자 수송 영역이 트리아졸-함유 화합물 또는 벤조트리아졸-함유 화합물을 포함하고,

알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이들 중 임의의 조합을 더 포함한, 유기 발광 소자.

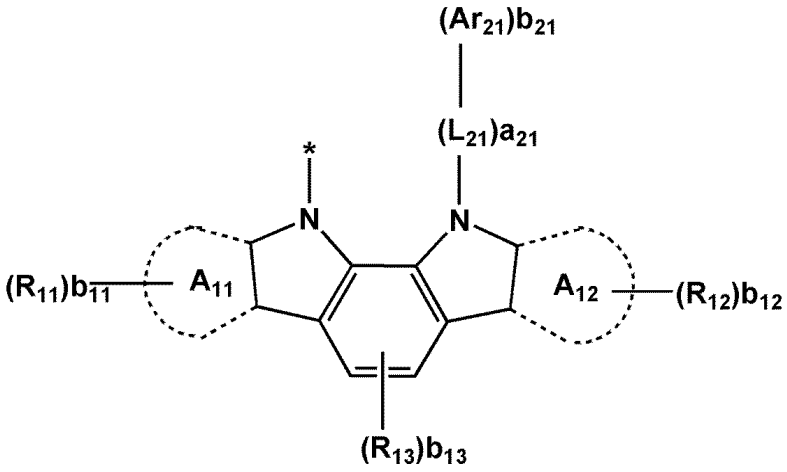
청구항 9

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물:

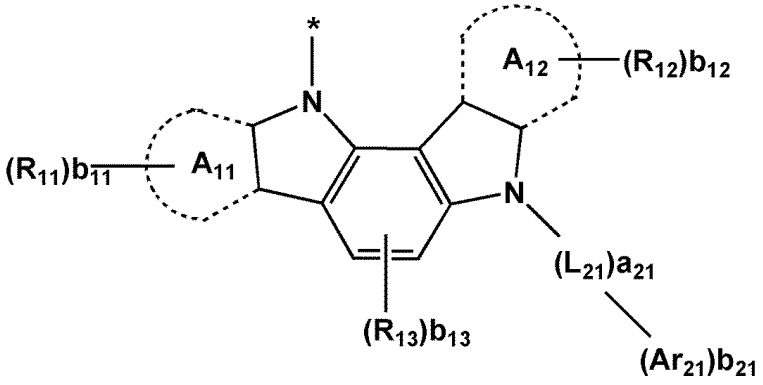
<화학식 1>



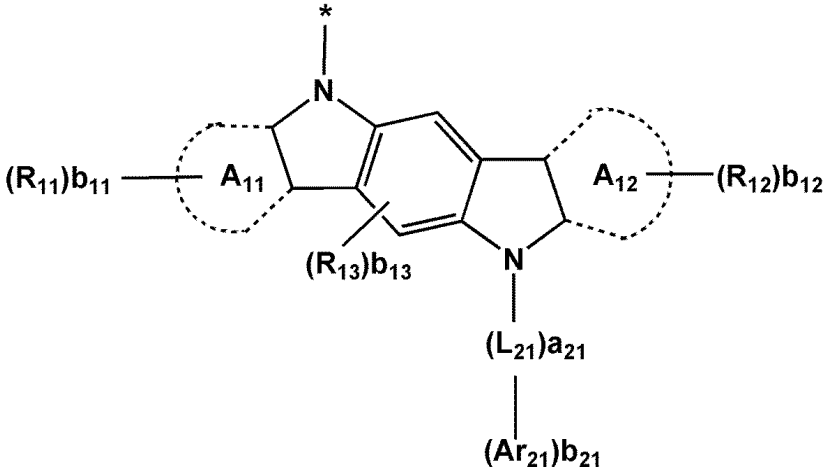
<화학식 2A>



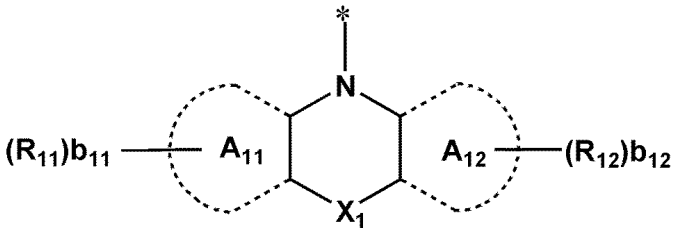
<화학식 2B>



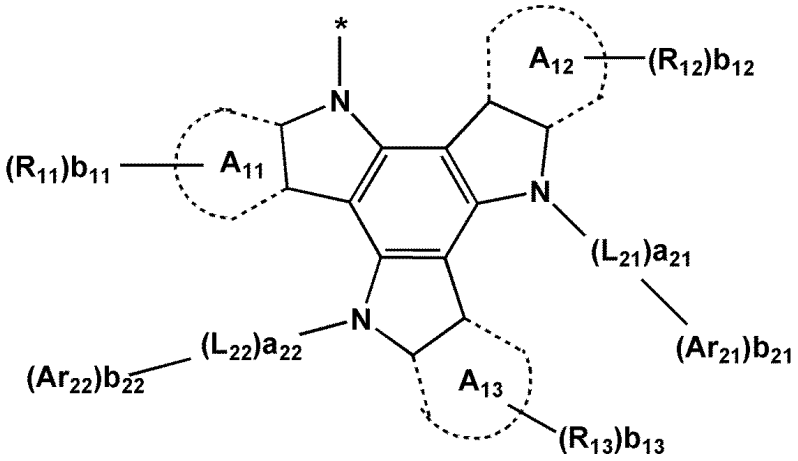
<화학식 2C>



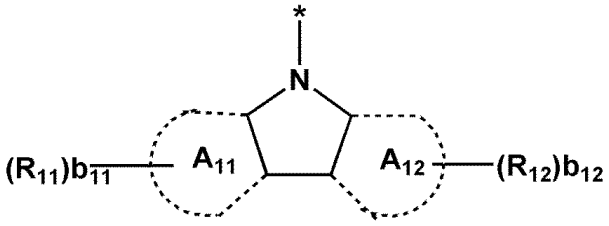
<화학식 2D>



<화학식 2E>



<화학식 2F>



상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중,

고리 A_1 내지 A_3 및 A_{11} 내지 A_{13}은 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 또는 C_2-C_{60}헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

K_1은 B, Al, Ga, P, P=O, 또는 P=S이고,

Y_1 및 Y_2는 서로 독립적으로 O, S 또는 $N(R_{52})$이고,

D_1은 화학식 2A 내지 화학식 2F 중에서 선택되고,

X_1은 $C(R_{53})(R_{54})$ 또는 $N(R_{55})$이고,

L_1 내지 L_4, L_{21} 및 L_{22}는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

a1 내지 a4, a21 및 a22는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a1이 2 이상일 경우 2 이상의 L_1은 서로 동일하거나 상이하고, a2가 2 이상일 경우 2 이상의 L_2는 서로 동일하거나 상이하고, a3가 2 이상일 경우 2 이상의 L_3는 서로 동일하거나 상이하고, a4가 2 이상일 경우 2 이상의 L_4는 서로 동일하거나 상이하고, a21이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{21}는 서로 동일하거나 상이하고, a22가 2 이상일 경우 2 이상의 L_{22}는 서로 동일하거나 상이하고,

a1이 0일 경우 $*-(L_1)_{a1}-*'$은 단일결합이고, a2가 0일 경우 $*-(L_2)_{a2}-*'$는 단일결합이고, a3가 0일 경우 $*-(L_3)_{a3}-*'$는 단일결합이고, a4가 0일 경우 $*-(L_4)_{a4}-*'$은 단일결합이고, a21가 0일 경우 $*-(L_{21})_{a21}-*'$은 단일결합이고, a22가 0일 경우 $*-(L_{22})_{a22}-*'$은 단일결합이고,

R_1 내지 R_3, R_{11} 내지 R_{13}, R_{52} 내지 R_{55} 및 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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_2-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-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 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$, $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$, $-S(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-S(=O)_2(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아니고,

b1 내지 b3, b11 내지 b13, 및 b21 내지 b22는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

b1이 2 이상일 경우 2 이상의 R_1은 서로 동일하거나 상이하고, b2가 2 이상일 경우 2 이상의 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, b3가 2 이상일 경우 2 이상의 R_3는 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, b13이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{13}는 서로 동일하거나 상이하고, b21이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{21}은 서로 동일하거나 상이하고, b22가 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{22}는 서로 동일하거나 상이하고,

c1 내지 c3는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

c4 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

상기 치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹, 치환된 C_2-C_{60}헤테로시클릭 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 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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;

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, 비페닐기 및 터페닐기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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, 비페닐기, 터페닐기, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$ 및 $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10}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, 비페닐기 및 터페닐기; 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, 아미노기, 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}알킬기로 치환된 C_6-C_{60}아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

* 및 *'는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 고리 A_1 내지 A_3 및 A_{11} 내지 A_{13}은 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 피롤 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 11

제9항에 있어서,

상기 L_1 내지 L_4, L_{21} 및 L_{22}는 서로 독립적으로, 페닐렌(phenylene)기, 펜탈레닐렌(pentalenylene)기, 인데닐렌(indenylene)기, 나프틸렌(naphthylene)기, 아줄레닐렌(azulenylene)기, 헵탈레닐렌(heptalenylene)기, 인다세닐렌(indacenylene)기, 아세나프틸렌(acenaphthylene)기, 플루오레닐렌(fluorenylene)기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌(phenalenylene)기, 페난트레닐렌(phenanthrenylene)기, 안트라세닐렌(anthracenylene)기, 플루오란테닐렌(fluoranthenylene)기, 트리페닐레닐렌(triphenylenylene)기, 파이레닐렌(pyrenylene)기, 크라이세닐렌(chrysenylene)기, 나프타세닐렌(naphthacenylene)기, 피세닐렌(picenylene)기, 페릴레닐렌(perylenylene)기, 펜타페닐렌(pentaphenylene)기, 헥사세닐렌(hexacenylene)기, 펜타세닐렌(pentacenylene)기, 루비세닐렌(rubicenylene)기, 코로네닐렌(coronenylene)기, 오발레닐렌(ovalenylene)기, 피롤일렌(pyrrolylene)기, 티오페닐렌(thiophenylene)기, 퓨라닐렌(furanylene)기, 이미다졸일렌(imidazolylene)기, 피라졸일렌(pyrazolylene)기, 티아졸일렌(thiazolylene)기, 이소티아졸일렌(isothiazolylene)기, 옥사졸일렌(oxazolylene)기, 이속사졸일렌(isooxazolylene)기, 피리디닐렌(pyridinylene)기, 피라지닐렌(pyrazinylene)기, 피리미디닐렌(pyrimidinylene)기, 피리다지닐렌(pyridazinylene)기, 이소인돌일렌(isoindolylene)기, 인돌일렌(indolylene)기, 인다졸일렌(indazolylene)기, 푸리닐렌(purinylene)기, 퀴놀리닐렌(quinolinylene)기, 이소퀴놀리닐렌(isoquinolinylene)기, 벤조퀴놀리닐렌(benzoquinolinylene)기, 프탈라지닐렌(phthalazinylene)기, 나프티리디닐렌(naphthyridinylene)기, 퀴녹살리닐렌(quinoxalinylene)기, 퀴나졸리닐렌(quinazolinylene)기, 시놀리닐렌(cinnolinylene)기, 카바졸일렌(carbazolylene)기, 페난트리디닐렌(phenanthridinylene)기, 아크리디닐렌(acridinylene)기, 페난트롤리닐렌(phenanthrolinylene)기, 페나지닐렌(phenazinylene)기, 벤조이미다졸일렌(benzoimidazolylene)기, 벤조퓨라닐렌(benzofuranylene)기, 벤조티오페닐렌(benzothiophenylene)기, 이소벤조티아졸일렌(isobenzothiazolylene)기, 벤조옥사졸일렌(benzooxazolylene)기, 이소벤조옥사졸일렌(isobenzooxazolylene)기, 트리아졸일렌(triazolylene)기, 테트라졸일렌(tetrazolylene)기, 옥사디아졸일렌(oxadiazolylene)기, 트리아지닐렌(triazinylene)기, 디벤조퓨라닐렌(dibenzofuranylene)기, 디벤조티오페닐렌(dibenzothiophenylene)기, 벤조카바졸일렌기 및 디벤조카바졸일렌기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기 및 이미다조피리디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 피롤일렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 이소인돌일렌기, 인돌일렌기, 인다졸일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 카바졸일렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 트리아지닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기 및 디벤조카바졸일렌기; 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 12

제9항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_3, R_{11} 내지 R_{13}, R_{52} 내지 R_{55} 및 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 서로 독립적으로

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_2-C_{20}알케닐기, C_2-C_{20}알키닐기 및 C_1-C_{20}알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20}알킬기, C_2-C_{20}알케닐기, C_2-C_{20}알키닐기 및 C_1-C_{20}알콕시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_2-C_{20}알케닐기, C_2-C_{20}알키닐기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

$-B(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$ 및 $-C(=O)(Q_1)$; 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아니며,

Q_1 내지 Q_3 및 Q_{31} 내지 Q_{33}에 대한 설명은 각각 제9항에 기재된 바와 같은, 헤테로시클릭 화합물.

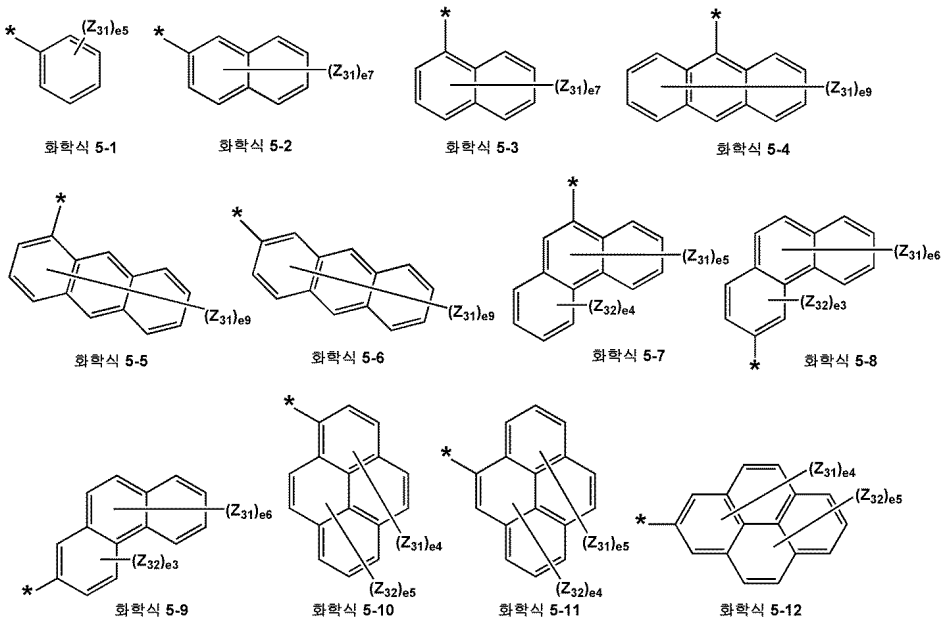
청구항 13

제9항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_3, R_{11} 내지 R_{13}, R_{52} 내지 R_{55} 및 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 서로 독립적으로

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, 헥실기 및

하기 화학식 5-1 내지 5-12으로 표시된 그룹 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아닌, 헤테로시클릭 화합물:



상기 화학식 5-1 내지 5-12 중

Z_{31} 내지 Z_{34}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택되고,

e2는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

e3는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

e4는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

e5는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

e6는 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

e7은 0 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

e9은 0 내지 9의 정수 중에서 선택되고,

*는 이웃한 원자와의 결합사이트이다.

청구항 14

제9항에 있어서,

상기 R_1 및 R_2는 ter-부틸기인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 15

제9항에 있어서,

상기 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 페닐기인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 16

제9항에 있어서,

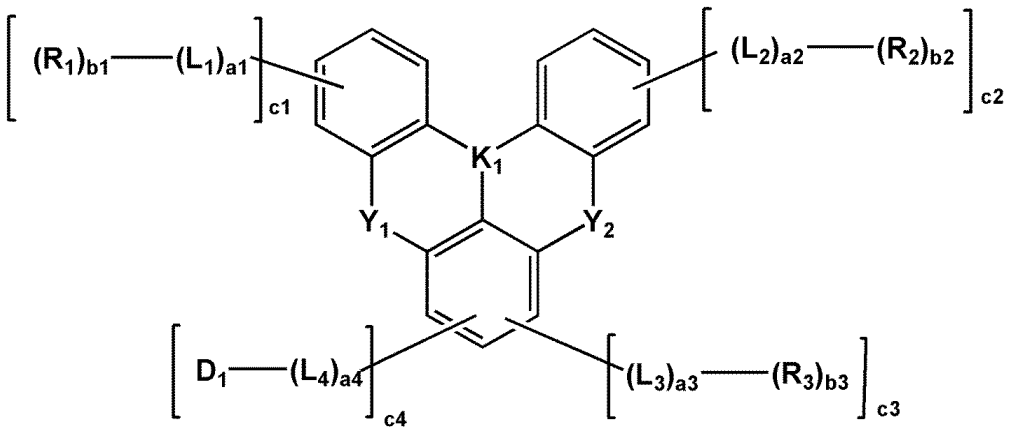
상기 c1 및 c2는 서로 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4이고, 상기 c3는 0, 1 또는 2이고, 상기 c4는 1, 2 또는 3인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 17

제9항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시된 화합물이 하기 화학식 1-1로 표시된, 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 1-1>



상기 화학식 1-1 중,

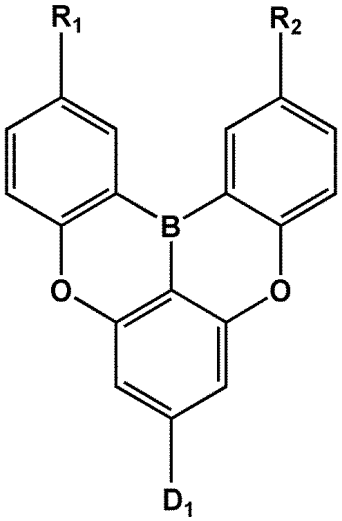
K_1, Y_1 및 Y_2, D_1, L_1 내지 L_4, a1 내지 a4, R_1 내지 R_3, b1 내지 b3, 및 c1 내지 c4에 대한 정의는 제9항 중의 설명과 동일하다.

청구항 18

제9항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시된 화합물이 하기 화학식 1-2로 표시된, 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 1-2>



상기 화학식 1-2 중,

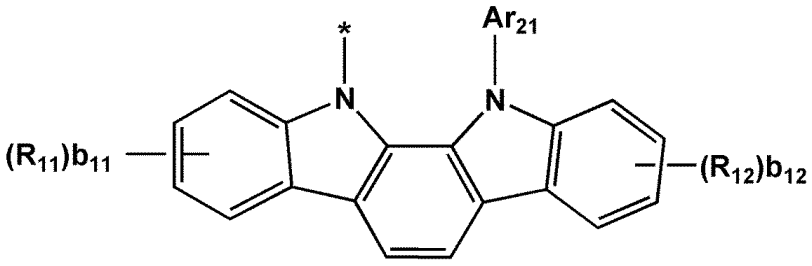
D_1, R_1 및R_2에 대한 정의는 제9항 중의 설명과 동일하다.

청구항 19

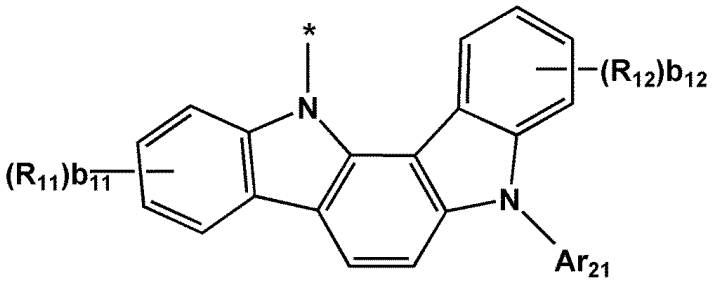
제9항에 있어서,

상기 D_1은 하기 화학식 2A-1 내지 2L-1 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:

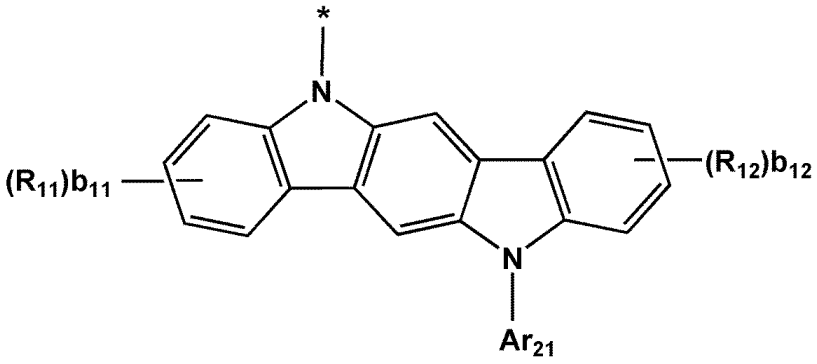
<화학식 2A-1>



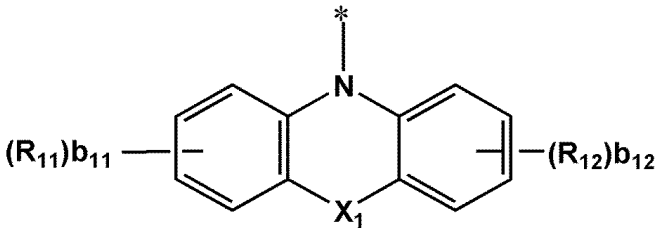
<화학식 2B-1>



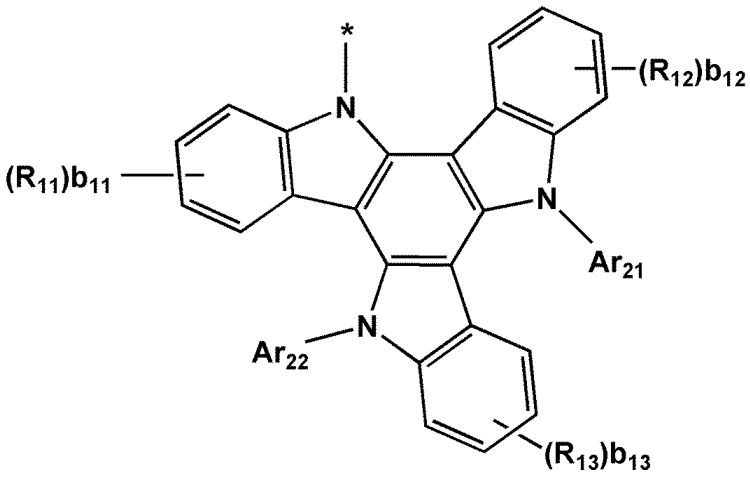
<화학식 2C-1>



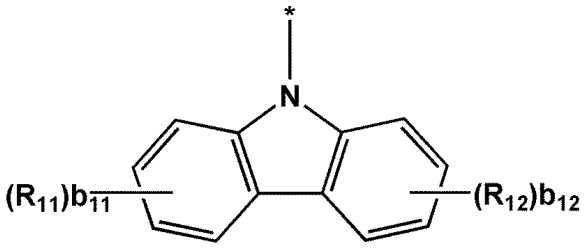
<화학식 2D-1>



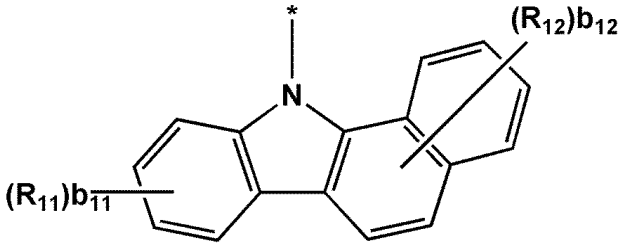
<화학식 2E-1>



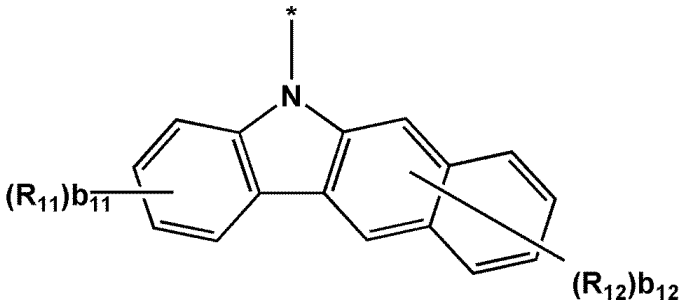
<화학식 2F-1>



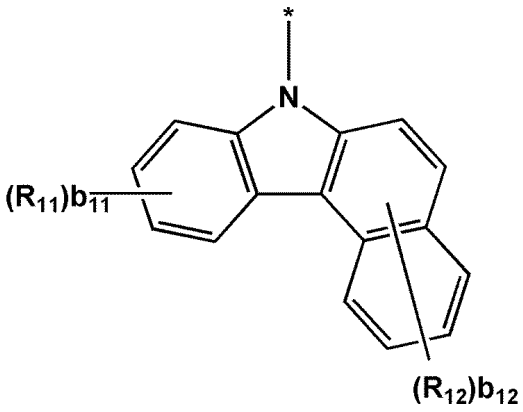
<화학식 2G-1>



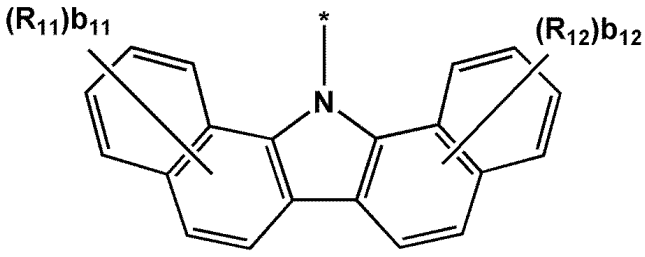
<화학식 2H-1>



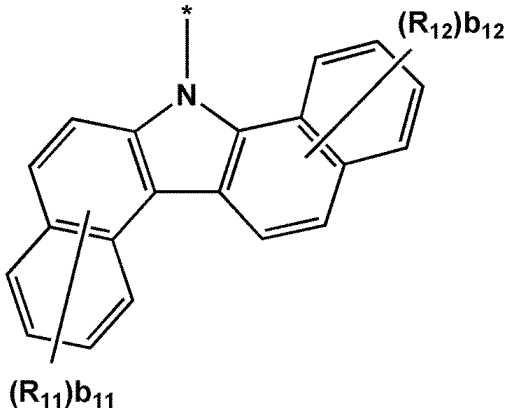
<화학식 2I-1>



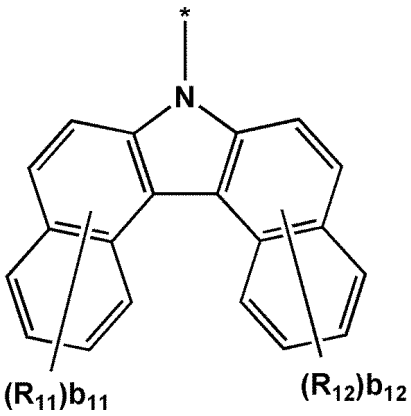
<화학식 2J-1>



<화학식 2K-1>



<화학식 2L-1>



상기 화학식 2A-1 내지 2L-1 중,

X_1은 $C(R_{53})(R_{54})$ 또는 $N(R_{55})$이고,

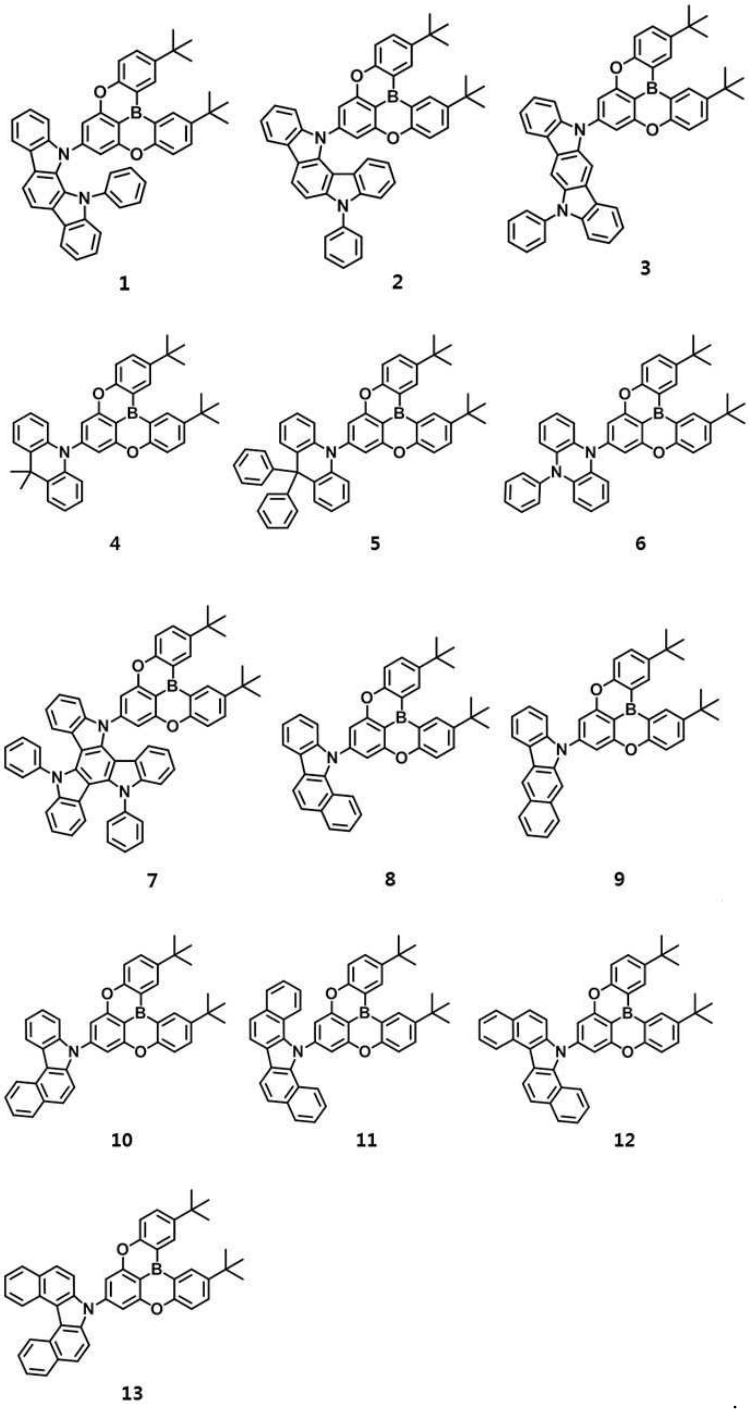
R_{11} 내지 R_{13}, R_{53} 내지 R_{55}, Ar_{21} 및 Ar_{22}는 수소, 중수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F-1에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아니며,

b11 내지 b13은 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되는, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 20

제9항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 하기 화합물 1 내지 13 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:



발명의 설명

기 술 분 야

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

배 경 기 술

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

[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

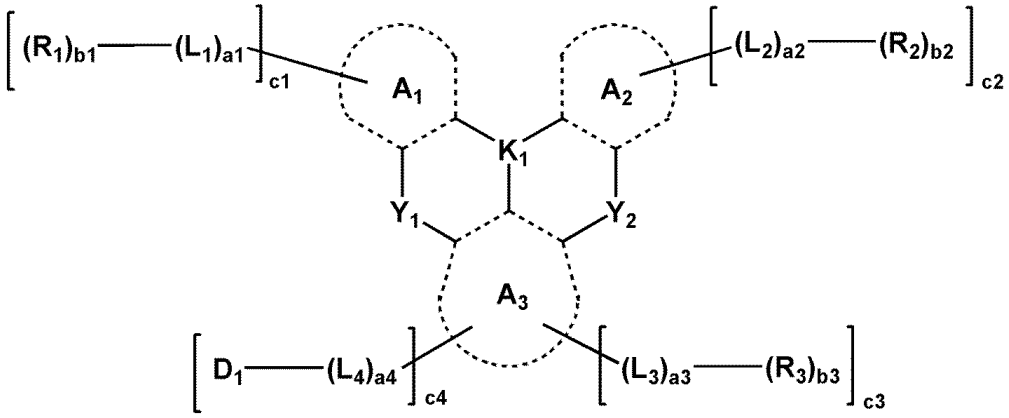
[0004] 헤테로시클릭 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

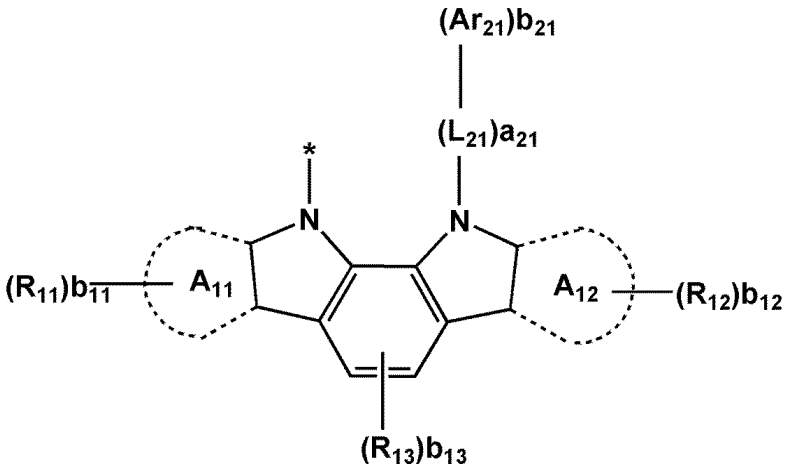
[0005] 일 측면에 따르면,

[0006] 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물이 제공된다.

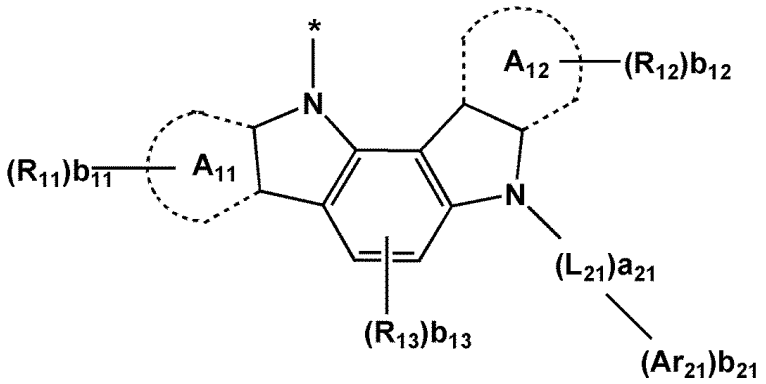
[0007] <화학식 1>

[0008] 

[0009] <화학식 2A>

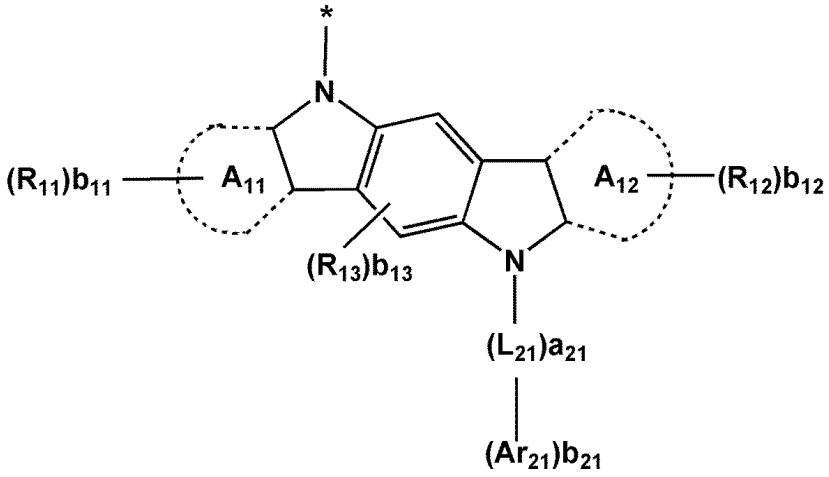
[0010] 

[0011] <화학식 2B>



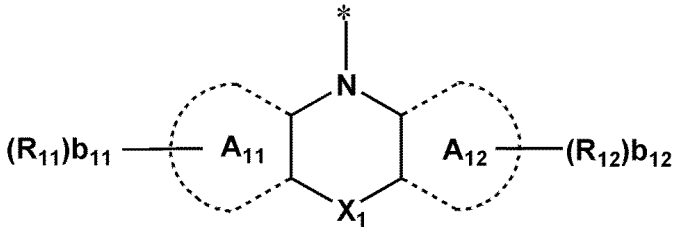
[0012]

[0013] <화학식 2C>



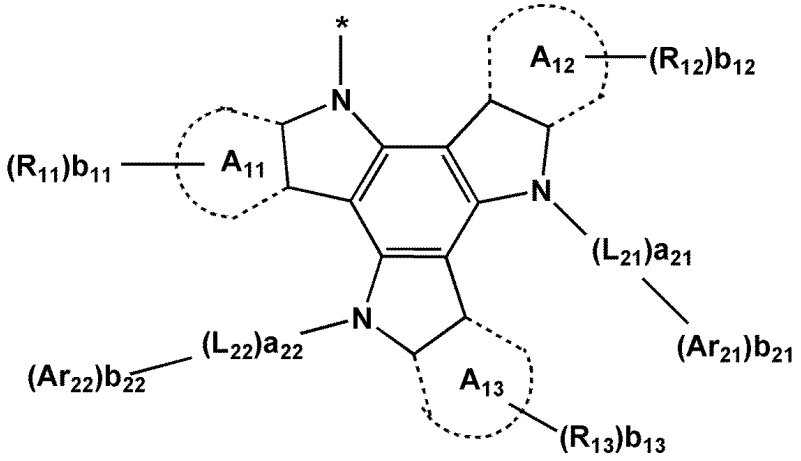
[0014]

[0015] <화학식 2D>



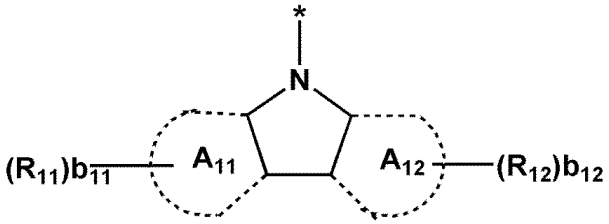
[0016]

[0017] <화학식 2E>



[0018]

[0019] <화학식 2F>



[0020]

[0021] 상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중,

[0022] 고리 A_1 내지 A_3 및 A_{11} 내지 A_{13}은 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 또는 C_2-C_{60}헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0023] K_1은 B, Al, Ga, P, P=O, 또는 P=S이고,

[0024] Y_1 및 Y_2는 서로 독립적으로 O, S 또는 $N(R_{52})$이고,

[0025] D_1은 화학식 2A 내지 화학식 2F 중에서 선택되고,

[0026] X_1은 $C(R_{53})(R_{54})$ 또는 $N(R_{55})$이고,

[0027] L_1 내지 L_4, L_{21} 및 L_{22}는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0028] a1 내지 a4, a21 및 a22는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0029] a1이 2 이상일 경우 2 이상의 L_1은 서로 동일하거나 상이하고, a2가 2 이상일 경우 2 이상의 L_2는 서로 동일하거나 상이하고, a3가 2 이상일 경우 2 이상의 L_3는 서로 동일하거나 상이하고, a4가 2 이상일 경우 2 이상의 L_4는 서로 동일하거나 상이하고, a21이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{21}는 서로 동일하거나 상이하고, a22가 2 이상일 경우 2 이상의 L_{22}는 서로 동일하거나 상이하고,

[0030] a1이 0일 경우 $*-(L_1)_{a1}-*'$은 단일결합이고, a2가 0일 경우 $*-(L_2)_{a2}-*'$는 단일결합이고, a3가 0일 경우 $*-(L_3)_{a3}-*'$는 단일결합이고, a4가 0일 경우 $*-(L_4)_{a4}-*'$은 단일결합이고, a21가 0일 경우 $*-(L_{21})_{a21}-*'$은 단일결합이고, a22가 0일 경우 $*-(L_{22})_{a22}-*'$은 단일결합이고,

[0031] R_1 내지 R_3, R_{11} 내지 R_{13}, R_{52} 내지 R_{55} 및 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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_2-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-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 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$, $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$, $-S(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-S(=O)_2(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아니고,

[0032] b1 내지 b3, b11 내지 b13, 및 b21 내지 b22는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0033] b1이 2 이상일 경우 2 이상의 R_1은 서로 동일하거나 상이하고, b2가 2 이상일 경우 2 이상의 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, b3가 2 이상일 경우 2 이상의 R_3는 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, b13이 2 이상일

경우 2 이상의 R_{13}는 서로 동일하거나 상이하고, b21이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{21}은 서로 동일하거나 상이하고, b22가 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{22}는 서로 동일하거나 상이하고,

[0034] c1 내지 c3는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0035] c4 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0036] 상기 치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹, 치환된 C_2-C_{60}헤테로시클릭 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 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0037] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 및 C_1-C_{60}알콕시기;

[0038] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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;

[0039] 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, 비페닐기 및 터페닐기;

[0040] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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, 비페닐기, 터페닐기, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$ 및 $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10}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, 비페닐기 및 터페닐기; 및

[0041] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$;

[0042] 중에서 선택되고,

[0043] 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, 아미노기, 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}알킬기로 치환된 C_6-C_{60}아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

[0044] * 및 *'는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0045] 다른 측면에 따르면, 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물

을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0046] 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있는 바, 고품질의 유기 발광 소자 및 유기 발광 장치의 구현이 가능하다.

도면의 간단한 설명

[0047] 도 1 내지 4는 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 각각 나타낸 도면이다.

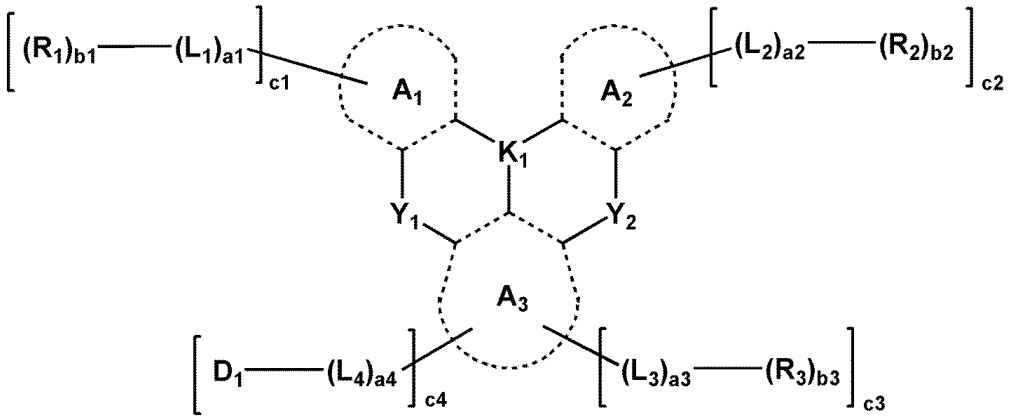
도 5는 일 구현예를 따르는 화합물 4, 화합물 7, 화합물 A 및 화합물 B에 대한 광 발광을 나타낸 도면이다.

도 6은 일 구현예를 따르는 (a) 화합물 4 및 화합물 7, 및 (b) 화합물 A 및 화합물 B에 대한 지연 형광 특성을 나타낸 도면이다.

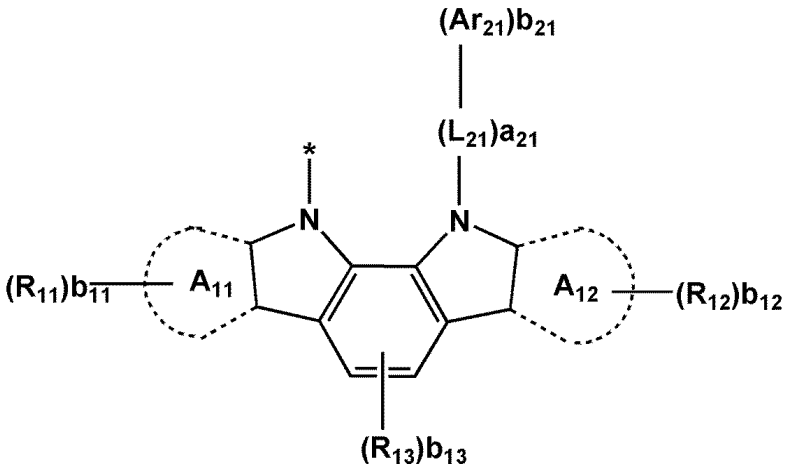
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0048] 상기 헤테로시클릭 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

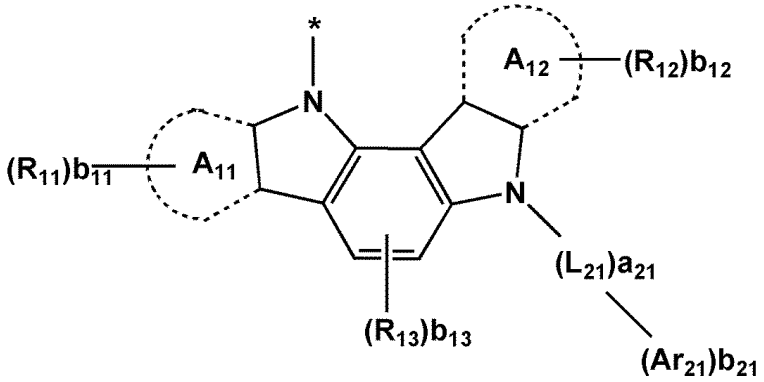
[0049] <화학식 1>

[0050] 

[0051] <화학식 2A>

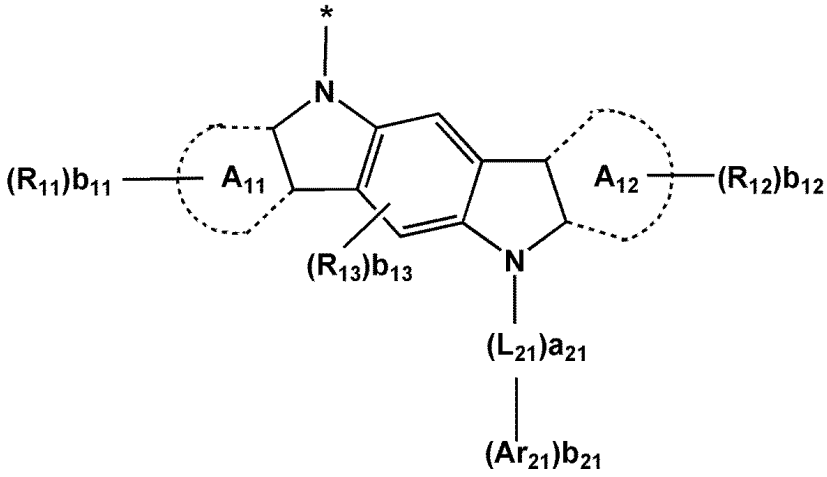
[0052] 

[0053] <화학식 2B>



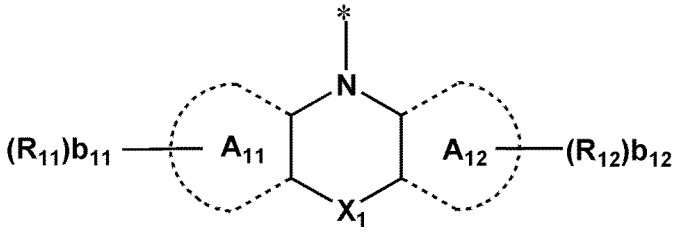
[0054]

[0055] <화학식 2C>



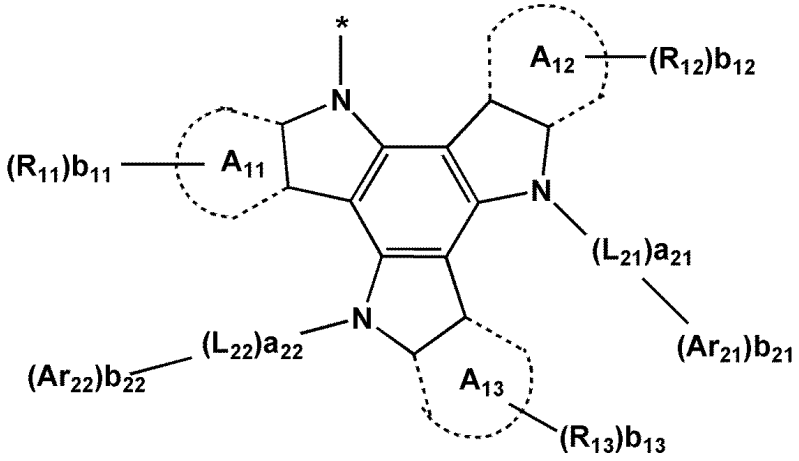
[0056]

[0057] <화학식 2D>



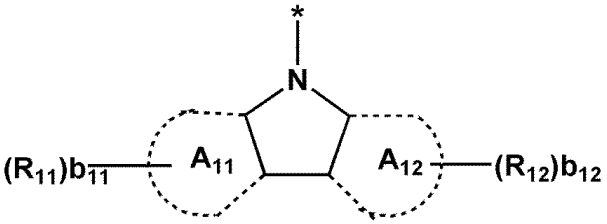
[0058]

[0059] <화학식 2E>



[0060]

[0061] <화학식 2F>



[0062]

[0063] 상기 화학식 1 중, D_1은 화학식 2A 내지 화학식 2F 중에서 선택된다.

[0064] 상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중, 고리 A_1 내지 A_3 및 A_{11} 내지 A_{13}은 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 또는 C_2-C_{60}헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0065] 일 구현예에 따르면, 상기 고리 A_1 내지 A_3 및 A_{11} 내지 A_{13}은 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 피롤 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0066] 다른 구현예에 있어서, 상기 고리 A_1 내지 A_3 및 A_{11} 내지 A_{13}은 서로 독립적으로, 벤젠 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0067] 상기 화학식 1 중, K_1은 B, Al, Ga, P, P=O, 또는 P=S일 수 있다. 예를 들어, K_1은 B일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0068] 상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중, L_1 내지 L_4, L_{21} 및 L_{22}는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

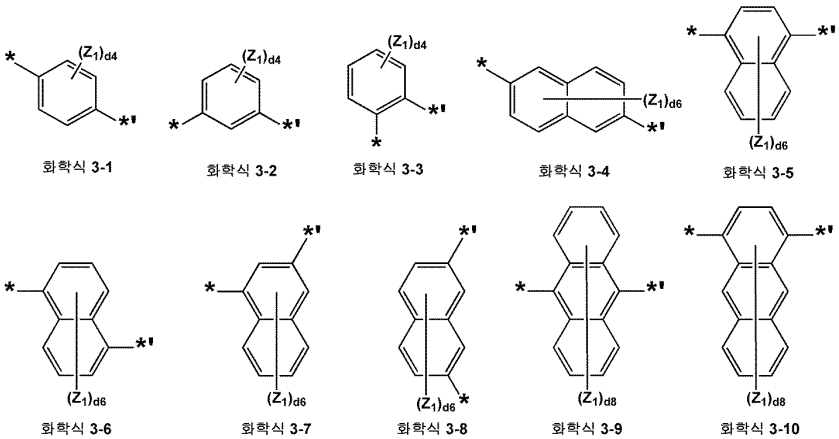
[0069] 일 구현예에 따르면, L_1 내지 L_4, L_{21} 및 L_{22}는 서로 독립적으로, 페닐렌(phenylene)기, 펜탈레닐렌(pentalenylene)기, 인데닐렌(indenylene)기, 나프틸렌(naphthylene)기, 아줄레닐렌(azulenylene)기, 헵탈레닐렌(heptalenylene)기, 인다세닐렌(indacenylene)기, 아세나프틸렌(acenaphthylene)기, 플루오레닐렌(fluorenylene)기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌(phenalenylene)기, 페난트레닐렌(phenanthrenylene)기, 안트라세닐렌(anthracenylene)기, 플루오란테닐렌(fluoranthenylene)기, 트리페닐레닐렌(triphenylenylene)기, 파이레닐렌(pyrenylene)기, 크라이세닐렌(chrysenylene)기, 나프타세닐렌(naphthacenylene)기, 피세닐렌(picenylene)기, 페릴레닐렌(perylenylene)기, 펜타페닐렌(pentaphenylene)기, 헥사세닐렌(hexacenylene)기, 펜타세닐렌(pentacenylene)기, 루비세닐렌(rubicenylene)기, 코로네닐렌(coronenylene)기, 오발레닐렌(ovalenylene)기, 피롤일렌(pyrrolylene)기, 티오페닐렌(thiophenylene)기, 퓨라닐렌(furanylene)기, 이미다졸일렌(imidazolylene)기, 피라졸일렌(pyrazolylene)기, 티아졸일렌(thiazolylene)기, 이소티아졸일렌(isothiazolylene)기, 옥사졸일렌(oxazolylene)기, 이속사졸일렌(isooxazolylene)기, 피리디닐렌(pyridinylene)기, 피라지닐렌(pyrazinylene)기, 피리미디닐렌(pyrimidinylene)기, 피리다지닐렌(pyridazinylene)기, 이소인돌일렌(isoindolylene)기, 인돌일렌(indolylene)기, 인다졸일렌(indazolylene)기, 푸리닐렌(purinylene)기, 퀴놀리닐렌(quinolinylene)기, 이소퀴놀리닐렌(isoquinolinylene)기, 벤조퀴놀리닐렌(benzoquinolinylene)기, 프탈라지닐렌(phthalazinylene)기, 나프티리디닐렌(naphthyridinylene)기, 퀴녹살리닐렌(quinoxalinylene)기, 퀴나졸리닐렌(quinazolinylene)기, 시놀리닐렌(cinnolinylene)기, 카바졸일렌(carbazolylene)기, 페난트리디닐렌(phenanthridinylene)기, 아크리디닐렌(acridinylene)기, 페난트롤리닐렌(phenanthrolinylene)기, 페나지닐렌(phenazinylene)기, 벤조이미다졸일렌(benzoimidazolylene)기, 벤조퓨라닐렌(benzofuranylene)기, 벤조티오페

닐렌(benzothiophenylene)기, 이소벤조티아졸일렌(isobenzothiazolylene)기, 벤조옥사졸일렌(benzooxazolylene)기, 이소벤조옥사졸일렌(isobenzooxazolylene)기, 트리아졸일렌(triazolylene)기, 테트라졸일렌(tetrazolylene)기, 옥사디아졸일렌(oxadiazolylene)기, 트리아지닐렌(triazinylene)기, 디벤조퓨라닐렌(dibenzofuranylene)기, 디벤조티오페닐렌(dibenzothiophenylene)기, 벤조카바졸일렌기 및 디벤조카바졸일렌기; 및

[0070] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일렌기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0071] 다른 구현예에 따르면, 상기 L_1 내지 L_4, L_{21} 및 L_{22}는 서로 독립적으로 하기 화학식 3-1 내지 3-22 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

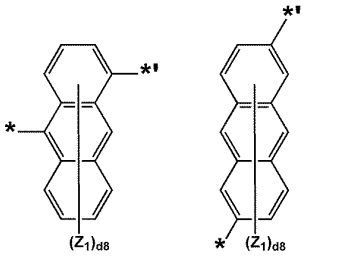
[0072]



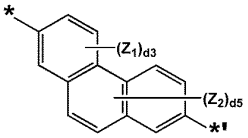
화학식 3-1 화학식 3-2 화학식 3-3 화학식 3-4 화학식 3-5

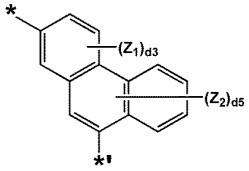
화학식 3-6 화학식 3-7 화학식 3-8 화학식 3-9 화학식 3-10

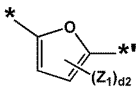
[0073]

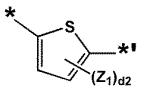

화학식 3-11

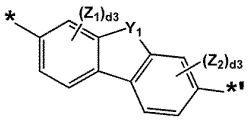
화학식 3-12

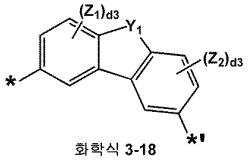

화학식 3-13


화학식 3-14

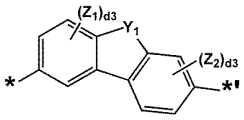

화학식 3-15

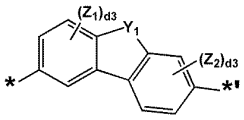

화학식 3-16

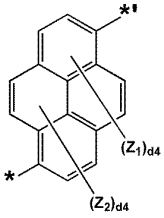

화학식 3-17

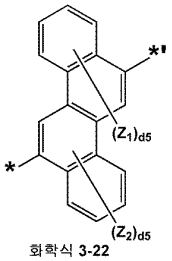

화학식 3-18

[0074]


화학식 3-19


화학식 3-20


화학식 3-21


화학식 3-22

[0075] 상기 화학식 3-1 내지 3-22 중,

[0076] Y_1은 O, S, $C(Z_3)(Z_4)$, $N(Z_5)$ 또는 $Si(Z_6)(Z_7)$이고,

[0077] Z_1 내지 Z_7은 서로 독립적으로, 수소, 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, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 벤조실롤일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 디벤조실롤일기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-비플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오페닐기, 아자디벤조실롤일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택되고,

[0078] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33}은 서로 독립적으로,

[0079] C_1-C_{10}알킬기, C_1-C_{10}알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기 및 퀴나졸리닐기; 및

[0080] C_1-C_{10}알킬기, C_1-C_{10}알콕시기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기 및 퀴나졸리닐기;

[0081] 중에서 선택되고,

[0082] 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,

[0083] * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0084] 상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중, a1 내지 a4, a21 및 a22는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택될 수 있다. a1은 L_1의 개수를 나타낸 것으로, a1이 2 이상일 경우 2 이상의 L_1은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. a1 내지 a4, a21 및 a22에 대한 설명은 상기 a1에 대한 설명을 참조하여 이해될 수 있다.

[0085] a1이 0일 경우 *-$(L_1)_{a1}$-*'은 단일결합이고, a2가 0일 경우 *-$(L_2)_{a2}$-*'는 단일결합이고, a3가 0일 경우 *-$(L_3)_{a3}$-*'는 단일결합이고, a4가 0일 경우 *-$(L_4)_{a4}$-*'은 단일결합이고, a21가 0일 경우 *-$(L_{21})_{a21}$-*'은 단일결합이고, a22가 0일 경우 *-$(L_{22})_{a22}$-*'은 단일결합이다.

[0086] 일 구현예에 따르면, 상기 a1 내지 a4, a21 및 a22는 서로 독립적으로 0 또는 1일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0087] 상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중, R_1 내지 R_3, R_{11} 내지 R_{13}, R_{52} 내지 R_{55} 및 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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_2-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-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 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$, $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$, $-S(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-S(=O)_2(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아닐 수 있다.

[0088] 여기서, Q_1 내지 Q_3에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0089] 일 구현예에 따르면, 상기 R_1 내지 R_3, R_{11} 내지 R_{13}, R_{52} 내지 R_{55} 및 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 서로 독립적으로

[0090] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_2-C_{20}알케닐기, C_2-C_{20}알키닐기 및 C_1-C_{20}알콕시기;

[0091] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20}알킬기, C_2-C_{20}알케닐기, C_2-C_{20}알키닐기 및 C_1-C_{20}알콕시기;

[0092] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0093] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_2-C_{20}알케닐기, C_2-C_{20}알키닐기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0094] $-B(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$ 및 $-C(=O)(Q_1)$; 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아닐 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

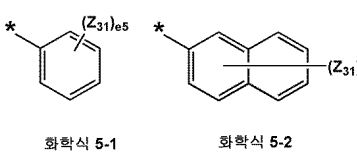
[0095] 여기서, Q_1 내지 Q_3 및 Q_{31} 내지 Q_{33}에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0096] 다른 구현예에 따르면, 상기 R_1 내지 R_3, R_{11} 내지 R_{13}, R_{52} 내지 R_{55} 및 Ar_{21} 내지 Ar_{22}는 서로 독립적으로

[0097] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, 헥실기 및

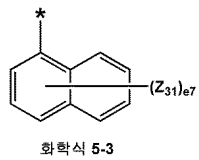
[0098] 하기 화학식 5-1 내지 5-12으로 표시된 그룹 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아닐 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0099]

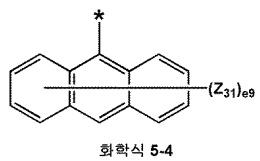


화학식 5-1

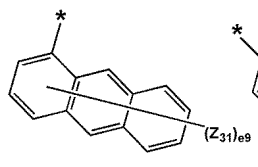
화학식 5-2



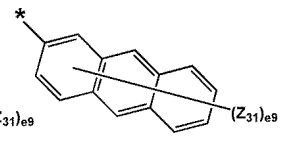
화학식 5-3



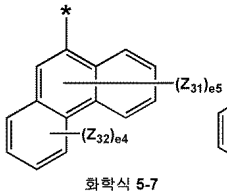
화학식 5-4



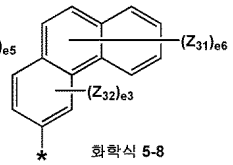
화학식 5-5



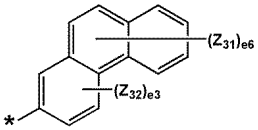
화학식 5-6



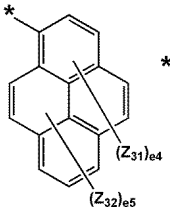
화학식 5-7



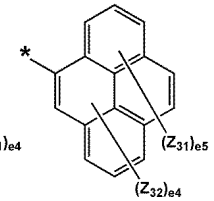
화학식 5-8



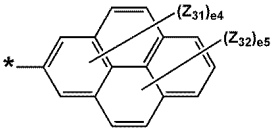
화학식 5-9



화학식 5-10



화학식 5-11



화학식 5-12

[0100] 상기 화학식 5-1 내지 5-12 중

[0101] Z_{31} 내지 Z_{34}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택되고,

[0102] e2는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고, e3는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, e4는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, e5는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고, e6는 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고, e7은 0 내지 7의 정수 중에서 선택되고, e9은 0 내지 9의 정수 중에서 선택되고,

[0103] *는 이웃한 원자와의 결합사이트이다.

[0104] 다른 구현예에 따르면, 상기 R_1 및 R_2는 ter-부틸기일 수 있거나, 상기 Ar_{21} 및 Ar_{22}는 페닐기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0105] 상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중, b1 내지 b3, b11 내지 b13, 및 b21 내지 b22는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있다. b1이 2 이상일 경우 2 이상의 R_1은 서로 동일하거나 상이하고, b2가 2 이상일 경우 2 이상의 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, b3가 2 이상일 경우 2 이상의 R_3는 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, b13이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{13}는 서로 동일하거나 상이하고, b21이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{21}은 서로 동일하거나 상이하고, b22가 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{22}는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

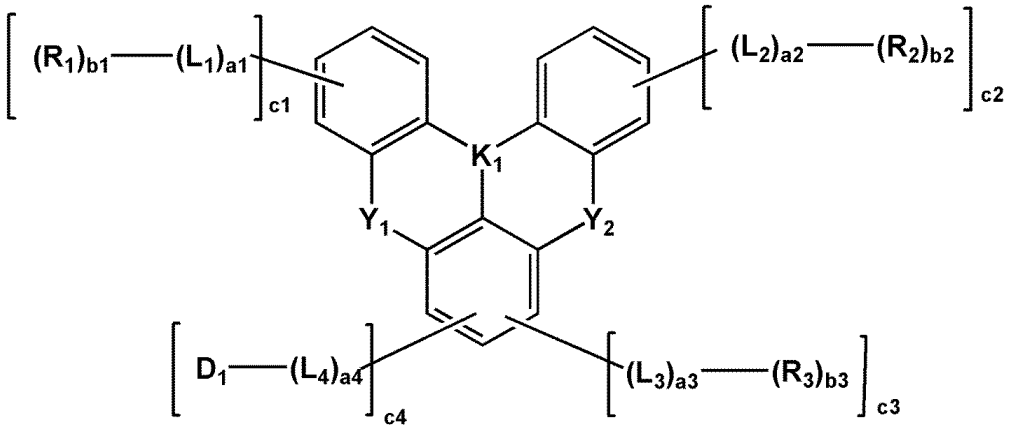
[0106] 일 구현예에 따르면, 상기 b1 내지 b3, b11 내지 b13, 및 b21 내지 b22는 서로 독립적으로 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0107] 상기 화학식 1 및 화학식 2A 내지 화학식 2F 중, c1 내지 c3는 0 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있고, c4 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0108] 일 구현예에 따르면, 상기 c1 및 c2는 서로 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4이고, 상기 c3는 0, 1 또는 2이고, 상기 c4는 1, 2 또는 3일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0109] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시된 화합물은 하기 화학식 1-1로 표시된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0110] <화학식 1-1>

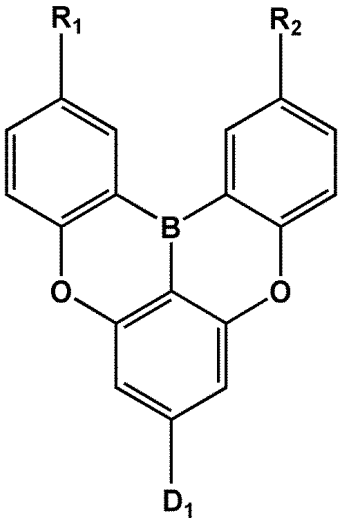
[0111] 

[0112] 상기 화학식 1-1 중, K_1, Y_1 및 Y_2, D_1, L_1 내지 L_4, a1 내지 a4, R_1 내지 R_3, b1 내지 b3, 및 c1 내지 c4에 대한

정의는 상기 화학식 1에 설명된 바와 같다.

[0113] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시된 화합물은 하기 화학식 1-2로 표시된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

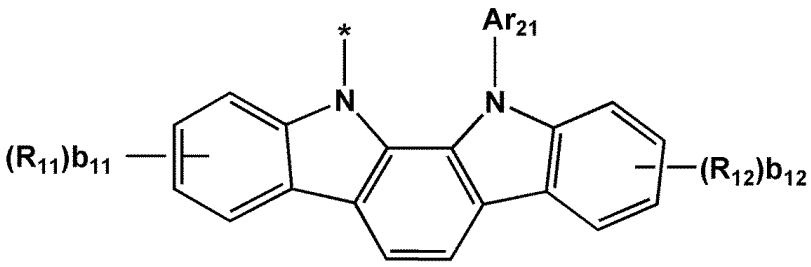
[0114] <화학식 1-2>

[0115] 

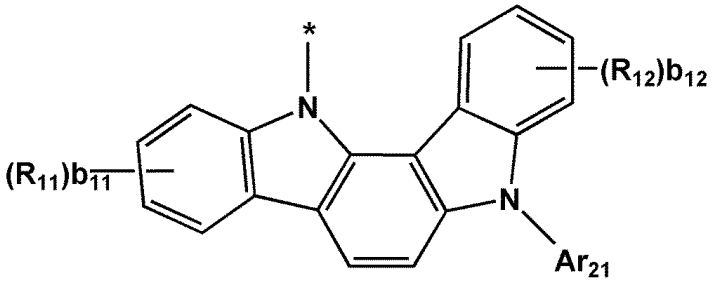
[0116] 상기 화학식 1-2 중, D_1, R_1 및 R_2에 대한 정의는 상기 화학식 1에 설명된 바와 같다.

[0117] 일 구현예에 따르면, 상기 D1은 하기 화학식 2A-1 내지 2L-1 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

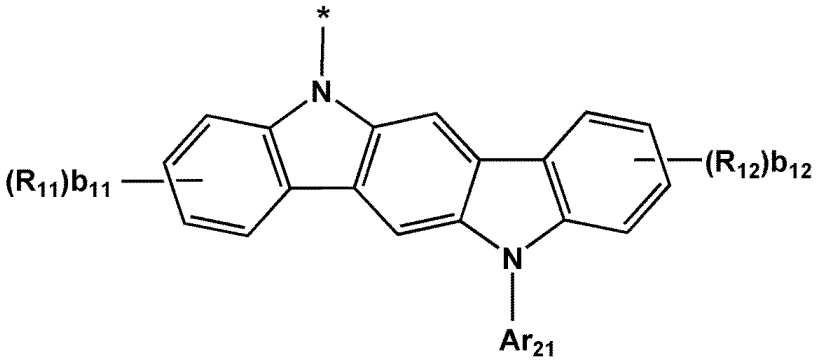
[0118] <화학식 2A-1>

[0119] 

[0120] <화학식 2B-1>

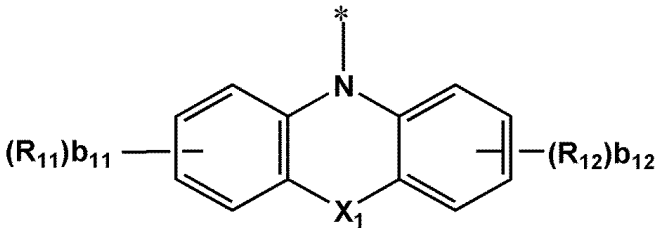
[0121] 

[0122] <화학식 2C-1>



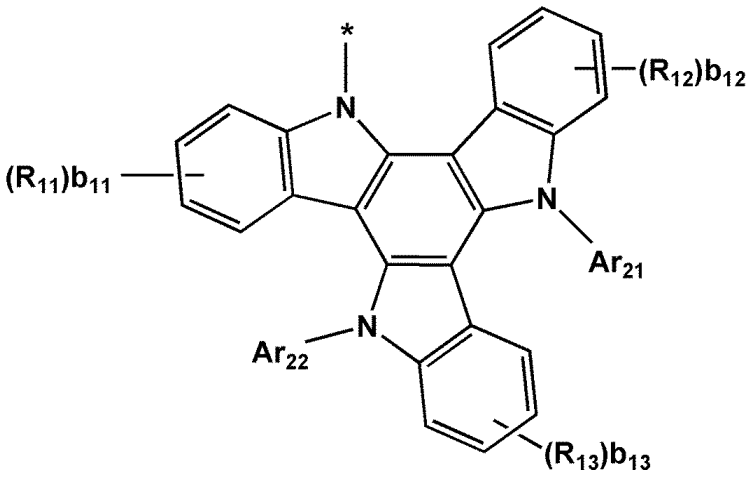
[0123]

[0124] <화학식 2D-1>



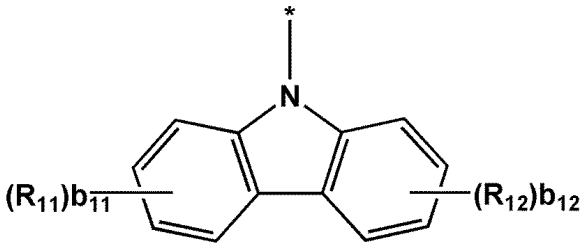
[0125]

[0126] <화학식 2E-1>



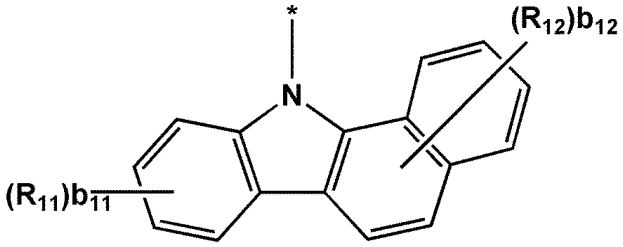
[0127]

[0128] <화학식 2F-1>



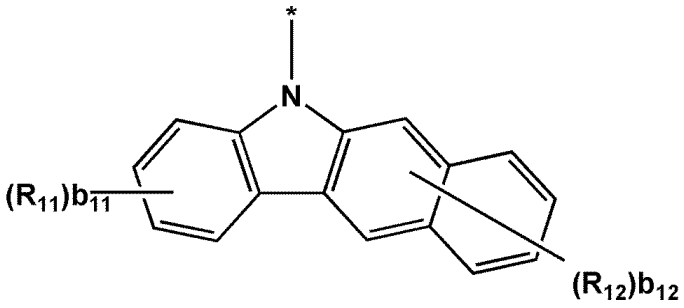
[0129]

[0130] <화학식 2G-1>



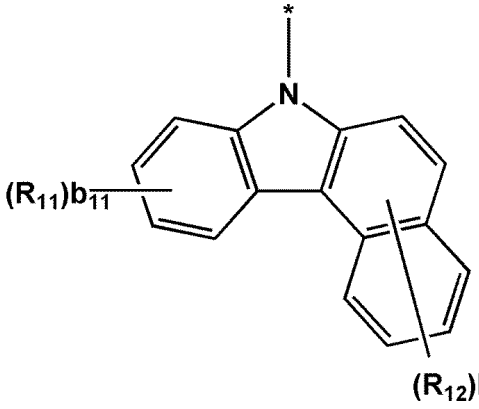
[0131]

[0132] <화학식 2H-1>



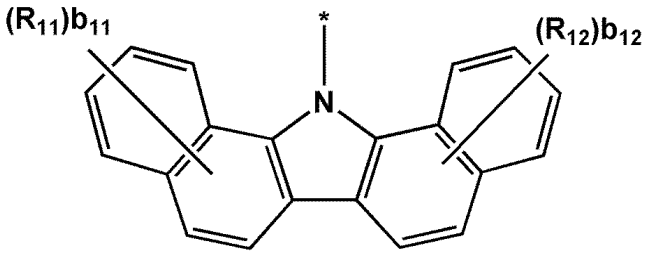
[0133]

[0134] <화학식 2I-1>



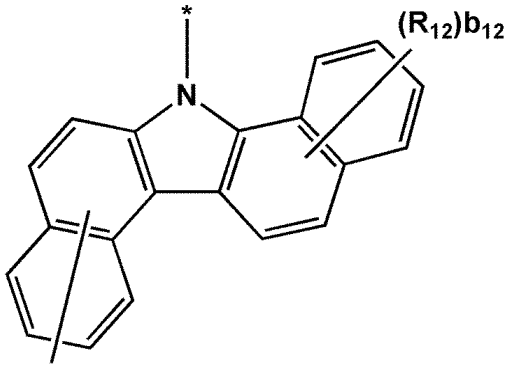
[0135]

[0136] <화학식 2J-1>



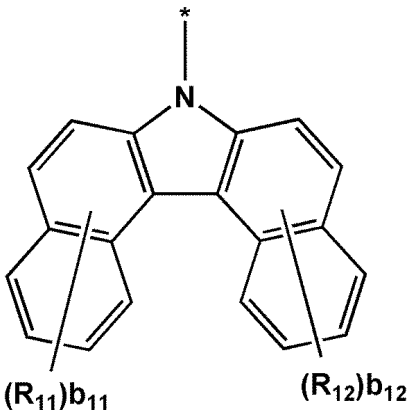
[0137]

[0138] <화학식 2K-1>



[0139]

[0140] <화학식 2L-1>



[0141]

[0142] 상기 화학식 2A-1 내지 2L-1 중,

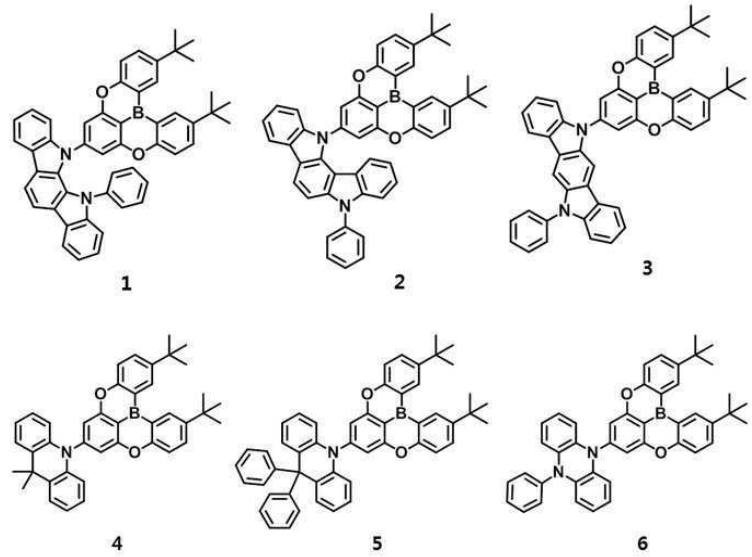
[0143] X_1은 $C(R_{53})(R_{54})$ 또는 $N(R_{55})$이고,

[0144] R_{11} 내지 R_{13}, R_{53} 내지 R_{55}, Ar_{21} 및 Ar_{22}는 수소, 중수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택되되, 단, 화학식 2F-1에서 R_{11} 및 R_{12} 중 적어도 하나는 수소가 아니며,

[0145] b11 내지 b13은 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0146] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 하기 화합물 1 내지 13 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0147]



[0148] .

[0149] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 붕소를 포함하는 전자 수용체(electron acceptor)에 상기 화학식 2A 내지 2F 중에서 선택된 전자 공여체(electron donor)가 입체장애를 가지며 서로 연결된 구조를 갖는다. 이러한 화합물은 내부 전하 이동(internal charge transfer)에 의해 지연 형광 특성을 나타내며, 특히 본 발명의 화합물은 반치폭이 좁고, 효율 및 최대 발광휘도가 높으며, 발광파장 및 엑시톤 수명이 짧은 등의 우수한 발광 재료 특성을 나타낸다. 또한 본 발명의 화합물은 삼중항 에너지가 높아 청색 발광물질의 호스트로도 사용될 수 있다.

[0150] 따라서, 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함하는 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는, 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있다.

[0151] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.

[0152] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용

될 수 있다. 예를 들어, 상기 헤테로시클릭 화합물은 정공 수송 영역, 전자 수송 영역 및 발광층 중 적어도 하나에 포함될 수 있다. 또는, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극의 외측에 위치한 캡핑층 재료로 사용될 수 있다.

[0153] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 1 종 이상 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

[0154] 본 명세서 중 "(유기층)이 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층)이 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 헤테로시클릭 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0155] 예를 들어, 상기 유기층은, 상기 헤테로시클릭 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 헤테로시클릭 화합물로서, 상기 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 발광층에 존재하고 상기 화합물 2는 전자 수송층에 존재할 수 있음)할 수 있다.

[0156] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 애노드이고, 상기 유기 발광 소자의 제2전극이 캐소드이고, 상기 유기층이 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 배치된 전자 수송 영역을 더 포함하고, 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 제1 정공 수송층, 제2 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고, 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0157] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층에 상기 헤테로시클릭 화합물이 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 헤테로시클릭 화합물이 도펀트이고, 상기 발광층이 호스트를 더 포함할 수 있다.

[0158] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층에 포함된 상기 헤테로시클릭 화합물은 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고, 상기 발광층이 지연 형광을 방출할 수 있다.

[0159] 일 구현예에 따르면, 상기 헤테로시클릭 화합물은 호스트일 수 있다. 예를 들어, 인광 도펀트 또는 형광 도펀트의 호스트로서 사용될 수 있다.

[0160] 상기 발광층은 상기 헤테로시클릭 화합물 외에 스티릴계 화합물, 안트라센계 화합물, 파이렌계 화합물 및 스파이로-바이플루오렌계 화합물 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.

[0161] 일 구현예에 따르면, 상기 정공 수송 영역이 전하-생성 물질을 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 정공 수송 영역이 p-도펀트를 포함하고, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다. 예를 들어, 상기 p-도펀트는 퀴논 유도체를 포함할 수 있다.

[0162] 일 구현예에 따르면, 상기 전자 수송 영역이 트리아졸-함유 화합물 또는 벤조트리아졸-함유 화합물을 포함하고, 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이들 중 임의의 조합을 더 포함할 수 있다.

[0163] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1 전극과 제2 전극 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(SnO_2), 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, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 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] 예를 들어, 상기 유기층(150)이 상기 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

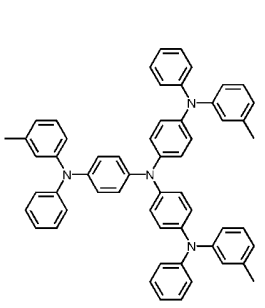
[0176] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]

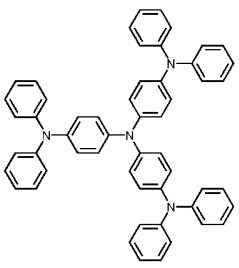
[0177] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

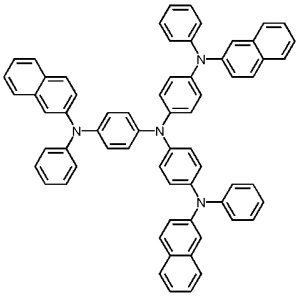
[0178] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 제1 정공 수송층(HTL), 제2 정공 수송층, 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.

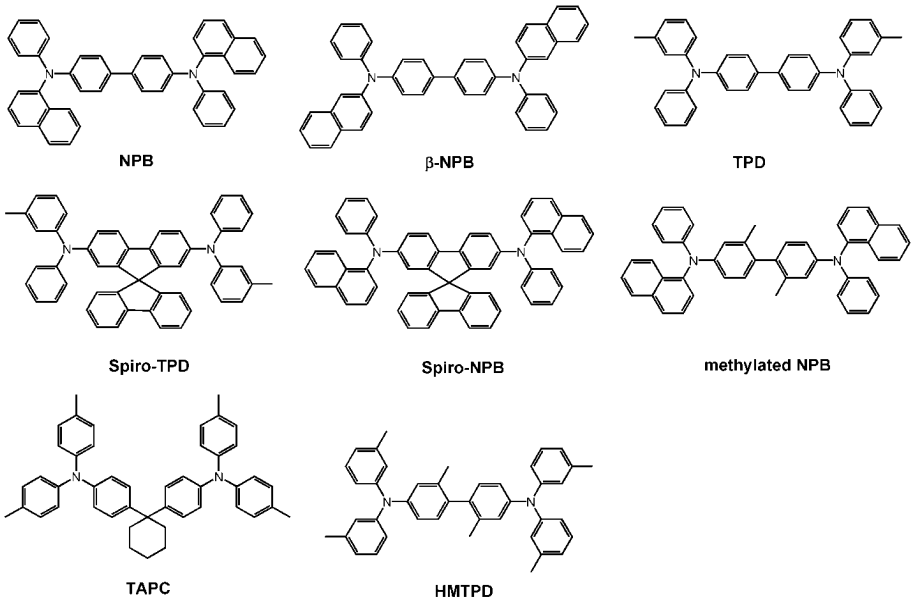
[0179] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조를 갖거나, 제1전극(110)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/발광 보조층, 정공 주입층/발광 보조층, 정공 수송층/발광 보조층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 다층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0180] 또한, 상기 정공 수송 영역은, 상기 화학식 1로 표시되는 디아민계 화합물 외에 m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine (4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐린/도데실벤젠술폰산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트))), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캠퍼술폰산)), 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:

[0181] 
m-MTDATA

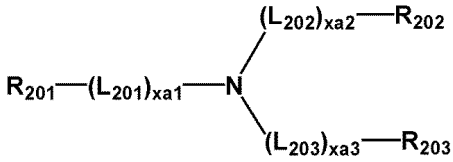

TDATA


2-TNATA



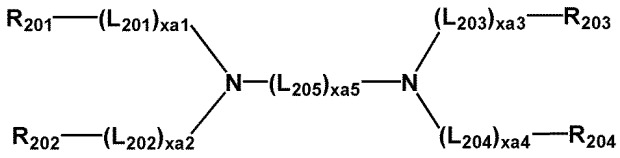
[0182]

[0183] <화학식 201>



[0184]

[0185] <화학식 202>



[0186]

[0187] 상기 화학식 201 및 202 중,

[0188] 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,

[0189] 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,

[0190] xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0191] xa5는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0192] 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 비치환

된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0193] 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.

[0194] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,

[0195] L_{201} 내지 L_{205}는 서로 독립적으로,

[0196] 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, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기; 및

[0197] 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, 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, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 및 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 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, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;

[0198] 중에서 선택되고,

[0199] 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.

[0200] 다른 구현예에 따르면, xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0201] 또 다른 구현예에 따르면, xa5는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.

[0202] 또 다른 구현예에 따르면, R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201}은 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, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및

[0203] 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, 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, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 및 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 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, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;

[0204] 중에서 선택될 수 있고,

[0205] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33}에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0206] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R_{201} 내지 R_{203} 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,

[0207] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및

[0208] 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 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;

[0209] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0210] 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.

[0211] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R_{201} 내지 R_{204} 중 적어도 하나는,

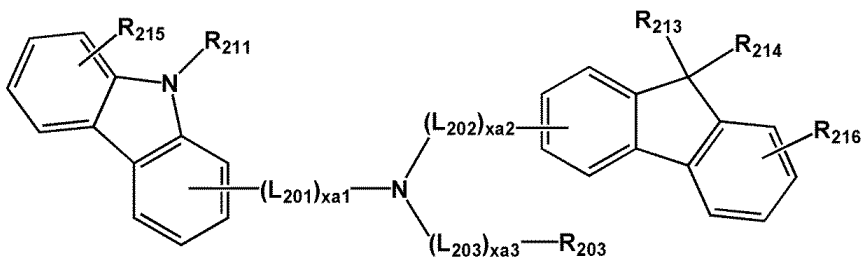
[0212] 카바졸일기; 및

[0213] 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 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;

[0214] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

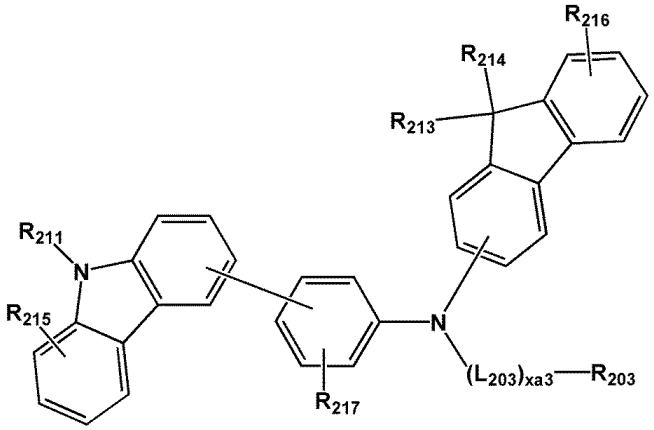
[0215] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:

[0216] <화학식 201A>

[0217] 

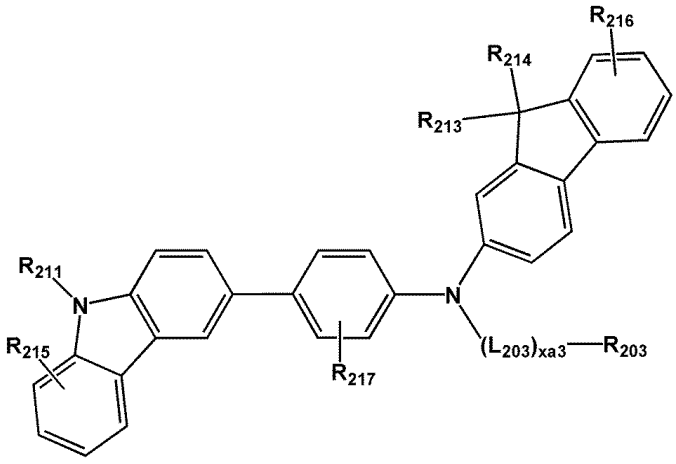
[0218] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0219] <화학식 201A(1)>

[0220] 

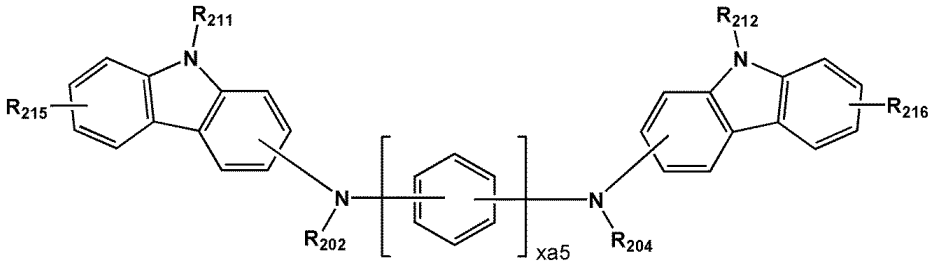
[0221] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0222] <화학식 201A-1>

[0223] 

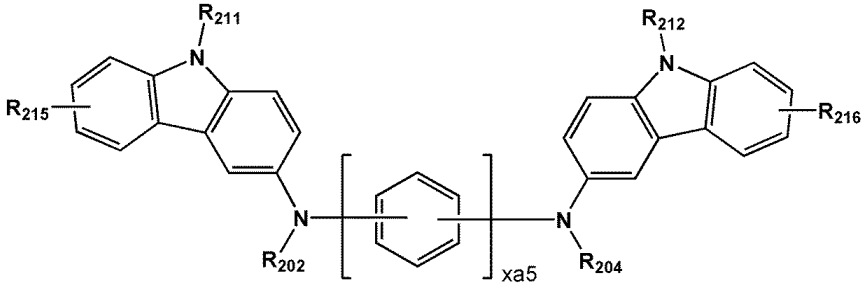
[0224] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

[0225] <화학식 202A>

[0226] 

[0227] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0228] <화학식 202A-1>



[0229]

[0230] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

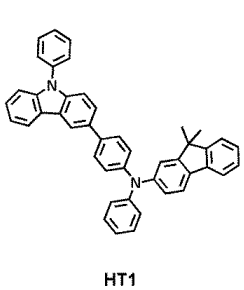
[0231] L_{201} 내지 L_{203}, xa1 내지 xa3, xa5 및 R_{202} 내지 R_{204}에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

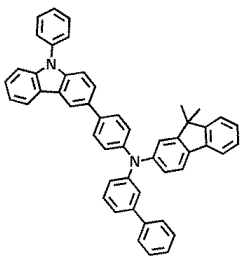
[0232] R_{211} 및 R_{212}에 대한 설명은 본 명세서 중 R_{203}에 대한 설명을 참조하고,

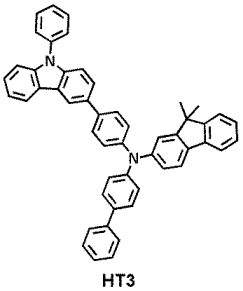
[0233] R_{213} 내지 R_{217}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1-C_{10}알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

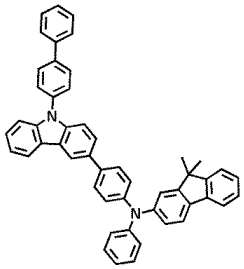
[0234] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

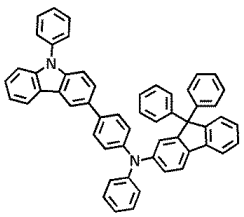
[0235]

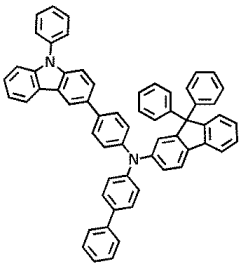

HT1


HT2

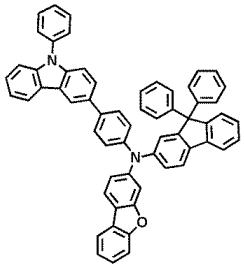

HT3


HT4

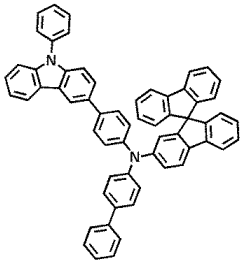

HT5


HT6

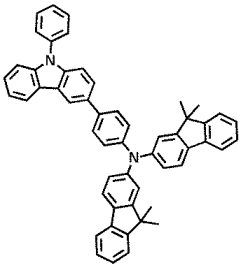
[0236]



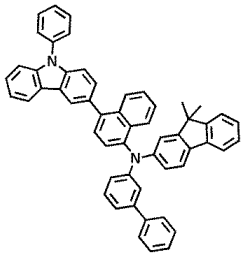
HT7



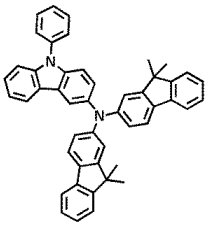
HT8



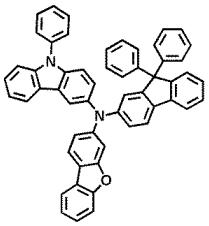
HT9



HT10

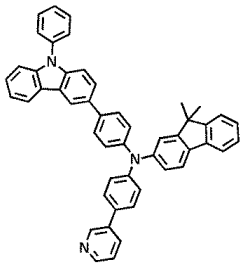


HT11

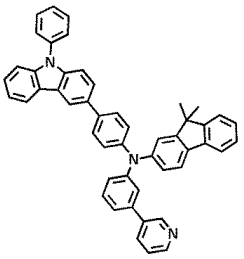


HT12

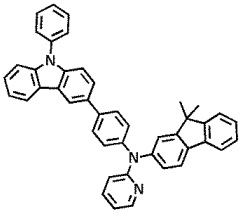
[0237]



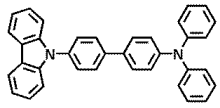
HT13



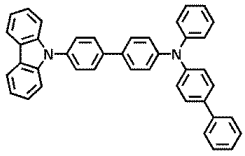
HT14



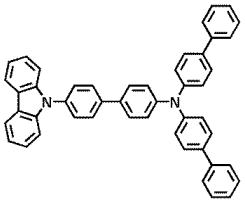
HT15



HT16

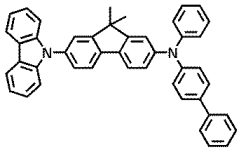


HT17

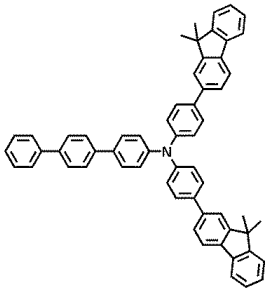


HT18

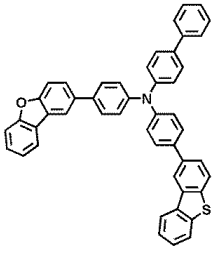
[0238]



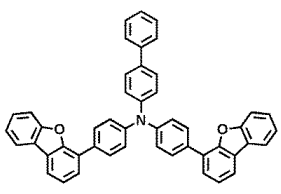
HT19



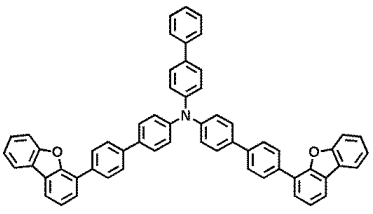
HT20



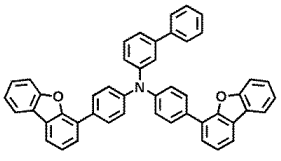
HT21



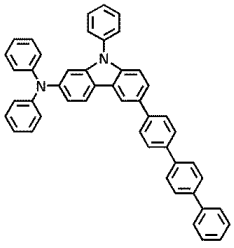
HT22



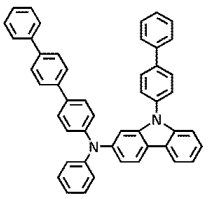
HT23



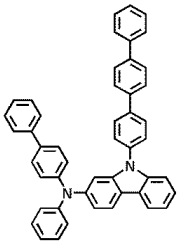
HT24



HT25

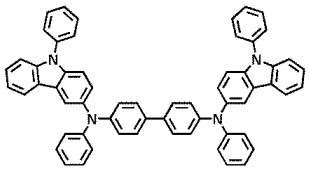


HT26

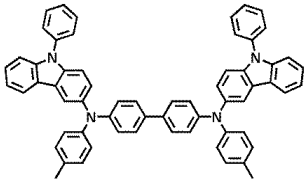


HT27

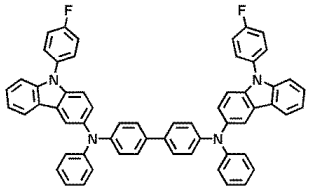
[0239]



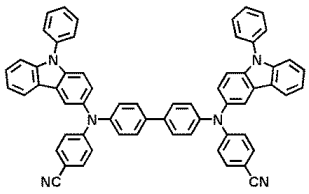
HT28



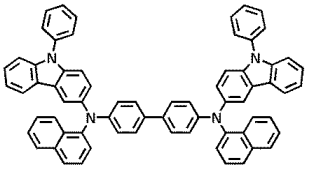
HT29



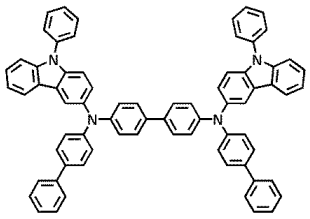
HT30



HT31

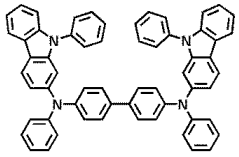


HT32

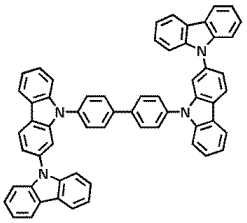


HT33

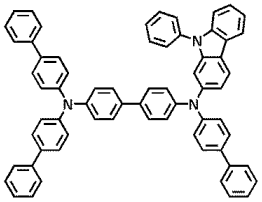
[0240]



HT34

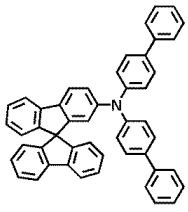


HT35

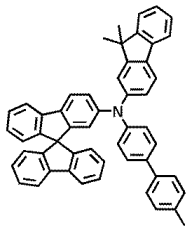


HT36

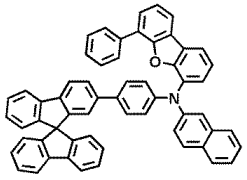
[0241]



HT37



HT38



HT39

[0242] 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.

[0243] 예를 들어, 일 구현예에 있어서, 상기 1 정공 수송층 또는 제2 정공 수송층의 두께는 200 Å 내지 400 Å일 수 있다.

[0244] 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.

[0245] 상기 발광 보조층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가

시키는 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.

[0246] [p-도펀트]

[0247] 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.

[0248] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0249] 일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다.

[0250] 상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0251] 예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0252] TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체;

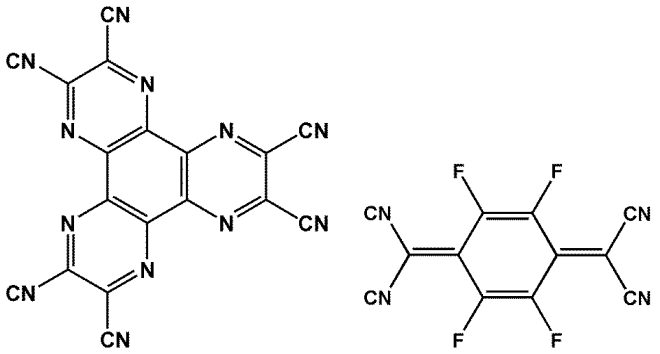
[0253] 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

[0254] HAT-CN (1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및

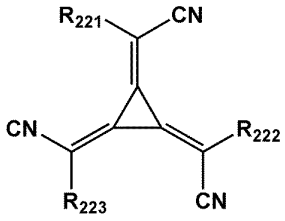
[0255] 하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

[0256] 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0257] <HAT-CN> <F4-TCNQ>

[0258] 

[0259] <화학식 221>

[0260] 

[0261] 상기 화학식 221 중,

[0262] 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 선택되되, 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.

[0263] [유기층(150) 중 발광층]

[0264] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 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.

[0265] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 발광층에 상기 헤테로시클릭 화합물이 도펀트이고, 상기 발광층이 호스트를 더 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0266] 일구현예에 따르면, 상기 발광층에 포함된 상기 헤테로시클릭 화합물이 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고, 상기 발광층이 지연 형광을 방출할 수 있다.

[0267] 일 구현예에 따르면, 상기 헤테로시클릭 화합물은 호스트일 수 있다. 예를 들어, 인광 도펀트 또는 형광 도펀트의 호스트로서 사용될 수 있다.

[0268] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 30 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0269] 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.

[0270] [발광층 중 호스트]

[0271] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0272] <화학식 301>

[0273] $[Ar_{301}]_{xb11}-[(L_{301})_{xb1}-R_{301}]_{xb21}$

[0274] 상기 화학식 301 중,

[0275] Ar_{301}은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로시클릭 그룹이고,

[0276] xb11은 1, 2 또는 3이고,

[0277] 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,

[0278] xb1는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0279] 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,

[0280] xb21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0281] Q_{301} 내지 Q_{303}는 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.

[0282] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar_{301}은,

[0283] 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 및 디벤조티오펜 그룹; 및

[0284] 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, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;

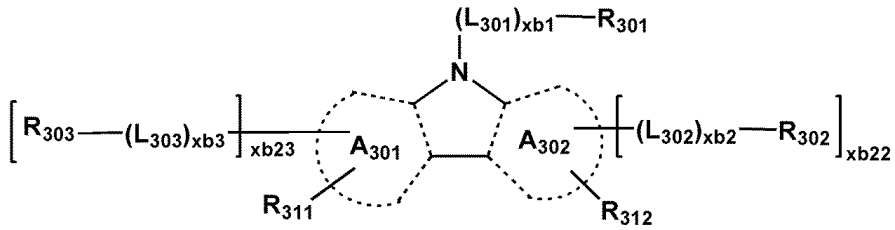
[0285] 중에서 선택되고,

[0286] 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.

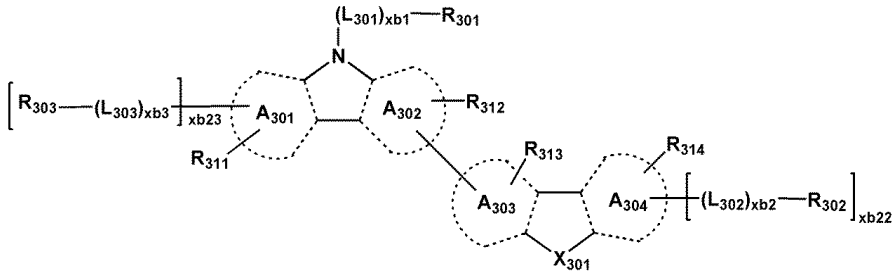
[0287] 상기 화학식 301 중 xb11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{301}은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0288] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0289] <화학식 301-1>

[0290] 

[0291] <화학식 301-2>

[0292] 

[0293] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0294] A_{301} 내지 A_{304}는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 피리딘, 피리미딘, 인덴, 플루오렌, 스파이로-비플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 인돌, 카바졸, 벤조카바졸, 디벤조카바졸, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 나프토퓨란, 벤조나프토퓨란, 디나프토퓨란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 나프토티오펜, 벤조나프토티오펜 및 디나프토티오펜 중에서 선택되고,

[0295] X_{301}은 O, S 또는 $N-[(L_{304})_{xb4}-R_{304}]$이고,

[0296] R_{311} 내지 R_{314}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노

기, 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 선택되고,

[0297] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0298] L_{301}, xb1, R_{301} 및 Q_{31} 내지 Q_{33}에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0299] L_{302} 내지 L_{304}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L_{301}에 대한 설명을 참조하고,

[0300] Xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,

[0301] R_{302} 내지 R_{304}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R_{301}에 대한 설명을 참조한다.

[0302] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L_{301} 내지 L_{304}는 서로 독립적으로,

[0303] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 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; 및

[0304] 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, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 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, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 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;

[0305] 중에서 선택되고,

[0306] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33}에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0307] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R_{301} 내지 R_{304}는 서로 독립적으로,

[0308] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 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

[0309] 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, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 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, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 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;

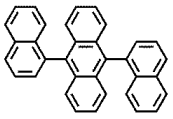
[0310] 중에서 선택되고,

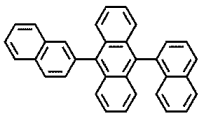
[0311] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33}에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

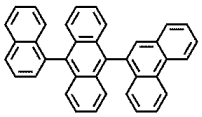
[0312] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 알칼리토 금속 착체를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 Be 착체 (예를 들면, 하기 화합물 H55), Mg 착체 및 Zn 착체 중에서 선택될 수 있다.

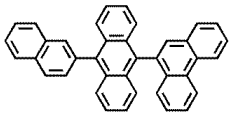
[0313] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4′-bis(N-carbazolyl)-1,1′-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

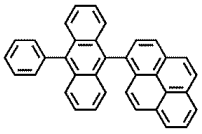
[0314]

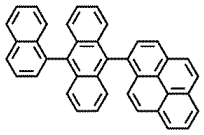

H1

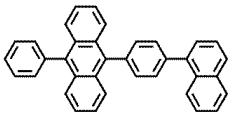

H2

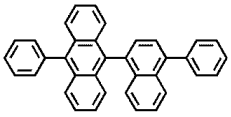

H3

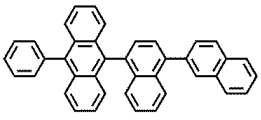

H4

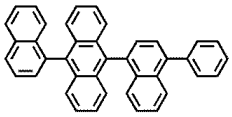

H5

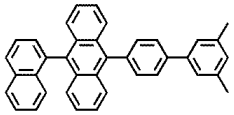

H6

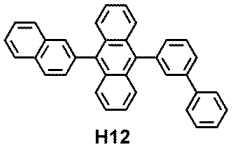

H7


H8

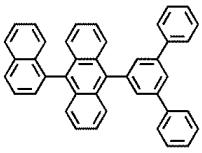

H9

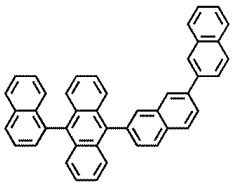

H10

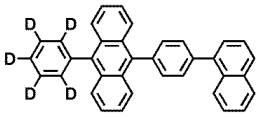

H11

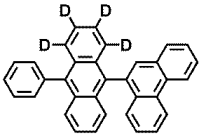

H12

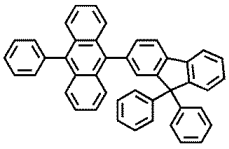
[0315]

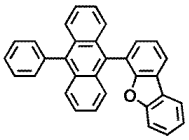

H13

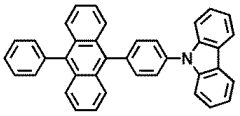

H14

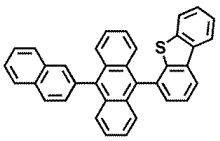

H15


H16

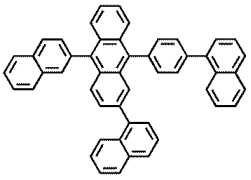

H17

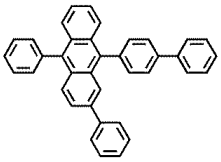

H18

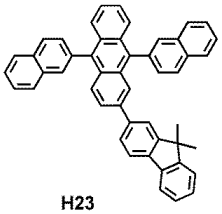

H19

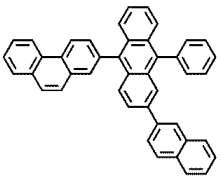

H20

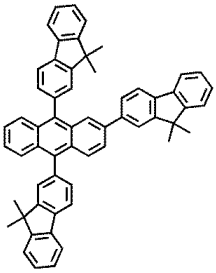
[0316]

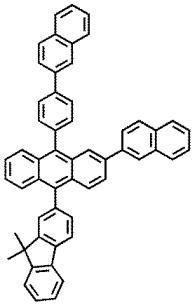

H21

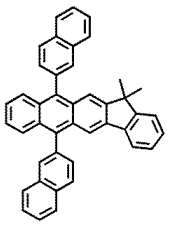

H22

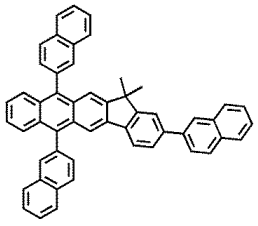

H23


H24

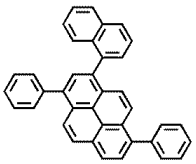

H25

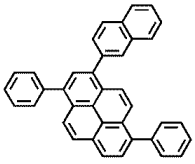

H26

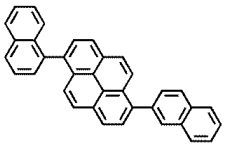

H27

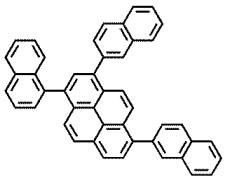

H28

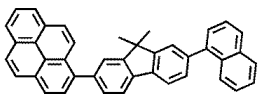
[0317]

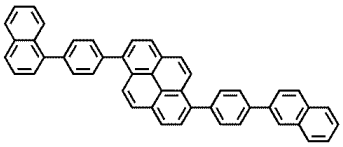

H29

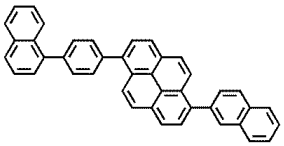

H30


H31

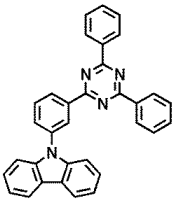

H32

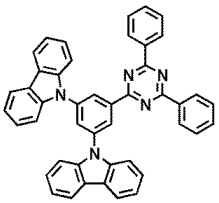

H33

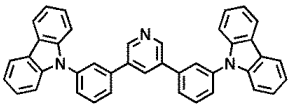

H34

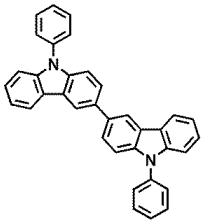

H35

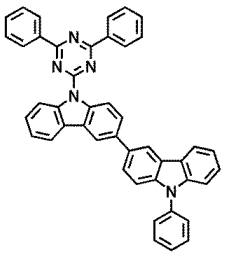
[0318]

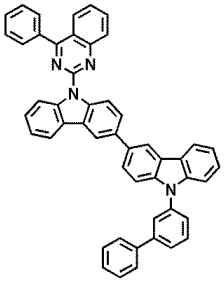

H36

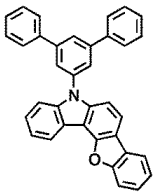

H37

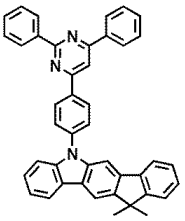

H38


H39

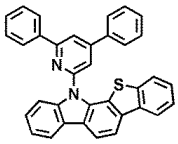

H40

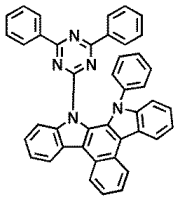

H41

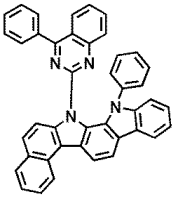

H42

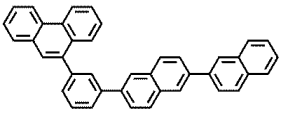

H43

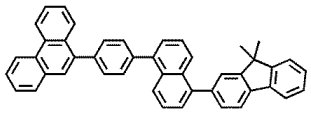
[0319]

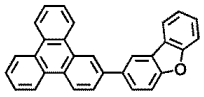

H44

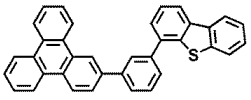

H45

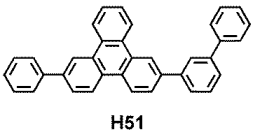

H46


H47

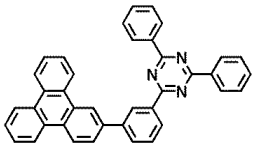

H48


H49

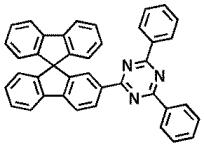

H50



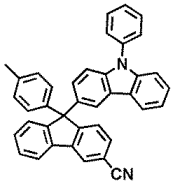
H51



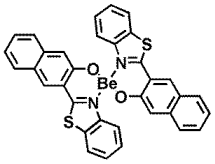
H52



H53



H54



H55

[0320]

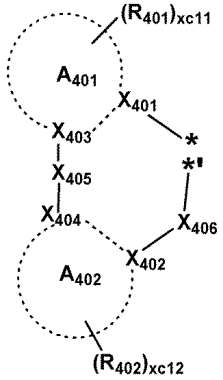
[0321] [유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]

[0322] 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함할 수 있다:

[0323] <화학식 401>

[0324] $M(L_{401})_{xc1}(L_{402})_{xc2}$

[0325] <화학식 402>



[0326]

[0327] 상기 화학식 401 및 402 중,

[0328] M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 로듐(Rh) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고,

[0329] L_{401}은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, xc1은 1, 2 또는 3이고, xc1이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{401}은 서로 동일하거나 상이하고,

[0330] L_{402}는 유기 리간드이고, xc2는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, xc2가 2 이상일 경우 2 이상의 L_{402}는 서로 동일하거나 상이하고,

[0331] X_{401} 내지 X_{404}는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

[0332] 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,

[0333] A_{401} 및 A_{402}는 서로 독립적으로, C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 또는 C_1-C_{60}헤테로시클릭 그룹이고,

[0334] 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,

[0335] X_{406}은 단일 결합, O 또는 S이고,

[0336] 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,

[0337] xc11 및 xc12는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0338] 상기 화학식 402 중 * 및 *'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.

[0339] 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, 이속사졸(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.

[0340] 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.

[0341] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 R_{401} 및 R_{402}는 서로 독립적으로,

[0342] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기 및 C_1-C_{20}알콕시기;

[0343] 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;

[0344] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;

[0345] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 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 디벤조티오페닐기; 및

[0346] $-Si(Q_{401})(Q_{402})(Q_{403})$, $-N(Q_{401})(Q_{402})$, $-B(Q_{401})(Q_{402})$, $-C(=O)(Q_{401})$, $-S(=O)_2(Q_{401})$ 및 $-P(=O)(Q_{401})(Q_{402})$;

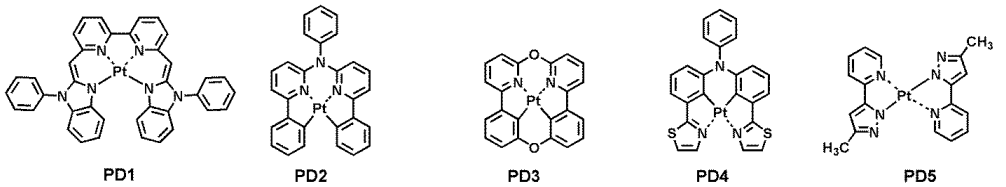
[0347] 중에서 선택되고,

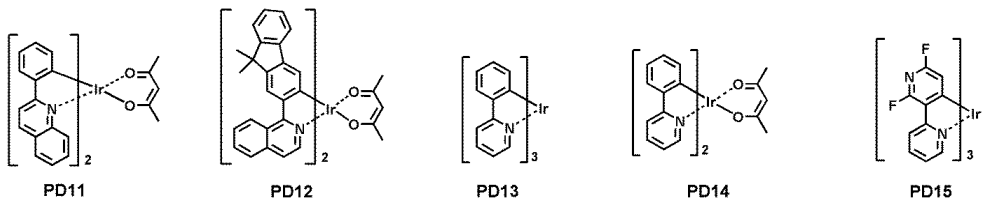
[0348] 상기 Q_{401} 내지 Q_{403}은 서로 독립적으로, C_1-C_{10}알킬기, C_1-C_{10}알콕시기, 페닐기, 비페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

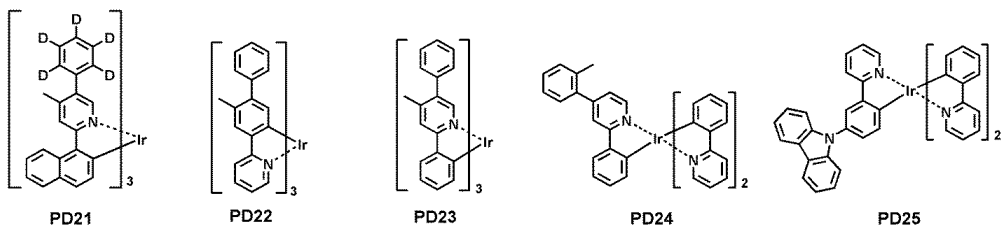
[0349] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 401 중 xc1이 2 이상일 경우, 2 이상의 L_{401} 중 2개의 A_{401}은 선택적으로(optionally), 연결기인 X_{407}을 통하여 서로 연결되거나, 2개의 A_{402}는 선택적으로, 연결기인 X_{408}을 통하여 서로 연결될 수 있다 (하기 화합물 PD1 내지 PD4 및 PD7 참조). 상기 X_{407} 및 X_{408}은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*', *-S-*', *-C(=O)-*', *-N(Q_{413})-*', *-C(Q_{413})(Q_{414})-*' 또는 *-C(Q_{413})=C(Q_{414})-*' (여기서, Q_{413} 및 Q_{414}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기임)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0350] 상기 화학식 401 중 L_{402}는 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기 L_{402}는 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.

[0351] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0352] 

[0353] 

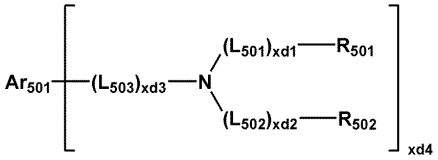
[0354] 

[0355] [발광층 중 형광 도펀트]

[0356] 상기 형광 도펀트는 아릴아민 화합물 또는 스티릴아민 화합물을 포함할 수 있다.

[0357] 상기 형광 도펀트는 하기 화학식 501로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

[0358] <화학식 501>

[0359] 

[0360] 상기 화학식 501 중,

[0361] Ar_{501}은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로시클릭 그룹이고,

[0362] L_{501} 내지 L_{503}은 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,

[0363] xd1 내지 xd3는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0364] R_{501} 및 R_{502}는 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 선택되고,

[0365] xd4는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.

[0366] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar_{501}은,

[0367] 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, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹; 및

[0368] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 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, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹;

[0369] 중에서 선택될 수 있다.

[0370] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L_{501} 내지 L_{503}은 서로 독립적으로,

[0371] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및

[0372] 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, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤

조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기;

[0373] 중에서 선택될 수 있다.

[0374] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 R_{501} 및 R_{502}는 서로 독립적으로,

[0375] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및

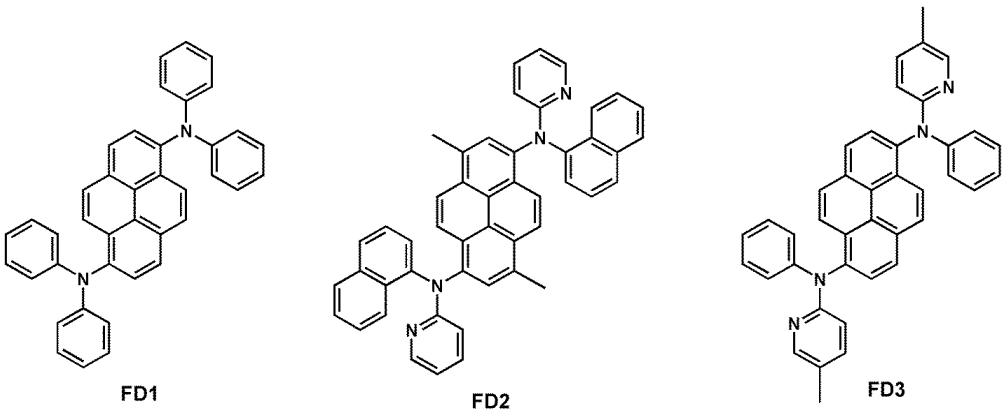
[0376] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;

[0377] 중에서 선택되고,

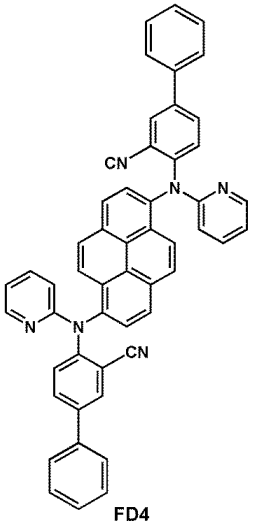
[0378] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33}은 C_1-C_{10}알킬기, C_1-C_{10}알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0379] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd4는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

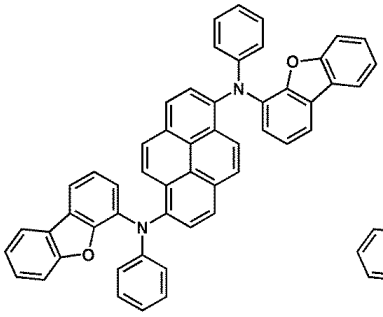
[0380] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:

[0381] 

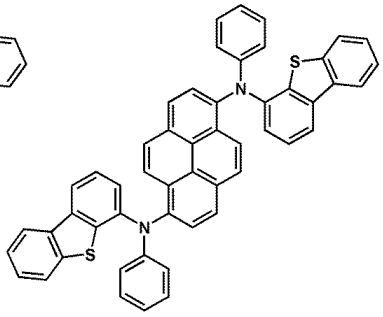
[0382]



FD4

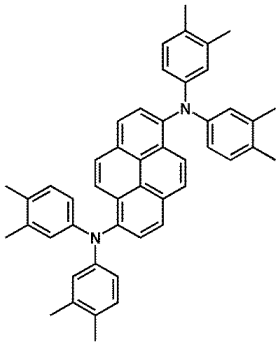


FD5

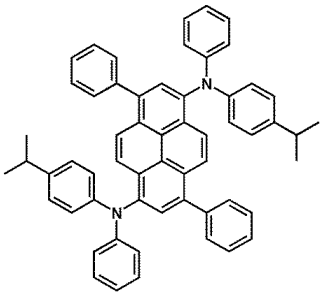


FD6

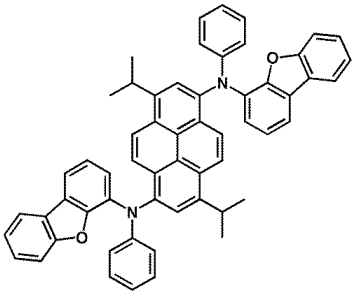
[0383]



FD7

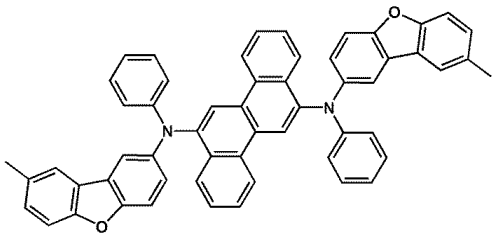


FD8

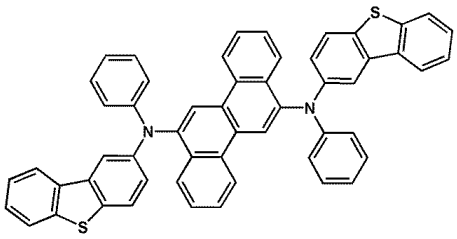


FD9

[0384]

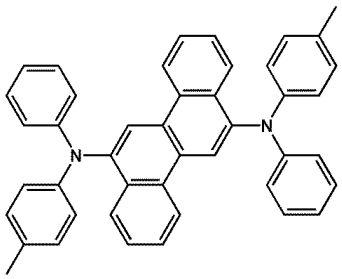


FD10

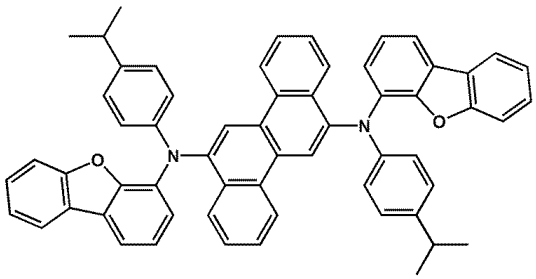


FD11

[0385]

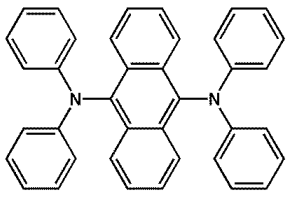


FD12

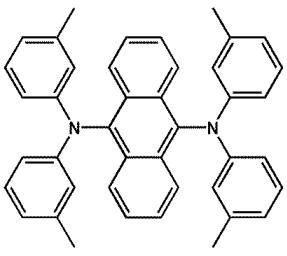


FD13

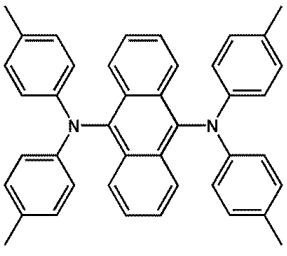
[0386]



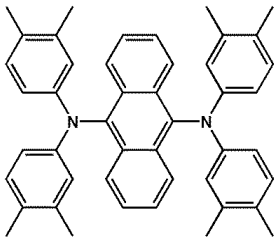
FD14



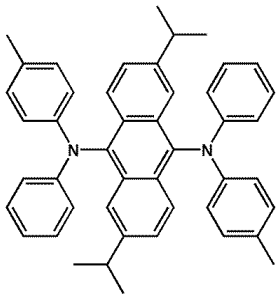
FD15



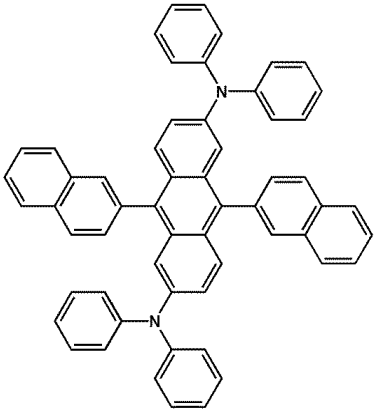
FD16

[0387] 

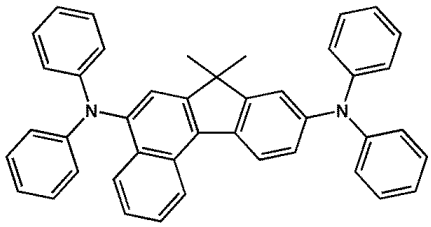
FD17



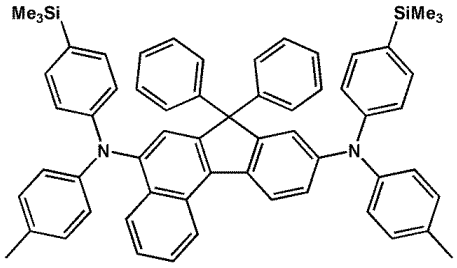
FD18



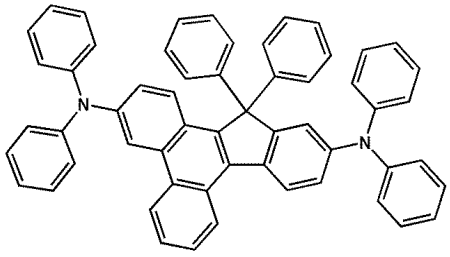
FD19

[0388] 

FD20



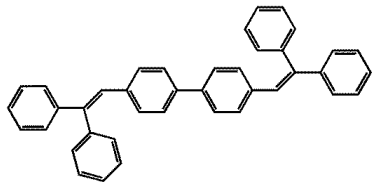
FD21

[0389] 

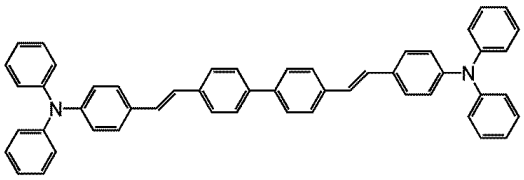
FD22

[0390] 또는, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물들 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

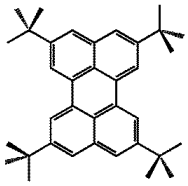
[0391]



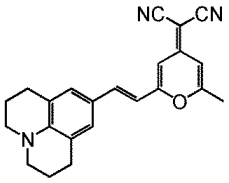
DPVBi



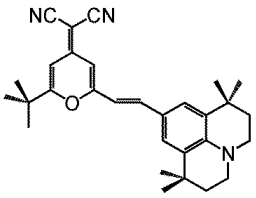
DPAVBi



TBPe

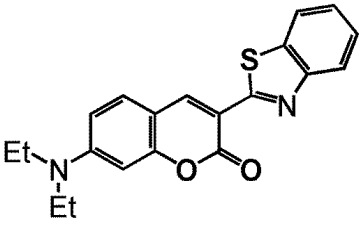


DCM

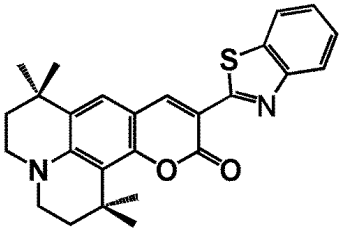


DCJTB

[0392]



Coumarin 6



C545T

[0393] [유기층(150) 중 전자 수송 영역]

[0394] 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.

[0395] 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.

[0396] 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.

[0397] 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.

[0398] 상기 "π 전자 결핍성 함질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 *-N=*' 모이어티를 갖는 C_1-C_{60}헤테로시클릭 그룹을 의미한다.

[0399] 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.

[0400] 상기 π 전자 결핍성 함질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 인다졸, 푸린(purine), 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 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.

[0401] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0402] <화학식 601>

[0403] $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$

[0404] 상기 화학식 601 중,

[0405] Ar_{601}은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로시클릭 그룹이고,

[0406] xe11은 1, 2 또는 3이고,

[0407] 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,

[0408] xe1는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0409] 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,

[0410] 상기 Q_{601} 내지 Q_{603}은 서로 독립적으로, C_1-C_{10}알킬기, C_1-C_{10}알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,

[0411] xe21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.

[0412] 일 구현예에 따르면, 상기 xe11개의 Ar_{601} 및 xe21개의 R_{601} 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 함질소 고리를 포함할 수 있다.

[0413] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar_{601}은,

[0414] 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, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 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

[0415] 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, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 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, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 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 그

룹 및 아자카바졸 그룹;

[0416] 중에서 선택될 수 있고,

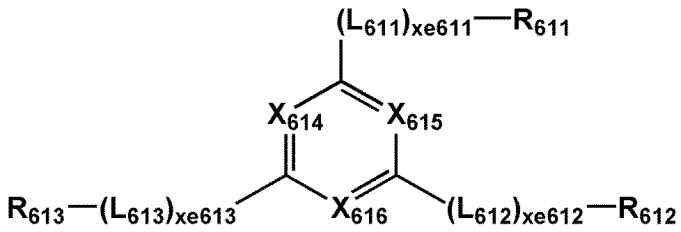
[0417] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33}은 서로 독립적으로, C_1-C_{10}알킬기, C_1-C_{10}알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0418] 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{601}은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0419] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar_{601}은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0420] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

[0421] <화학식 601-1>

[0422] 

[0423] 상기 화학식 601-1 중,

[0424] X_{614}는 N 또는 C(R_{614})이고, X_{615}는 N 또는 C(R_{615})이고, X_{616}은 N 또는 C(R_{616})이고, X_{614} 내지 X_{616} 중 적어도 하나는 N이고,

[0425] L_{611} 내지 L_{613}은 서로 독립적으로, 상기 L_{601}에 대한 설명을 참조하고,

[0426] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0427] R_{611} 내지 R_{613}은 서로 독립적으로, 상기 R_{601}에 대한 설명을 참조하고,

[0428] R_{614} 내지 R_{616}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 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0429] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L_{601} 및 L_{611} 내지 L_{613}은 서로 독립적으로,

[0430] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 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; 및

[0431] 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, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일

기, 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, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 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;

[0432] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0433] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0434] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R_{601} 및 R_{611} 내지 R_{613}은 서로 독립적으로,

[0435] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 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;

[0436] 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, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 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, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 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, 이소벤조옥

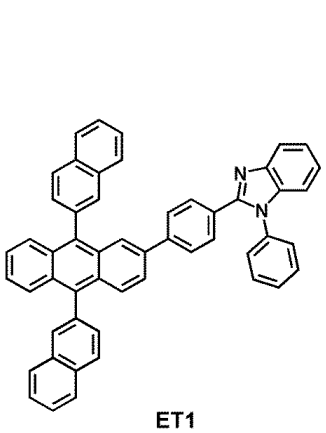
사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

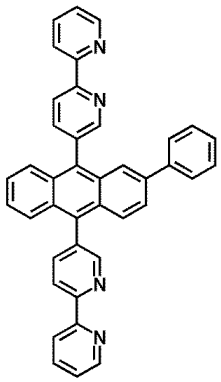
[0437] $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$;

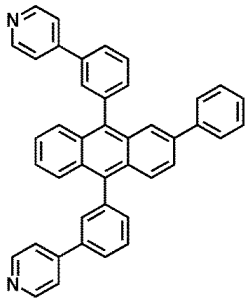
[0438] 중에서 선택되고,

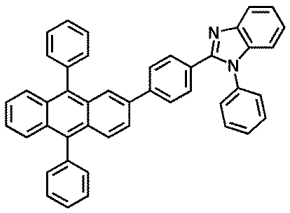
[0439] 상기 Q_{601} 및 Q_{602}에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

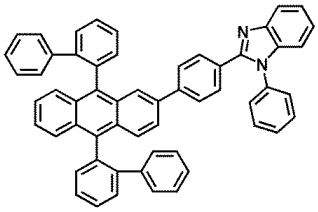
[0440] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

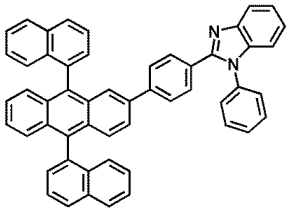
[0441] 
ET1

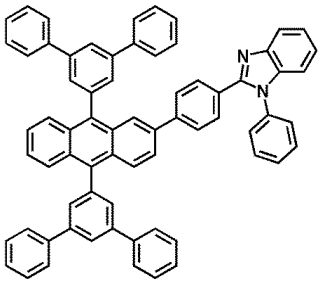

ET2

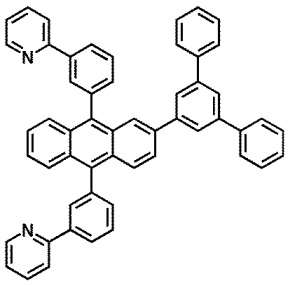

ET3

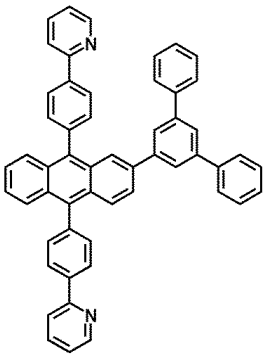
[0442] 
ET4


ET5

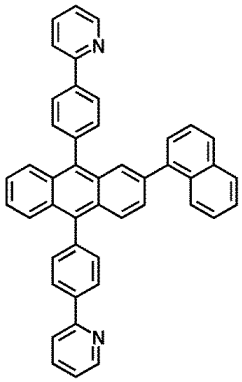

ET6

[0443] 
ET7

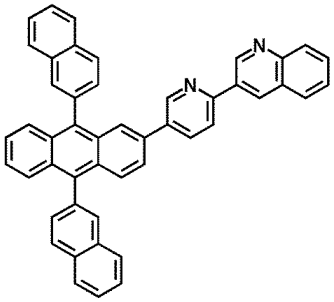

ET8


ET9

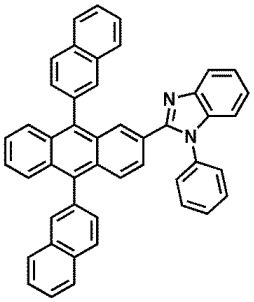
[0444]



ET10

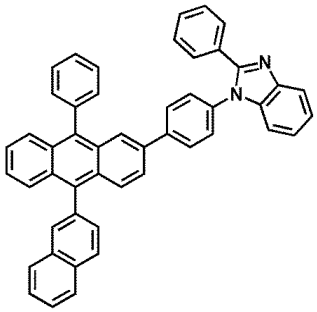


ET11

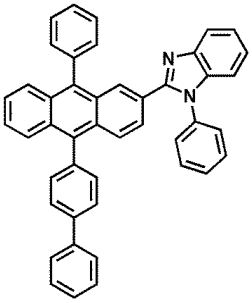


ET12

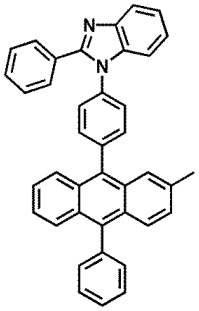
[0445]



ET13

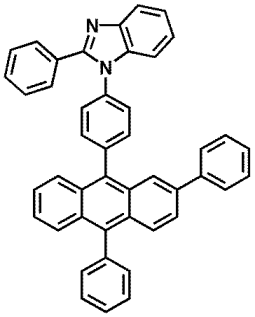


ET14

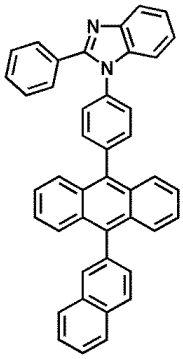


ET15

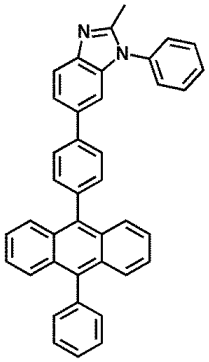
[0446]



ET16

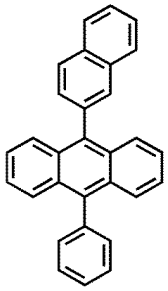


ET17

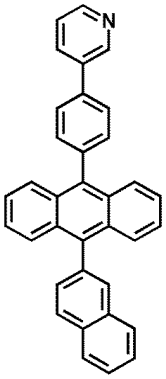


ET18

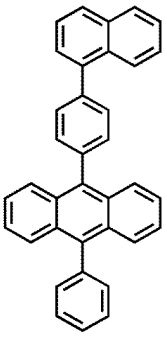
[0447]



ET19

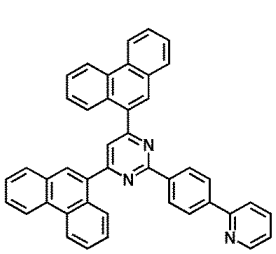


ET20

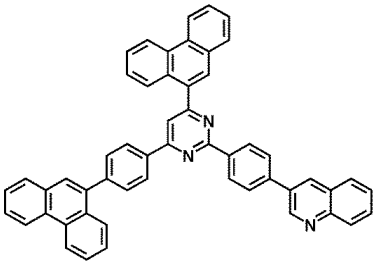


ET21

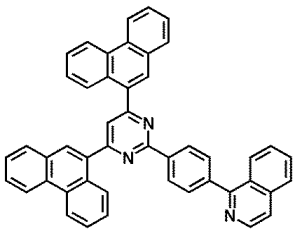
[0448]



ET22

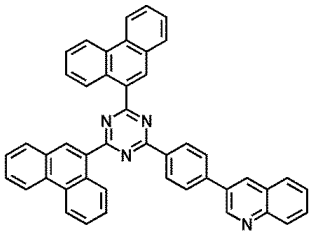


ET23

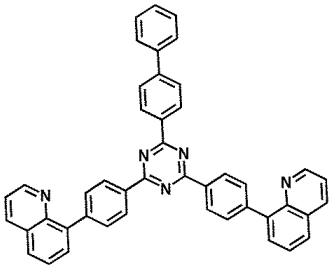


ET24

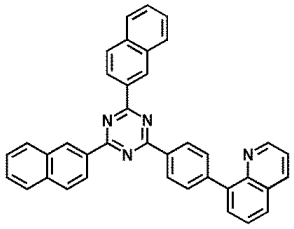
[0449]



ET25

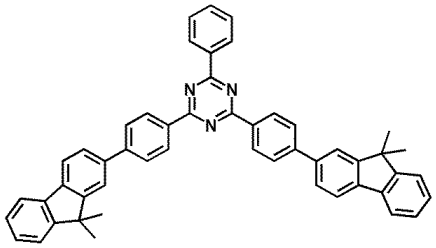


ET26

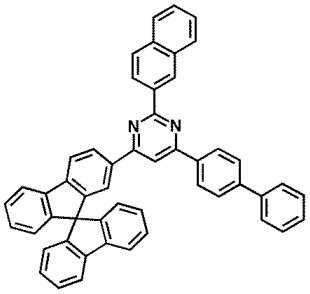


ET27

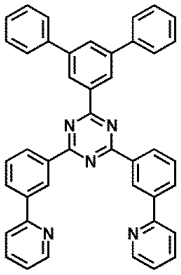
[0450]



ET28

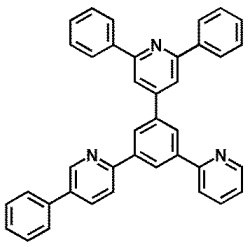


ET29

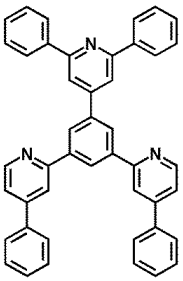


ET30

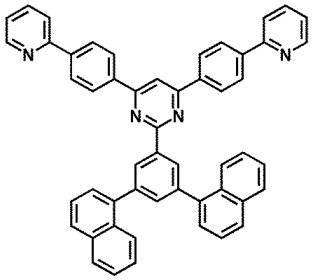
[0451]



ET31

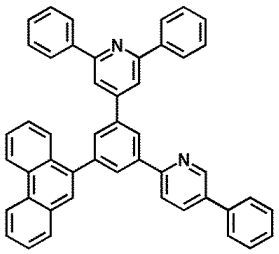


ET32

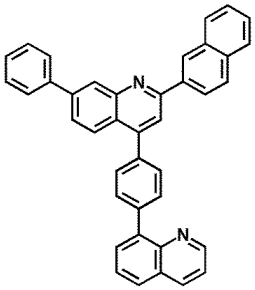


ET33

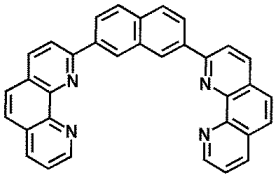
[0452]



ET34

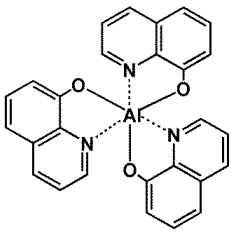


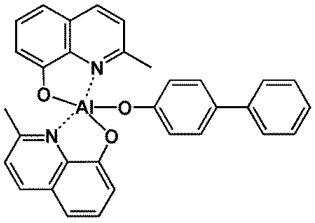
ET35

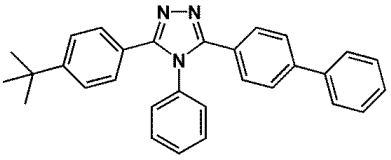


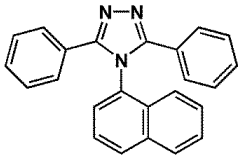
ET36

[0453] 또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq_3, 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.









[0454]

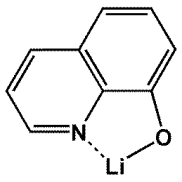
[0455] 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성 또는 전자 조절 특성을 얻을 수 있다.

[0456] 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.

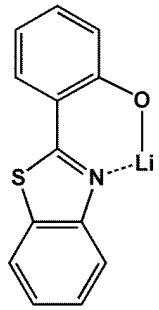
[0457] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0458] 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.

[0459] 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-D2을 포함할 수 있다.



ET-D1



ET-D2

[0460]

[0461] 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.

[0462] 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.

[0463] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희

토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0464] 상기 알칼리 금속은, Li, Na, K, Rb 및 Cs 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li, Na 또는 Cs일 수 있다. 다른 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li 또는 Cs일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0465] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.

[0466] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.

[0467] 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.

[0468] 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.

[0469] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO, $Ba_xSr_{1-x}O(0<x<1)$, $Ba_xCa_{1-x}O(0<x<1)$ 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.

[0470] 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.

[0471] 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, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0472] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합만으로 이루어져 있거나, 상기 유기물을 더 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층이 유기물을 더 포함할 경우, 상기 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합은 상기 유기물로 이루어진 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

[0473] 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.

[0474] [제2전극(190)]

[0475] 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 조합(combination)을 사용할 수 있다.

[0476] 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.

[0477] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0478] [도 2 내지 4에 대한 설명]

[0479] 한편, 도 2의 유기 발광 소자(20)는 제1캡핑층(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 제2캡핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 4의 유기 발광 소자(40)는 제1캡핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캡핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.

[0480] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.

[0481] 유기 발광 소자(20, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제1전극(110) 및 제1캡핑층(210)을 지나 외부로 취출될 수 있고, 유기 발광 소자(30, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제2전극(190) 및 제2캡핑층(220)을 지나 외부로 취출될 수 있다.

[0482] 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.

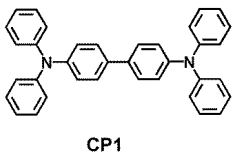
[0483] 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220)은 서로 독립적으로, 유기물로 이루어진 유기 캡핑층, 무기물로 이루어진 무기 캡핑층, 또는 유기물 및 무기물을 포함한 복합 캡핑층일 수 있다.

[0484] 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(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 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민계 화합물을 포함할 수 있다.

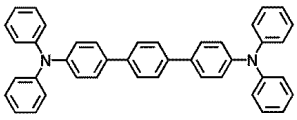
[0485] 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 또는 상기 화학식 202로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0486] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(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.

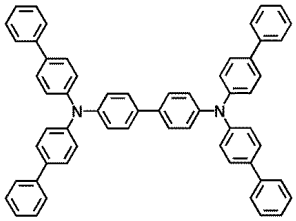
[0487]



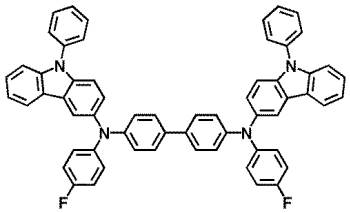
CP1



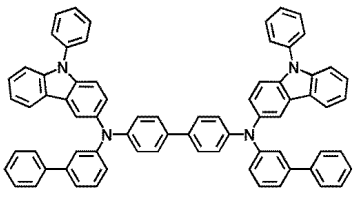
CP2



CP3



CP4



CP5

[0489] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1 내지 4를 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0490] 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.

[0491] 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 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

[0492] 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 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

[0493] [치환기의 일반적인 정의]

[0494] 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.

[0495] 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 C_2-C_{60}알케닐렌기는 상기 C_2-C_{60}알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0496] 본 명세서 중 C_2-C_{60}알키닐기는, 상기 C_2-C_{60}알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기, 프로피닐기, 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_2-C_{60}알키닐렌기는 상기 C_2-C_{60}알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0497] 본 명세서 중 C_1-C_{60}알콕시기는, $-OA_{101}$(여기서, A_{101}은 상기 C_1-C_{60}알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.

[0498] 본 명세서 중 C_3-C_{10}시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_3-C_{10}시클로알킬렌기는 상기 C_3-C_{10}시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0499] 본 명세서 중 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기는, 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-옥사트리아졸리디닐기(1,2,3,4-oxatriazolidinyl), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오페닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬렌기는 상기 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0500] 본 명세서 중 C_3-C_{10}시클로알케닐기는 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 C_3-C_{10}시클로알케닐렌기는 상기 C_3-C_{10}시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0501] 본 명세서 중 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기는 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 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸일기, 2,3-디히드로퓨라닐기, 2,3-디히드로티오페닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0502] 본 명세서 중 C_6-C_{60}아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C_6-C_{60}아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미

한다. 상기 C_6-C_{60}아릴기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기 C_6-C_{60}아릴기 및 C_6-C_{60}아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

[0503] 본 명세서 중 C_1-C_{60}헤테로아릴기는 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, C_1-C_{60}헤테로아릴렌기는 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 C_1-C_{60}헤테로아릴기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함되다. 상기 C_1-C_{60}헤테로아릴기 및 C_1-C_{60}헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

[0504] 본 명세서 중 C_6-C_{60}아릴옥시기는 $-OA_{102}$(여기서, A_{102}는 상기 C_6-C_{60}아릴기임)를 가리키고, 상기 C_6-C_{60}아릴티오기(arylthio)는 $-SA_{103}$(여기서, A_{103}은 상기 C_6-C_{60}아릴기기임)를 가리킨다.

[0505] 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.

[0506] 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.

[0507] 본 명세서 중 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 5 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

[0508] 본 명세서 중 C_1-C_{60}헤테로시클릭 그룹이란, 상기 C_5-C_{60}카보시클릭 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.

[0509] 본 명세서 중, 상기 치환된 C_5-C_{60}카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60}헤테로시클릭 그룹, 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 중 적어도 하나는,

[0510] 중수소(-D), -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;

[0511] 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;

[0512] 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;

[0513] 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}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; 및

[0514] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$;

[0515] 중에서 선택되고,

[0516] 상기 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 선택될 수 있다.

[0517] 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.

[0518] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C_6-C_{60}아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0519] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C_6-C_{60}아릴기로 치환된 C_6-C_{60}아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

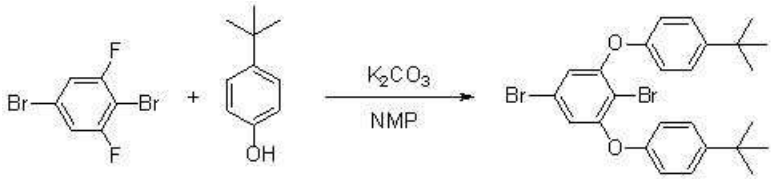
[0520] 본 명세서 중 * 및 *'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0521] 이하에서, 합성예 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성예 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.

[0522] **[합성예]**

[0523] 합성예 1: 화합물 2의 합성

[0524] 중간체 1의 합성

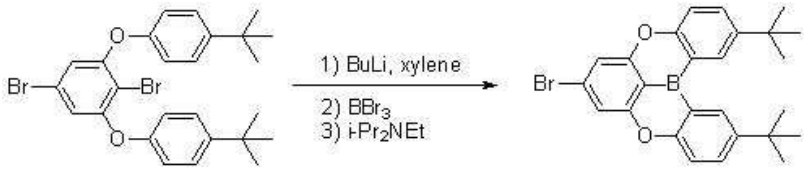


[0525]

[0526] 중간체 1

[0527] 2,5-Dibromo-1,3-difluorobenzene (10. 0 g, 36.8 mmol), 4-(tert-butyl)phenol (16.6 g, 110.4 mmol) 및 K_2CO_3 (15.3 g, 110.4 mmol)의 N-methylpyrrolidone (45 mL) 현탁액을 질소 분위기하에 170 ℃에서 20시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 톨루엔(toluene)으로 희석하고 물에 부어 추출하였다. 유기층을 물로 세척하고 $MgSO_4$로 건조하고, 실리카겔로 여과 및 농축하였다. 잔류물을 에탄올로 희석하고 여과하여 중간체 1 (15.7 g, 80%)를 얻었다.

[0528] 중간체 2의 합성

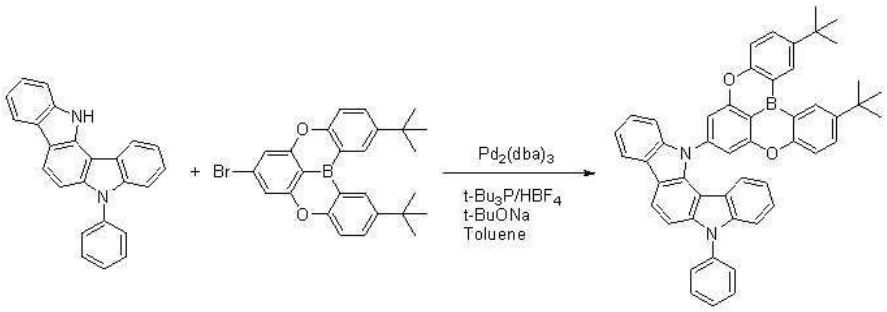


[0529]

[0530] 중간체 2

[0531] 중간체 1 (8.0 g, 15.0 mmol)의 m-xylene (85 mL) 용액에 0 ℃에서 n-BuLi (1.6M, 10.3 mL, 16.5 mmol)을 천천히 첨가하였다. 20분 후, 상온에서 1시간 동안 교반하였다. 0 ℃에서 BBr_3 (1.7 mL, 18.0 mmol)를 천천히 첨가하였고, 20분 후, 상온에서 30분 동안 교반하고, 40 ℃에서 30분 동안 교반하였다. 0 ℃에서 i-Pr_2NEt (5.2 mL, 30.0 mmol)을 천천히 첨가하고, 30분 후 상온에서 30분 동안 교반하고, 120 ℃에서 17시간 동안 교반한 후, 상온으로 식혔다. 반응 혼합물을 Forisil로 여과하고 농축하였다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 2 (1.0 g, 15%)를 얻었다.

[0532] 화합물 2의 합성



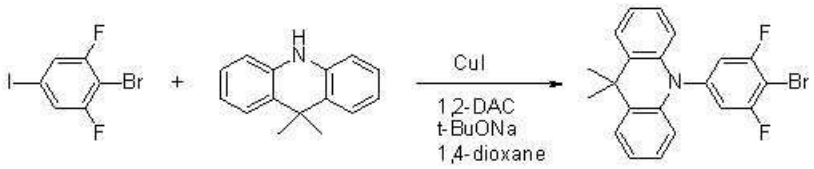
[0533]

[0534] 화합물 2

[0535] 5-Phenyl-5,12-dihydroindolo[3,2-a]carbazole (1.6 g, 4.9 mmol), 중간체 2 (2.3 g, 4.9 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (89 mg, 0.096 mmol), P(*t*-Bu)$_3$/HBF_4 (113 mg, 0.39 mmol), NaO*t*-Bu (941 mg, 34.4 mmol) 및 톨루엔 (50 mL)을 반응플라스크에 넣은 후 질소 분위기하에 110 ℃에서 20시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식히고 실리카겔로 여과 및 농축하였다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2 (1.5 g, 43%)를 얻었다.

[0536] 합성예 2: 화합물 4의 합성

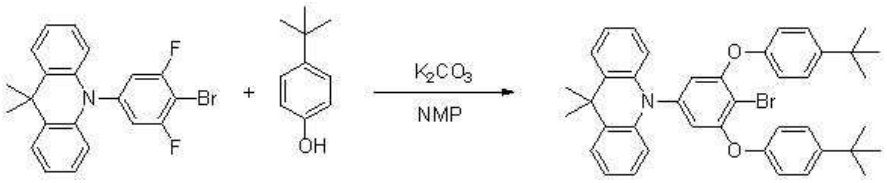
[0537] 중간체 3의 합성

[0538] 

[0539] 중간체 3

[0540] 2-Bromo-1,3-difluoro-5-iodobenzene (10.0 g, 31.4 mmol), 9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine (6.6 g, 31.4 mmol), CuI (120.0 mg, 0.6 mmol), 1,2-diaminocyclohexane (358.0 mg, 3.1 mmol) 및 $NaOBu^t$ (4.5 g, 47.1 mmol)의 1,4-dioxane (40 mL) 현탁액을 질소 분위기하에 100 ℃에서 20시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 농축하고, hexane/dichloromethane (10/1)로 희석하여 셀라이트(celite)/실리카겔로 여과 및 농축하였다. 잔류물을 실리카겔 칼럼으로 정제하여 중간체 3 (5.2 g, 42%)을 얻었다.

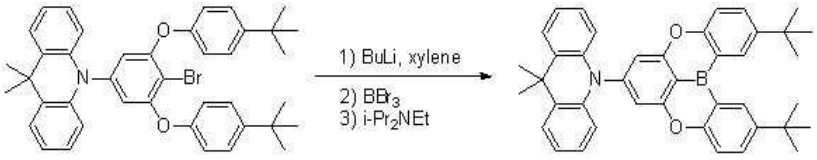
[0541] 중간체 4의 합성

[0542] 

[0543] 중간체 4

[0544] 중간체 3 (5.2 g, 13.0 mmol), 4-(tert-butyl)phenol (5.8 g, 39.0 mmol) 및 K_2CO_3 (5.4 g, 39.0 mmol)의 N-methylpyrrolidinone (15 mL) 현탁액을 질소 분위기하에 170 ℃에서 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 t-BuOMe로 희석하고 포화 NH_4Cl 수용액에 부어 추출하였다. 유기층을 $NaHCO_3$ 수용액으로 씻고 $MgSO_4$로 건조, 여과 및 농축하였다. 잔류물을 dichloromethane에 녹여 실리카겔로 여과 및 농축하고, 재결정으로 정제하여 중간체 4 (6.6 g, 76%)를 얻었다.

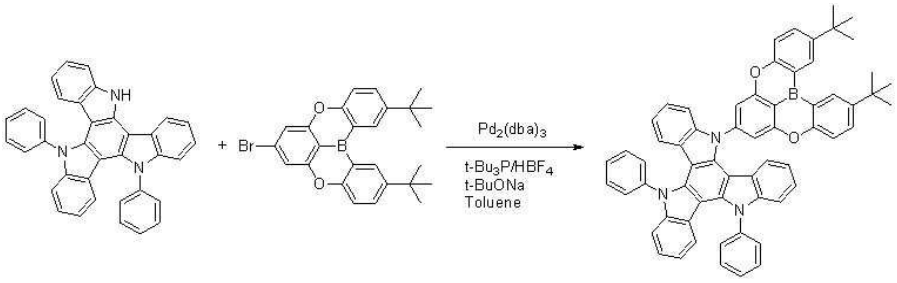
[0545] 화합물 4의 합성

[0546] 

화합물 4

[0547] 중간체 4 (6.7 g, 10.1 mmol)의 m-xylene (50 mL) 용액에 0 ℃에서 n-BuLi (1.6M, 7.0 mL, 11.2 mmol)을 천천히 첨가하였고, 20분 후, 상온에서 1시간 동안 교반하였다. 0 ℃에서 BBr_3 (1.2 mL, 12.1 mmol)를 천천히 첨가하였다. 2시간 후, 상온에서 교반하였다. 18시간 후, 0 ℃에서 i-Pr_2NEt (3.5 mL, 20.2 mmol)을 천천히 첨가하고 온도를 서서히 올려 2시간 동안 교반하였다. 그 후, 80 ℃에서 20분 동안 교반하고, 120 ℃에서 22시간 동안 교반한 후, 상온으로 식혔다. 반응 혼합물을 Forisil로 여과하고 농축하였다. 잔류물을 재결정으로 정제하여 화합물 4 (3.3 g, 28%)을 얻었다.

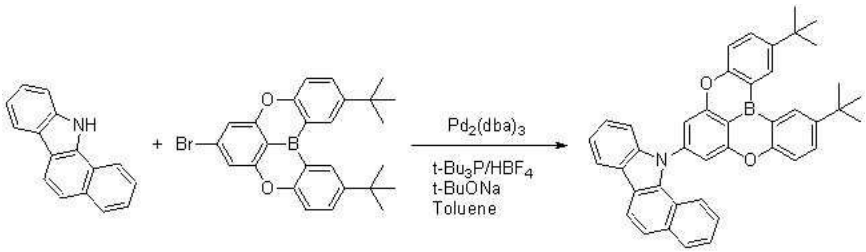
[0548] 합성예 3: 화합물 7의 합성

[0549] 

화합물 7

[0550] 5,10-Diphenyl-10,15-dihydro-5H-diindolo[3,2-a:3',2'-c]carbazole (1.9 g, 3.9 mmol), 중간체 2 (1.8 g, 3.9 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (71 mg, 0.076 mmol), P(*t*-Bu)$_3$/HBF_4 (90 mg, 0.31 mmol), NaO*t*-Bu (747 mg, 27.3 mmol) 및 톨루엔 (40 mL)을 반응플라스크에 넣은 후 질소 분위기하에 110 ℃에서 20시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식히고 실리카겔로 여과 및 농축하였다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 7 (1.2 g, 32%)를 얻었다.

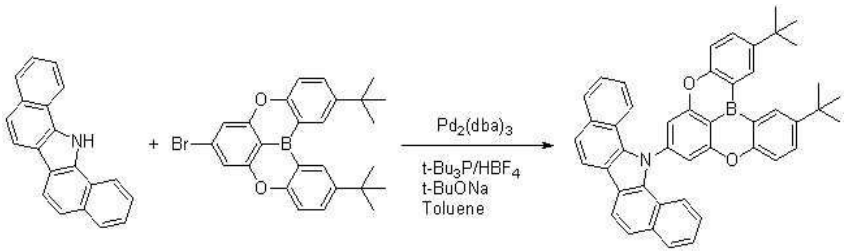
[0551] 합성예 4: 화합물 8의 합성

[0552] 

[0553] 화합물 8

[0554] 11H-Benzo[a]carbazole (1.5 g, 6.9 mmol), 중간체 2 (3.2 g, 6.9 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (125 mg, 0.134 mmol), P(*t*-Bu)$_3$/HBF_4 (158 mg, 0.55 mmol), NaO*t*-Bu (1.3 g, 48.0 mmol) 및 톨루엔 (70 mL)을 반응플라스크에 넣은 후 질소 분위기하에 110 ℃에서 22시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식히고 실리카겔로 여과 및 농축하였다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 8 (2.1 g, 51%)를 얻었다.

[0555] 합성예 5: 화합물 11의 합성

[0556] 

[0557] 화합물 11

[0558] 13H-Dibenzo[a,i]carbazole (2.0 g, 7.6 mmol), 중간체 2 (3.5 g, 7.6 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (138 mg, 0.15 mmol), P(*t*-Bu)$_3$/HBF_4 (176 mg, 0.60 mmol), NaO*t*-Bu (1.5 g, 53.2 mmol) 및 톨루엔 (80 mL)을 반응플라스크에 넣은 후 질소 분위기하에 110 ℃에서 24시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식히고 실리카겔로 여과 및 농축하였다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 11 (1.7 g, 35%)를 얻었다.

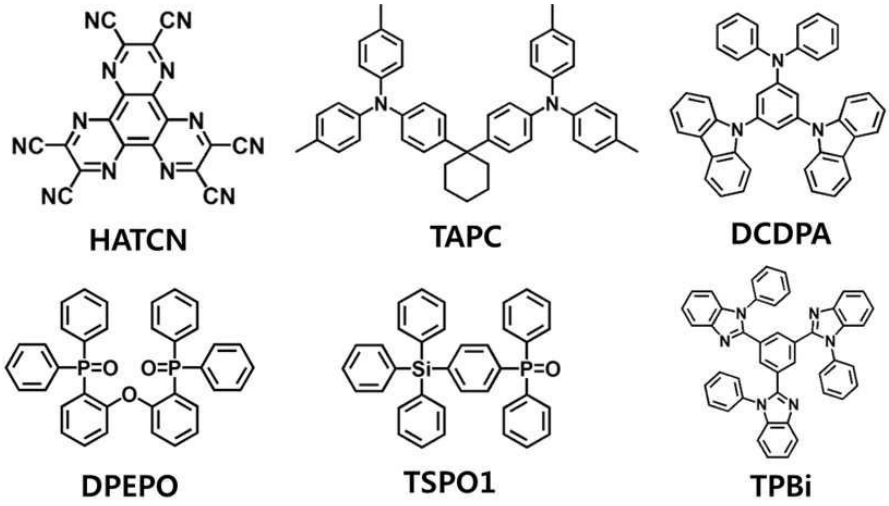
[0559] **[실시예]**

[0560] **실시예 1**

[0561] ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm크기로 잘라서 아세톤, 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 상기 ITO 유리기판

을 설치하였다.

[0562] 상기 ITO 유리 상부에 HATCN(7 nm)/ TAPC (50 nm)/ DCDPA (10 nm)/ DPEPO(호스트) 및 화합물 4(도펀트) 20 wt% (25nm)/ TSPO1 (5 nm)/ TPBi (15 nm)/ LiF (1.5 nm)/ Al (100 nm) 순으로 적층하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0563] 

[0564] **실시예 2, 비교예 1 및 2**

[0565] 발광층 형성시 상기 화합물 4 대신 표 2의 화합물을 이용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0566] **평가예 1**

[0567] **1-1 재료 물성 평가**

[0568] 화합물 4, 화합물 7, 화합물 A 및 화합물 B를 각각 톨루엔 용매에 10^{-4}M 의 농도로 녹여 광발광(Photoluminescence)을 측정하여 그 결과를 하기 표 1 및 도 5에 나타내었다.

[0569] 표 1 및 도 5에 나타난 바와 같이, 화합물 4의 경우 피크 기준 457nm의 진청색 파장을 나타냈으며 반치폭이 49nm로 종래의 TADF 재료와 비교하여 청색 특성의 TADF 재료로서 우수성을 나타내었다. 또한, 화합물 7의 경우 화합물 4와 유사한 456nm의 진청색 파장을 나타내었고, 화합물 4와 비교하여 반치폭이 다소 넓은 특성을 보였으나 여전히 청색의 TADF 재료로서 우수성을 나타내었다.

[0570] 그러나, 화합물 A의 경우 피크가 2개로 나눠지는 양상을 나타내었고, 이와 같은 현상은 페노티아진(phenothiazine)이 TADF 형태의 분자에 존재할 때 구조 이성질체(equatorial, axial) 2가지 상이 존재하기 때문인 것으로 알려져 있다(참조: J. Phys. Chem. C 2014, 118, 15985-15994). 또한, 색특성 및 TADF 특성이 나쁜 것으로 나타났고, 이러한 물질은 피크가 2개가 나타나므로 R, G, B를 따로 표현해야 하는 디스플레이 용도에 적합하지 않다. 또한, 화합물 B의 경우 PL의 반치폭이 좁고 피크가 392nm의 파장을 나타내었다. 이는 UV 빛을 발광하므로 디스플레이의 청색의 TADF 재료로 사용하기엔 그 특성이 적합하지 않다.

[0571] 또한, TADF 특성을 확인하기 위하여 화합물 4, 화합물 7, 화합물 A 및 화합물 B를 각각 DPEPO의 호스트(host)에 20% 도핑하여 박막을 제작하였고, 상기 박막의 지연형광을 특성을 각각 PLQY(photoluminescence quantum yield)와 TRPL(time resolved photoluminescence)로 엑시톤 수명을 측정하여 그 결과를 하기 표 1 및 도 6에 나타내었다.

[0572] 표 1 및 도 6에 나타난 바와 같이, 화합물 4 및 화합물 7의 경우 총 PLQY가 각각 93% 및 100%로 매우 높게 측정되었으며 Φ_p 및 Φ_d가 화합물 4는 각각 0.49 및 0.44로 측정되었고, 화합물 7은 각각 0.60 및 0.40로 측정되었다. 또한, 작은 $\triangle E_{ST}$의 영향으로 RISC(reverse Intersystem crossing)가 효과적으로 일어나 지연 성분(delayed component)이 커진 것을 확인하였고, 지연 엑시톤 수명(delayed exciton lifetime)이 각각 1.83㎲ 및 1.74㎲로 짧게 나타났다.

[0573] 그러나, 화합물 A의 경우, 두 이성질체 중 한 구조가 약한 지연 형광 특성을 나타내고 지연 엑시톤 수명

(delayed exciton lifetime)이 2.70㎲으로 측정되었으나 총 PLQY가 15%로 매우 낮아 Φ_p 및 Φ_d이 각각 0.06 및 0.09로 낮게 측정되었다. 따라서, 매우 낮은 PLQY로 인해 발광 재료로서 활용성이 없음을 확인하였다. 또한, 화합물 B의 경우 총 PLQY는 73%로 높게 측정되었으나 분자 구조상 도너(donor)와 억셉터(acceptor)의 입체장애(steric hindrance)가 상대적으로 작아 $\triangle E_{ST}$가 크게 나타났고, 지연 엑시톤 수명(delayed exciton lifetime)을 측정하였을 때 지연 성분(delayed component)이 측정되지 않았으며 TADF 물질이 아닌 형광 물질로 나타났다.

[0574] 상기 결과로부터, 본 발명의 화합물 4 및 화합물 7은 모두 청색 TADF 물질로 사용하기에 아주 우수한 물질임을 확인하였다.

표 1

[0575]

	$\lambda_{emission}$	Φ_{PL}	Φ_p	Φ_d	지연 엑시톤 수명	비 고
화합물 4	457 nm	0.93	0.49	0.44	1.83 ㎲	우수한 TADF 특성
화합물 7	456 nm	1.00	0.60	0.40	1.74 ㎲	우수한 TADF 특성
화합물 A	394, 535 nm	0.15	0.06	0.09	2.70 ㎲	매우 약한 TADF 특성
화합물 B	392 nm	0.73	0.73	0	X	형광 물질

[0576] **1-2 소자 특성 평가**

[0577] 상기 실시예 1 및 2와 비교예 1 및 2에서 제작된 유기 발광 소자의 전류 밀도 50mA/cm^2에서의 구동전압, 휘도 및 효율을 하기 방법을 이용하여 측정하여 그 결과를 표 2에 나타내었다.

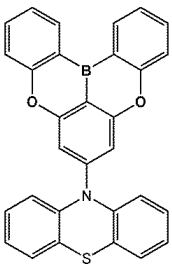
[0578] - 휘도: 전류-전압계(Kethley SMU 236)에서 전원을 공급하고, 휘도계 PR650을 이용하여 측정하였다.

[0579] - 효율: 전류-전압계(Kethley SMU 236)에서 전원을 공급하고, 휘도계 PR650을 이용하여 측정하였다.

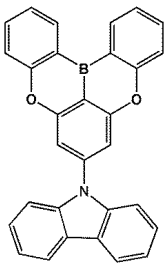
표 2

[0580]

	발광층 재료(도펀트)	구동전압 (V)	Max. 휘도 (cd/m^2)	효율 (cd/A) @1000cd/m^2	Max. 효율 (cd/A)	발광색
실시예 1	화합물 4	8.6	5,524	13.7	17.7	(0.14, 0.09)
실시예 2	화합물 7	8.0	41,140	40.7	64.3	(0.15, 0.25)
비교예 1	화합물 A	7.6	4,887	5.8	13.6	(0.36, 0.57)
비교예 2	화합물 B	7.4	485	0.21	0.51	(0.16, 0.02)

[0581] 

<화합물 A>



<화합물 B>

[0582]

[0583] 상기 표 2로부터 실시예 1 및 2의 유기 발광 소자는 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자에 비하여 저구동 전압, 고휘도 및 고효율을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0584] 10, 20, 30, 40: 유기 발광 소자

110: 제1전극

150: 유기층

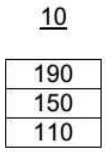
190: 제2전극

210: 제1캡핑층

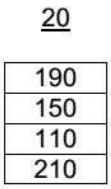
220: 제2캡핑층

도면

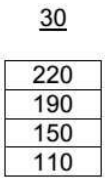
도면1



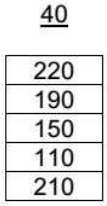
도면2



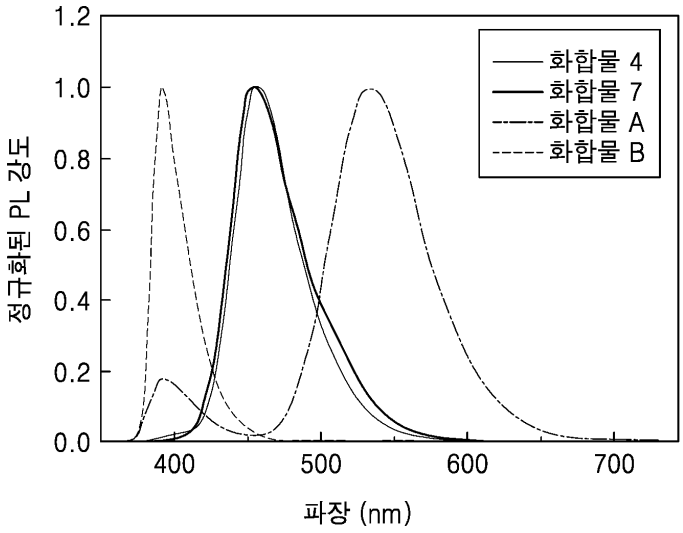
도면3



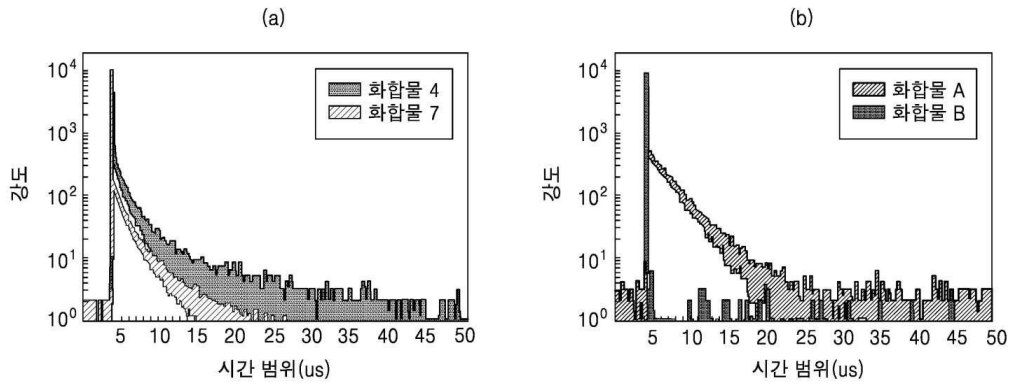
도면4



도면5


1.2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
정규화된 PL 강도
400
500
600
700
파장 (nm)
화합물 4
화합물 7
화합물 A
화합물 B

도면6


(a)
(b)
강도
시간 범위(us)
화합물 4
화합물 7
화합물 A
화합물 B