



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0095760
(43) 공개일자 2018년08월28일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 9/6584 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07F 9/65846 (2013.01)
C09K 11/06 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2017-0021727
(22) 출원일자 2017년02월17일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
경상대학교산학협력단
경상남도 진주시 진주대로 501 (가좌동)
(72) 발명자
김미경
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
김윤희
경상남도 진주시 진주대로 501, 화학과 (가좌동)
(74) 대리인
리엔텍특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

헤테로시클릭 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1

10

190
150
110

(52) CPC특허분류

H01L 51/0062 (2013.01)
H01L 51/0067 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
H01L 51/5056 (2013.01)
H01L 51/5072 (2013.01)
H01L 51/5088 (2013.01)
H01L 51/5092 (2013.01)
C09K 2211/1096 (2013.01)

(72) 발명자

권순기

경상남도 진주시 진주대로 501, 나노신소재공학부
(가좌동)

백장열

경상남도 사천시 축동면 신기길 126

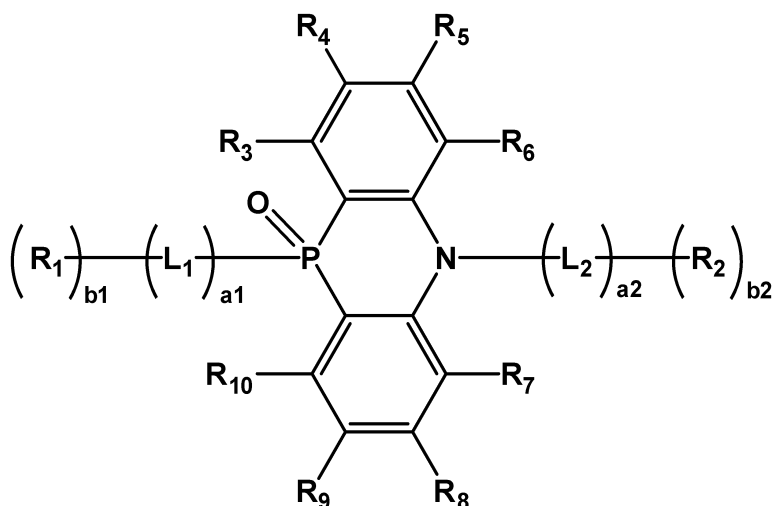
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

R_1 및 R_3 내지 R_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, -Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}), P(=O)(Q_{31})(Q_{32}), 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기 및 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(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group), 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

R_2 는 (i) 적어도 하나의 전자끄는기(electron-withdrawing group)로 치환된 C_6-C_{60} 아릴기 또는 (ii) 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리기이고,

a_1 은 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

a_2 는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

b_1 은 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

b_2 는 1 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-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, 치환

된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 및 치환된 π 전자 결핍성 합질소 고리기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는,

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기(aryloxy), C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio), C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

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

중에서 선택되고,

상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 R₁ 및 R₃ 내지 R₁₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 파이라레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 비페닐기 및 터페닐기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기,

기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기;

중에서 선택되고,

상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 R₁은 수소, 중수소, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기; 및

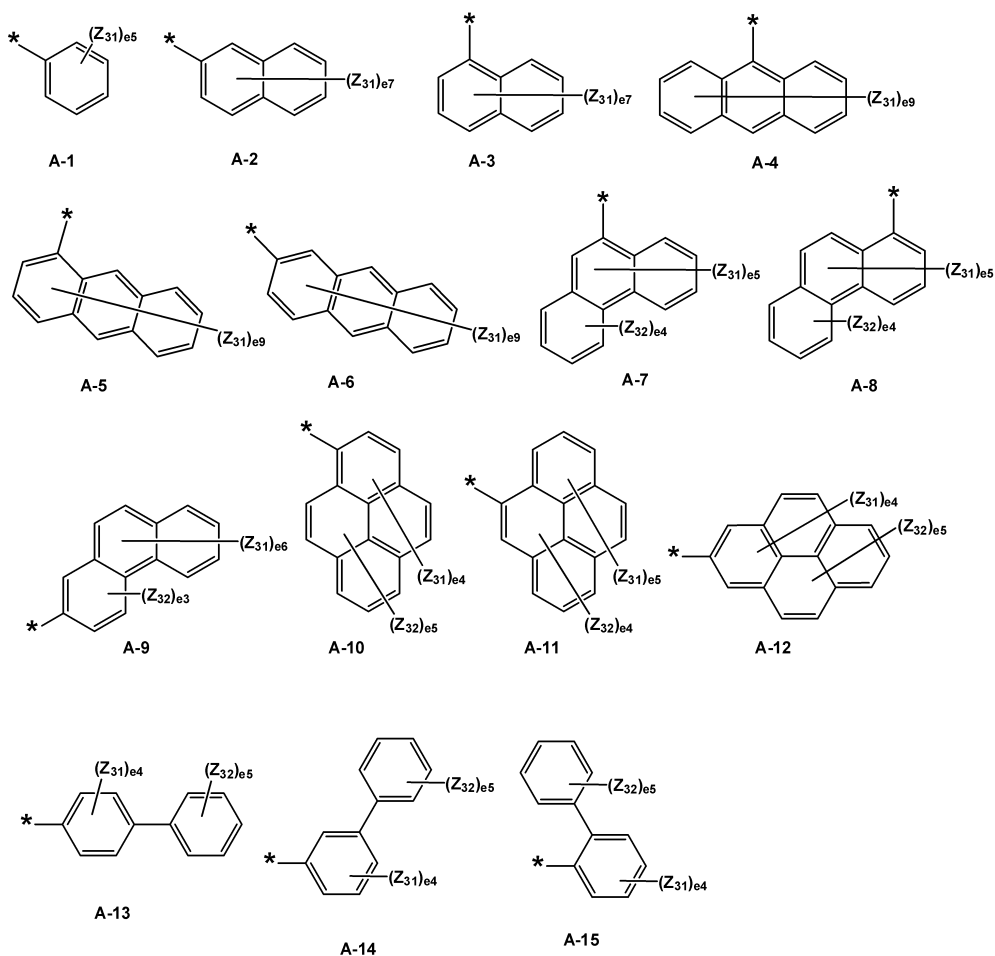
중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기;

중에서 선택되고,

상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 R₁은 하기 화학식 A-1 내지 A-15 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:



상기 화학식 A-1 내지 A-15 중,

Z₃₁ 및 Z₃₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알케닐기, C₁-C₂₀알키닐기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 트리아지닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택되고,

상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜기 중에서 선택되고,

e2는 1 또는 2이고,

e3는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

e4는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

e5는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

e6은 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

e7은 1 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

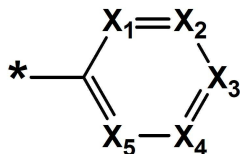
e9는 1 내지 9의 정수 중에서 선택되고,

* 은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 R₂는 하기 화학식 2로 표시되는, 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 2>



상기 화학식 2 중,

X₁은 N 또는 CAr₁이고,

X₂는 N 또는 CAr₂이고,

X₃은 N 또는 CAr₃이고,

X₄는 N 또는 CAr₄이고,

X₅는 N 또는 CAr₅이고,

Ar₁ 내지 Ar₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂), 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고, Ar₁ 내지 Ar₅는 선택적으로 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성하되,

(i) X₁ 내지 X₅ 중 적어도 하나가 N이거나, (ii) Ar₁ 내지 Ar₅ 중 적어도 하나가 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리기 또는 전자끌는기이고,

치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 및 치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는,

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기(aryloxy), C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio), C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

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

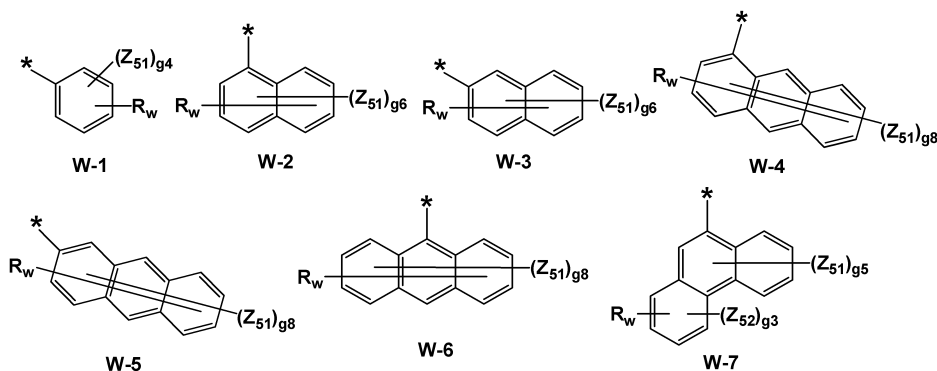
중에서 선택되고,

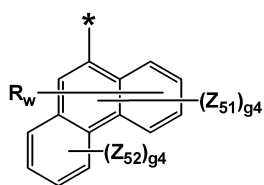
상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

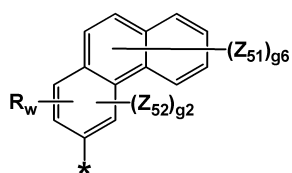
청구항 6

제1항에 있어서, 상기 R₂는 하기 화학식 W-1 내지 W-16 및 N-1 내지 N-59 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:

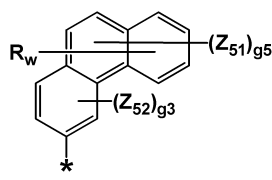




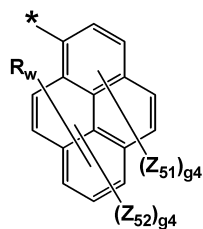
W-8



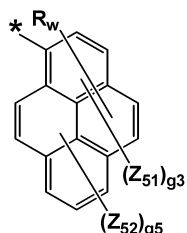
W-9



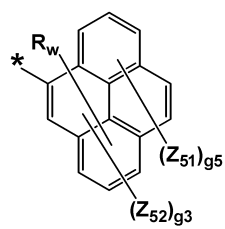
W-10



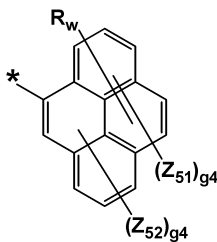
W-11



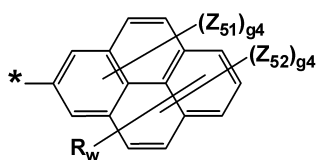
W-12



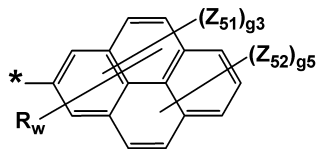
W-13



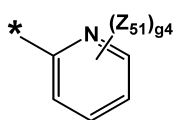
W-14



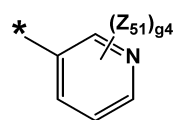
W-15



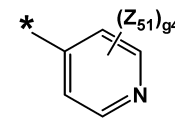
W-16



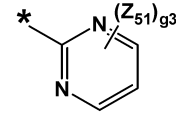
N-1



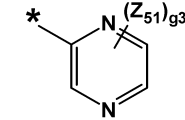
N-2



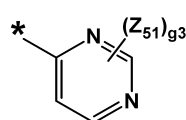
N-3



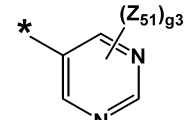
N-4



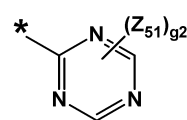
N-5



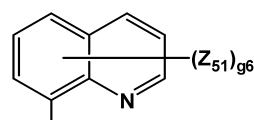
N-6



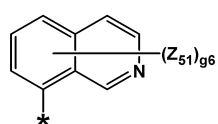
N-7



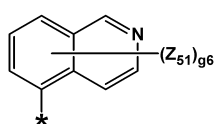
N-8



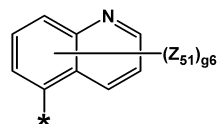
N-9



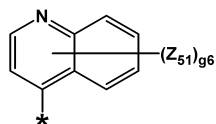
N-10



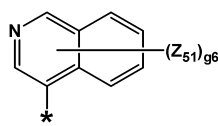
N-11



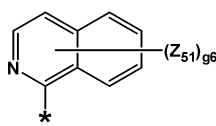
N-12



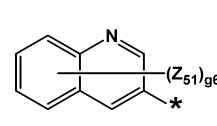
N-13



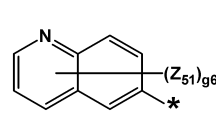
N-14



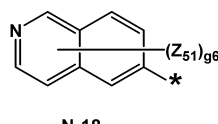
N-15



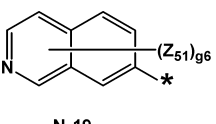
N-16



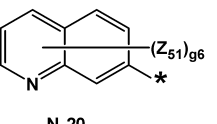
N-17



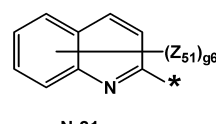
N-18



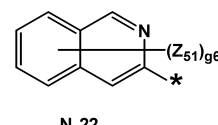
N-19



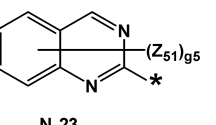
N-20



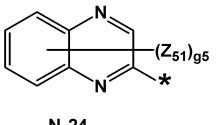
N-21



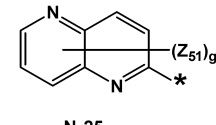
N-22



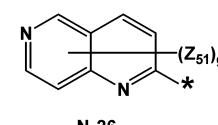
N-23



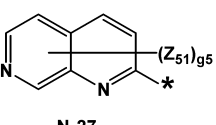
N-24



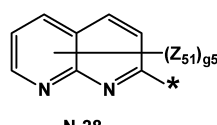
N-25



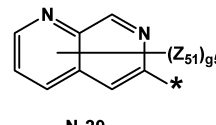
N-26



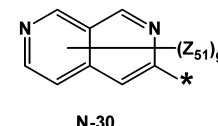
N-27



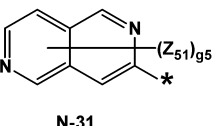
N-28



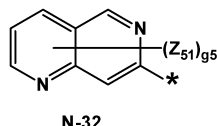
N-29



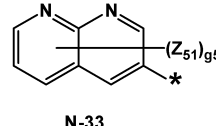
N-30



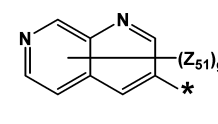
N-31



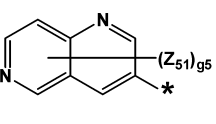
N-32



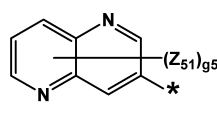
N-33



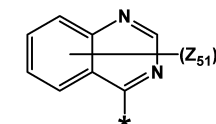
N-34



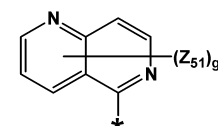
N-35



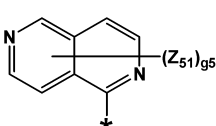
N-36



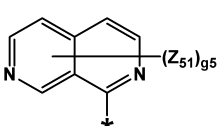
N-37



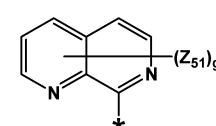
N-38



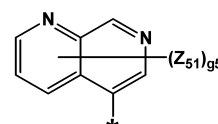
N-39



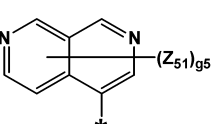
N-40



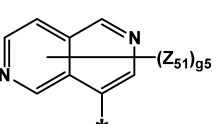
N-41



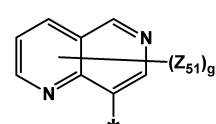
N-42



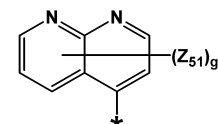
N-43



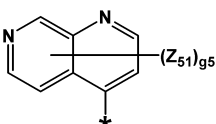
N-44



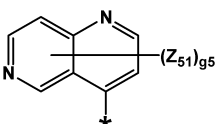
N-45



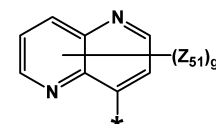
N-46



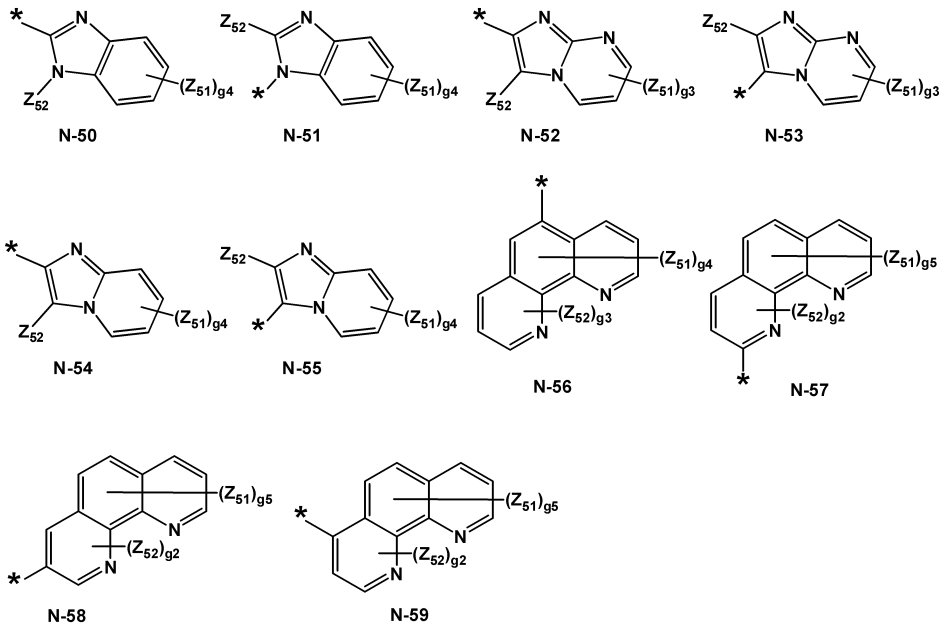
N-47



N-48



N-49



상기 화학식 W-1 내지 W-16 및 N-1 내지 N-59 중,

R_w 는 시아노기, C_1 - C_{20} 플루오로알킬기 및 상기 화학식 N-1 내지 N-59 중에서 선택되고,

Z_{51} 및 Z_{52} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 플루오로알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 이미다졸일기, 피라졸기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 트리아지닐기, 인다졸일기, 푸리닐(puriny)기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기;

중에서 선택된 어느 하나이고,

g_2 은 0 내지 2의 정수이고,

g_3 은 0 내지 3의 정수이고,

g_4 는 0 내지 4의 정수이고,

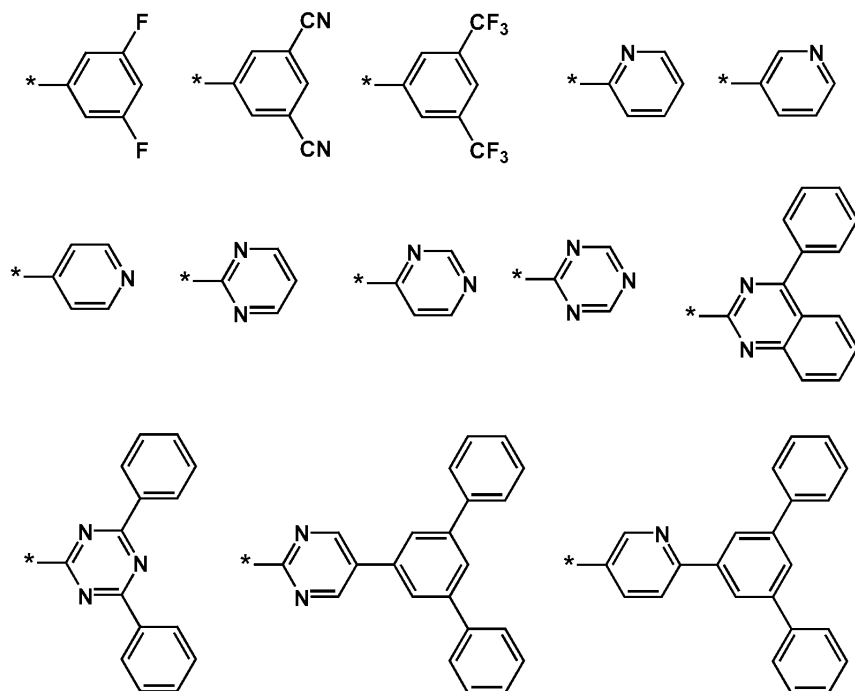
g_5 는 0 내지 5의 정수이고,

g_6 는 0 내지 6의 정수이고,

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 7

제1항에 있어서, 상기 R₂는 하기 구조들 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:



상기 구조들 중,

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 8

제1항에 있어서, 상기 R₃ 내지 R₁₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 비페닐기 및 터페닐기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 비페닐기 및 터페닐기;

중에서 선택되고,

상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방

향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

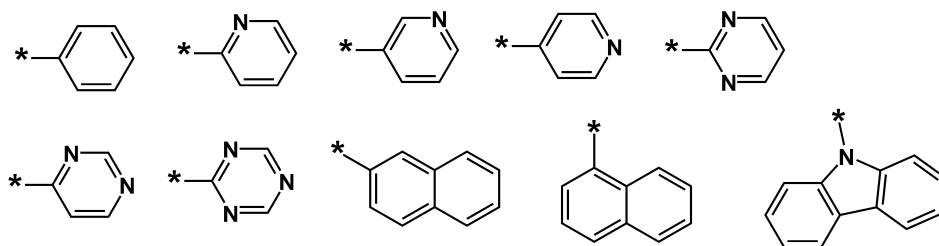
청구항 9

제1항에 있어서, 상기 R_4 및 R_9 중 적어도 하나는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기; 및 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 트리아지닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기;

중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 10

제1항에 있어서, 상기 R_4 및 R_9 는 서로 독립적으로 하기 구조들 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:

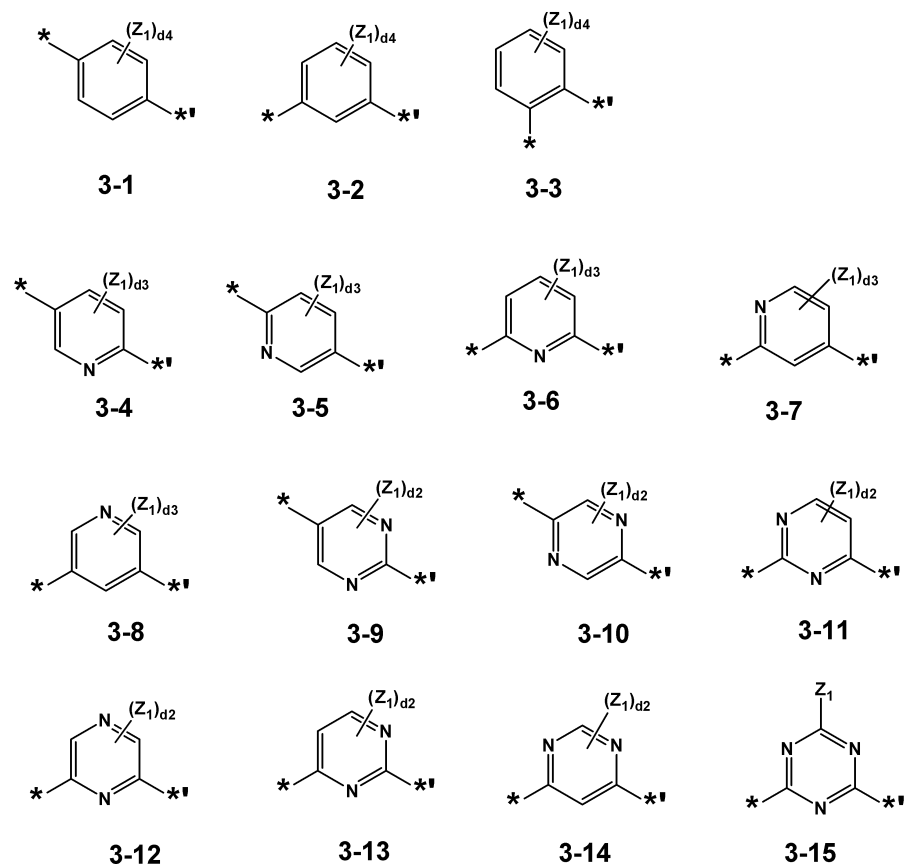


상기 구조들 중,

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 11

제1항에 있어서, 상기 L₁은 하기 화학식 3-1 내지 3-15 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:



상기 화학식 3-1 내지 3-15 중,

Z₁은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 트리아지닐기, 벤조이미다졸일기, 페난트롤리닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

d₂는 0 내지 2 중에서 선택된 정수이고,

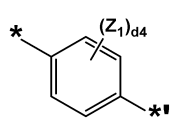
d₃는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

d₄는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

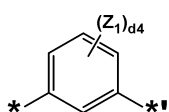
* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 12

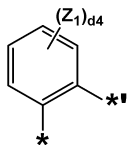
제1항에 있어서, 상기 L_2 는 하기 화학식 3-1 내지 3-58 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:



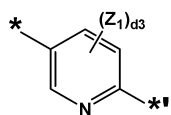
3-1



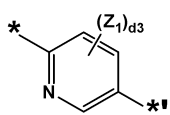
3-2



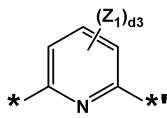
3-3



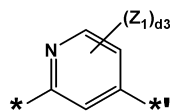
3-4



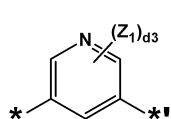
3-5



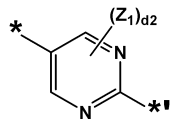
3-6



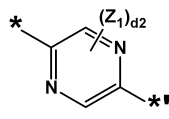
3-7



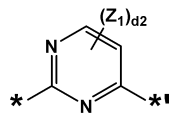
3-8



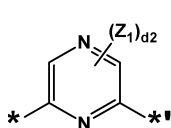
3-9



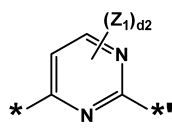
3-10



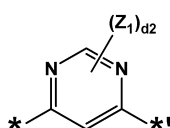
3-11



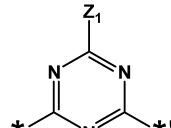
3-12



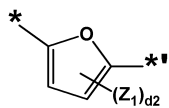
3-13



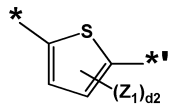
3-14



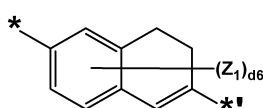
3-15



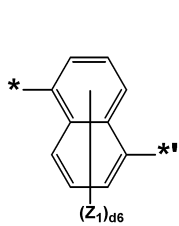
3-16



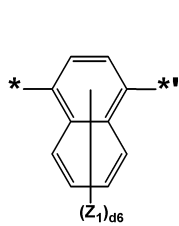
3-17



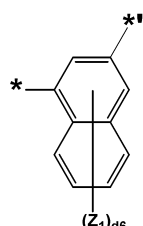
3-18



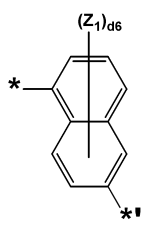
3-19



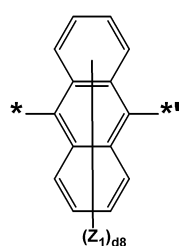
3-20



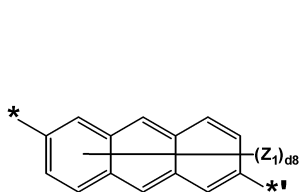
3-21



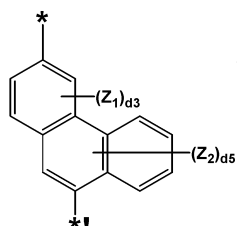
3-22



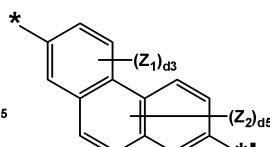
3-23



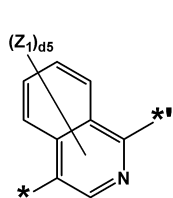
3-24



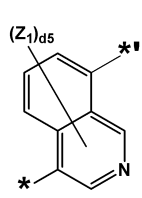
3-25



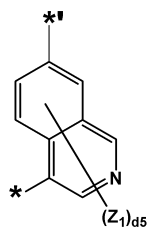
3-26



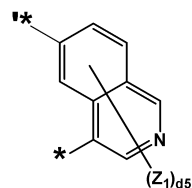
3-27



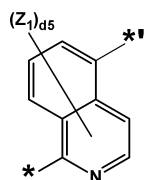
3-28



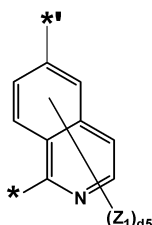
3-29



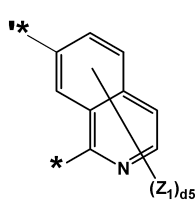
3-30



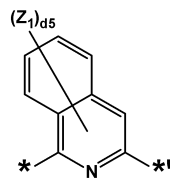
3-31



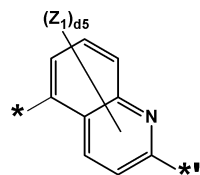
3-32



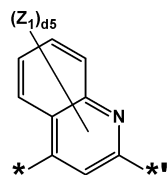
3-33



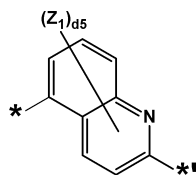
3-34



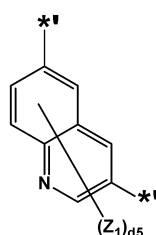
3-35



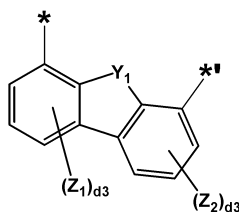
3-36



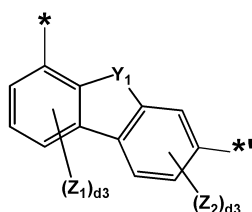
3-37



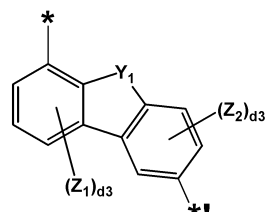
3-38



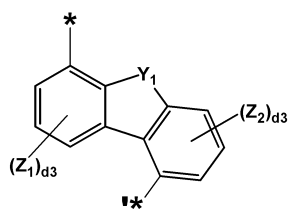
3-39



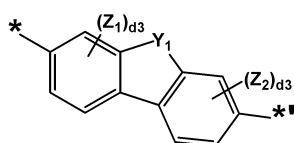
3-40



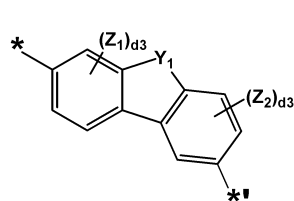
3-41



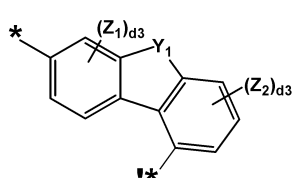
3-42



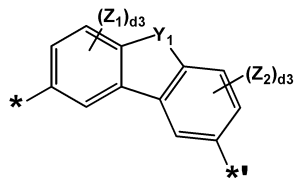
3-43



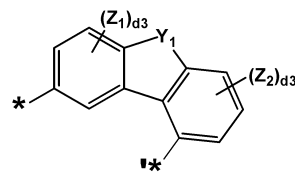
3-44



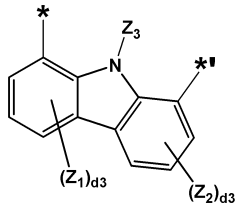
3-45



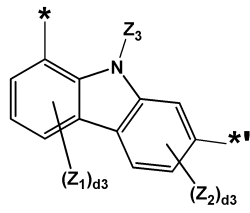
3-46



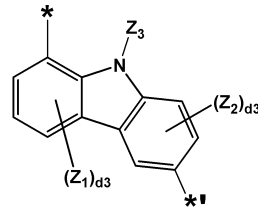
3-47



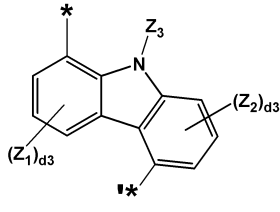
3-48



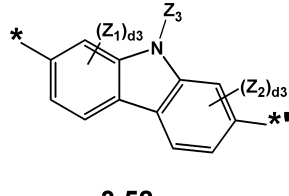
3-49



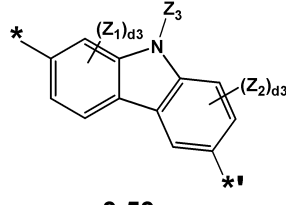
3-50



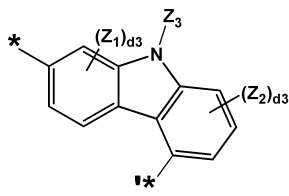
3-51



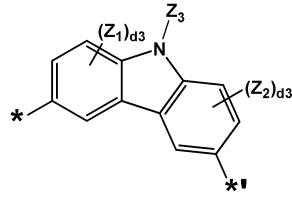
3-52



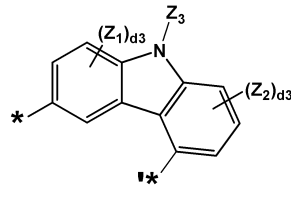
3-53



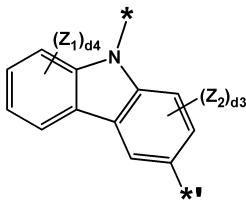
3-54



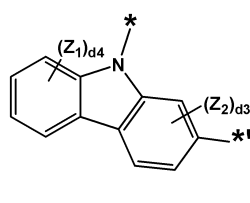
3-55



3-56



3-57



3-58

상기 화학식 3-1 내지 3-58 중,

Z_1 은 O, S, $C(Z_3)(Z_4)$, $N(Z_5)$ 또는 $Si(Z_6)(Z_7)$ 이고;

Z_1 내지 Z_7 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라조니, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 트리아지닐기, 벤조이미다졸일기, 페난트롤리닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

Z_3 과 Z_4 은 선택적으로 서로 결합하여 스피로 구조를 형성하고,

Z_6 과 Z_7 은 선택적으로 서로 결합하여 스피로 구조를 형성하고,

d_2 는 0 내지 2 중에서 선택된 정수이고,

d_3 는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

d_4 는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

d_5 는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

d6은 0 내지 6 중에서 선택된 정수이고,
d8은 0 내지 8 중에서 선택된 정수이고,
* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 13

제1전극;
상기 제1전극에 대향하는 제2전극; 및
상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고,
상기 유기층은 제1항 내지 제12항 중 어느 한 항의 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,
상기 제1전극이 애노드이고,
상기 제2전극이 캐소드이고,
상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고,
상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층, 발광 보조층 및 전자 저지층 중에서 선택된 적어도 하나를 포함하고,
상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 15

제13항에 있어서,
상기 발광층이 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 16

제15항에 있어서,
상기 발광층이 포스핀옥사이드계 화합물을 더 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 17

제15항에 있어서,
상기 정공 저지층이 포스핀옥사이드계 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 18

제15항에 있어서,
상기 정공 수송 영역이 전하-생성 물질을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 19

제14항에 있어서,
상기 정공 저지층이 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 20

제14항에 있어서,

상기 전자 수송층이 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[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

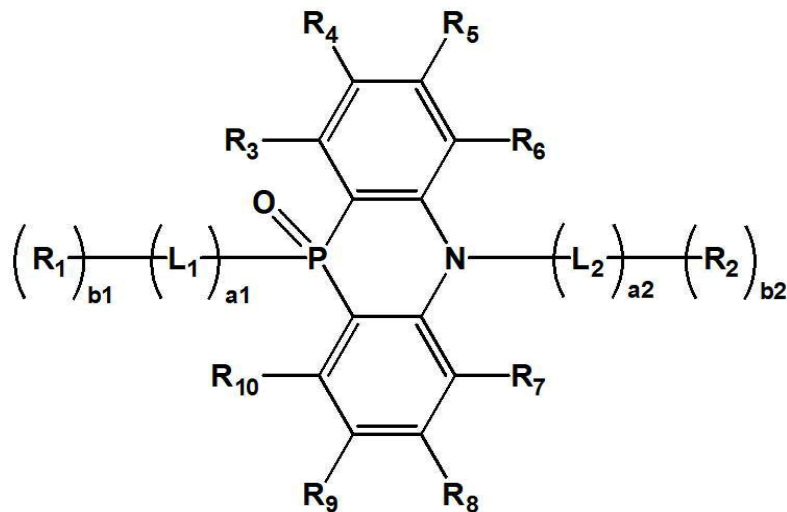
해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

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

[0006] <화학식 1>



[0007]

[0008] 상기 화학식 1 중,

[0009] L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0010] R_1 및 R_3 내지 R_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, -Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}), P(=O)(Q_{31})(Q_{32}), 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기 및 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(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group), 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

[0011] R_2 는 (i) 적어도 하나의 전자끄는기(electron-withdrawing group)로 치환된 C_6-C_{60} 아릴기 또는 (ii) 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 합질소 고리기이고,

[0012] a_1 은 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

[0013] a_2 는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

[0014] b_1 은 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

[0015] b_2 는 1 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

[0016] 치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-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 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 및 치환된 π 전자 결핍성 합질소 고리기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는,

[0017] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기;

[0018] 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(aryloxy), C_6-C_{60} 아릴티오기(arylthio), C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 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;

[0019] 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;

[0020] 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, 비페닐기 및 터페닐기 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

[0021] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$;

[0022] 중에서 선택되고,

[0023] 상기 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} 시클

로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

[0024] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상술한 바와 같은 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함하는, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0025] 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있다.

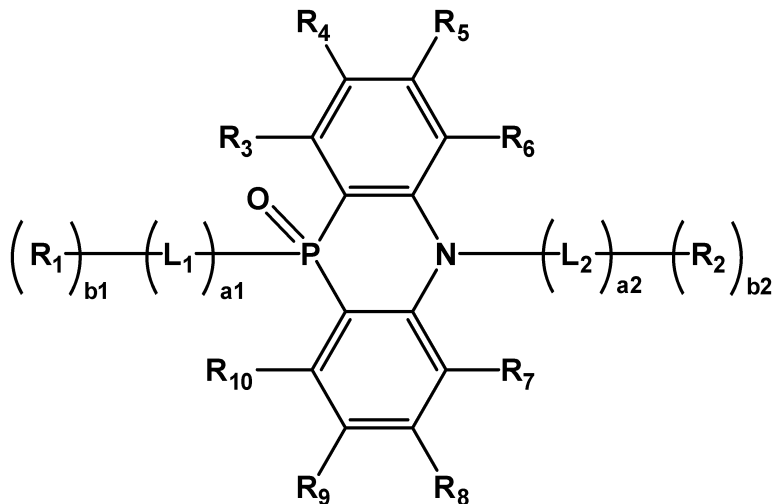
도면의 간단한 설명

[0026] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0027] 상기 헤테로시클릭 화합물은, 하기 화학식 1로 표시된다:

[0028] <화학식 1>



[0029]

[0030] 상기 화학식 1 중 L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

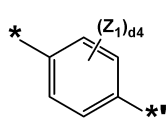
[0031] 일 구현예에 따르면, 상기 L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 나프토플루오렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이속사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디벤조카바졸 그룹; 및

[0032] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 벤조나프토피라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 나프토플루오렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이속사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 디벤조티오펜

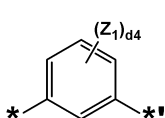
그룹, 벤조카바졸 그룹 및 디벤조카바졸그룹;

[0033] 중에서 선택될 수 있다.

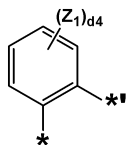
[0034] 다른 구현예에 따르면, 상기 L₁은 하기 화학식 3-1 내지 3-15 중에서 선택될 수 있다.



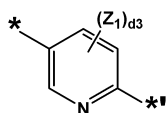
3-1



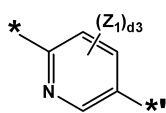
3-2



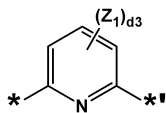
3-3



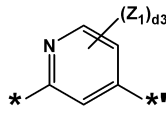
3-4



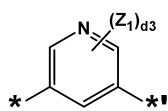
3-5



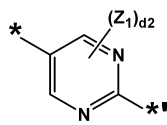
3-6



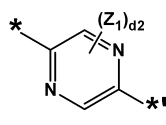
3-7



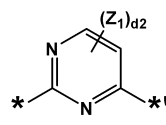
3-8



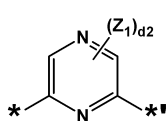
3-9



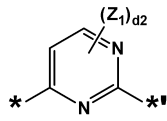
3-10



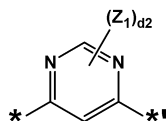
3-11



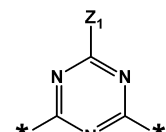
3-12



3-13



3-14



3-15

[0035]

[0036] 상기 화학식 3-1 내지 3-15 중,

[0037] Z₁은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 트리아지닐기, 벤조이미다졸일기, 페난트롤리닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있고,

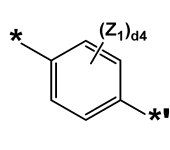
[0038] d₂는 0 내지 2 중에서 선택된 정수일 수 있고,

[0039] d₃는 0 내지 3 중에서 선택된 정수일 수 있고,

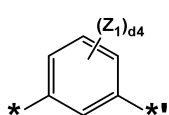
[0040] d₄는 0 내지 4 중에서 선택된 정수일 수 있고,

[0041] * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

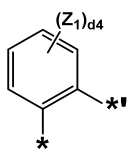
[0042] 일 구현예에 따르면, 상기 L₂는 하기 화학식 3-1 내지 3-58 중에서 선택될 수 있다.



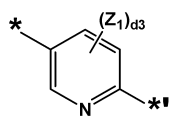
3-1



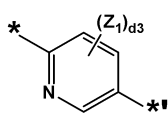
3-2



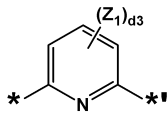
3-3



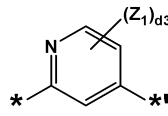
3-4



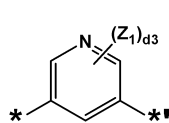
3-5



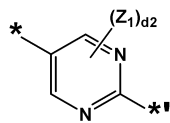
3-6



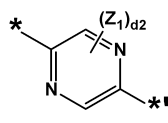
3-7



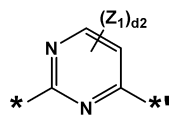
3-8



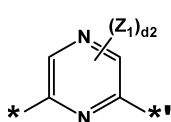
3-9



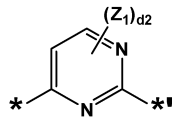
3-10



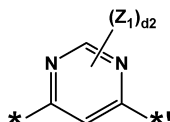
3-11



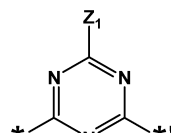
3-12



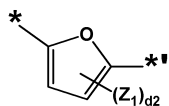
3-13



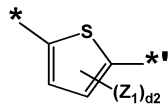
3-14



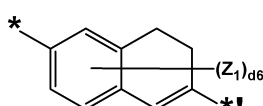
3-15



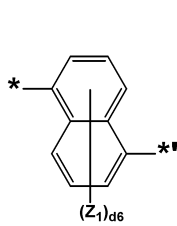
3-16



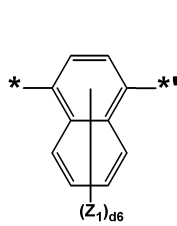
3-17



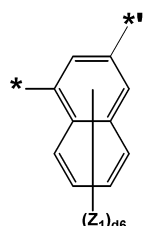
3-18



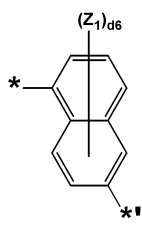
3-19



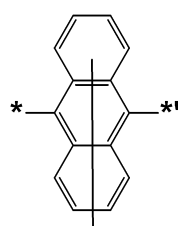
3-20



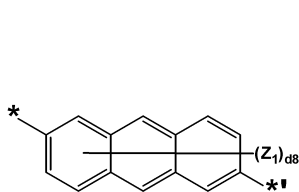
3-21



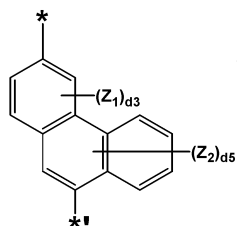
3-22



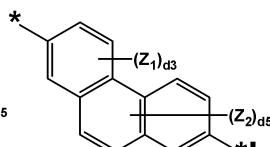
3-23



3-24

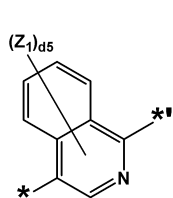


3-25

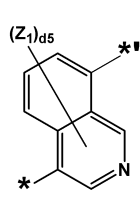


3-26

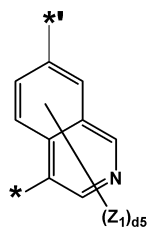
[0045]



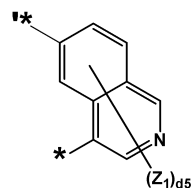
3-27



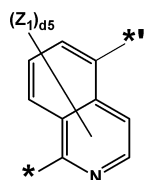
3-28



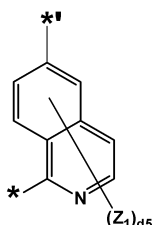
3-29



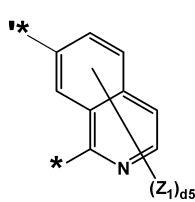
3-30



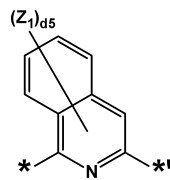
3-31



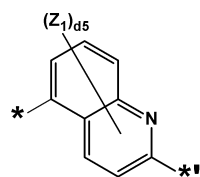
3-32



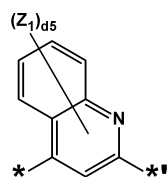
3-33



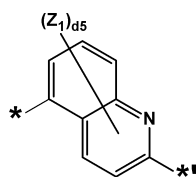
3-34



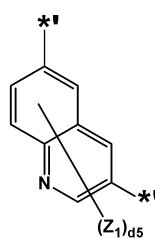
3-35



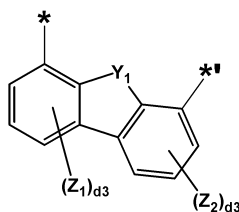
3-36



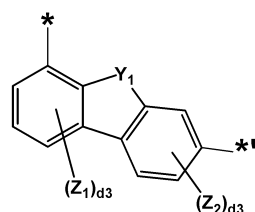
3-37



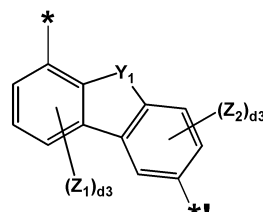
3-38



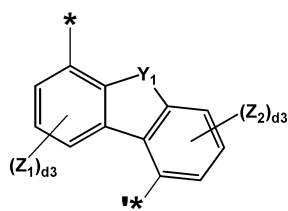
3-39



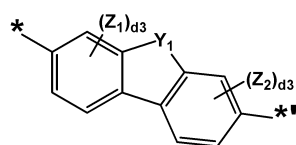
3-40



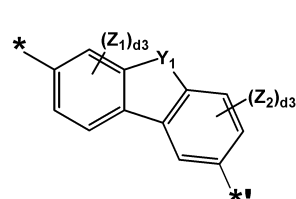
3-41



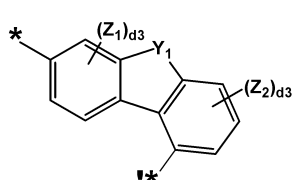
3-42



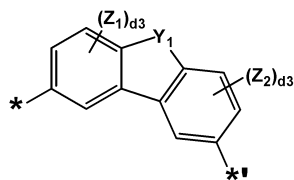
3-43



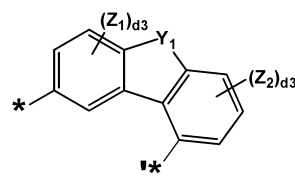
3-44



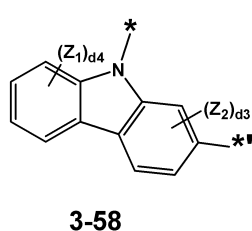
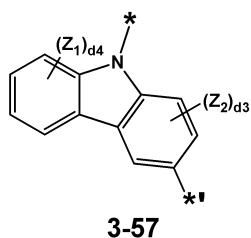
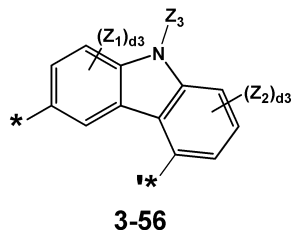
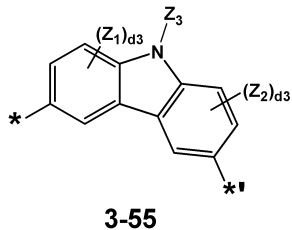
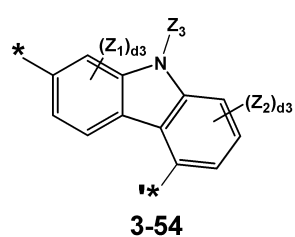
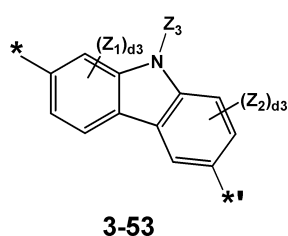
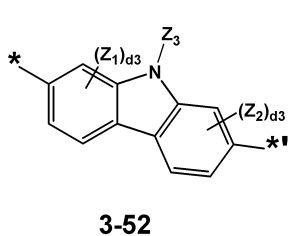
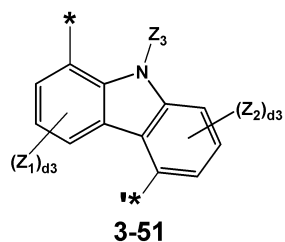
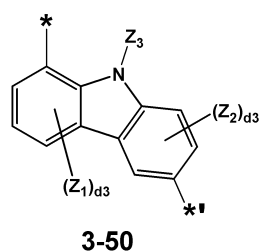
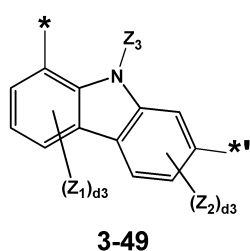
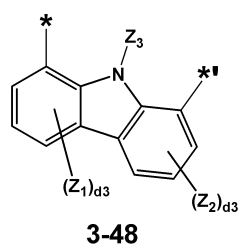
3-45



3-46



3-47



상기 화학식 3-1 내지 3-58 중, Y_1 은 O, S, $C(Z_3)(Z_4)$, $N(Z_5)$ 또는 $Si(Z_6)(Z_7)$ 일 수 있다.

상기 화학식 3-1 내지 3-58 중, Z_1 내지 Z_7 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 트리아지닐기, 벤조이미다졸일기, 페난트롤리닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

Z_3 과 Z_4 은 선택적으로 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있고,

Z_6 과 Z_7 은 선택적으로 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있고,

d_2 는 0 내지 2 중에서 선택된 정수일 수 있고,

d_3 는 0 내지 3 중에서 선택된 정수일 수 있고,

d_4 는 0 내지 4 중에서 선택된 정수일 수 있고,

d_5 는 0 내지 5 중에서 선택된 정수일 수 있고,

d_6 는 0 내지 6 중에서 선택된 정수일 수 있고,

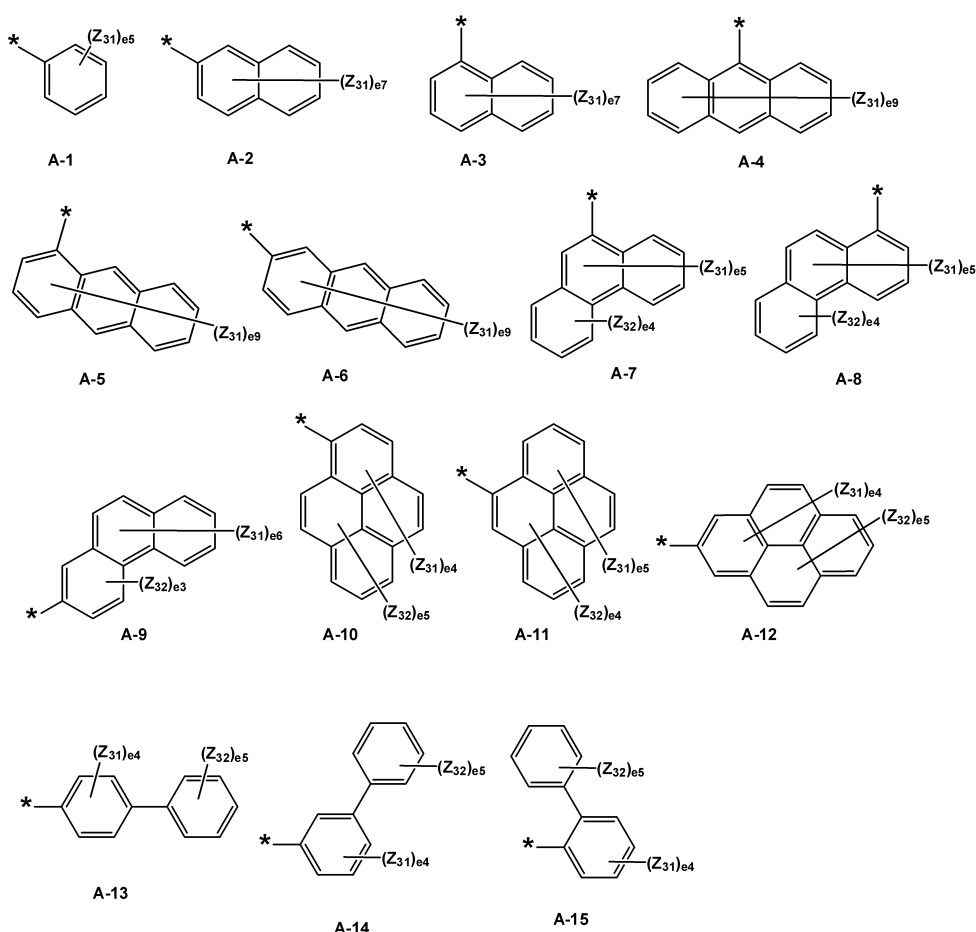
- [0059] d8은 0 내지 8 중에서 선택된 정수일 수 있고,
- [0060] * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0061] 상기 화학식 1 중 R_1 및 R_3 내지 R_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, $-\text{Si}(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $\text{P}(=\text{O})(Q_{31})(Q_{32})$, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알키닐기 및 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group), 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0062] 일 구현예에 따르면, 상기 R_1 및 R_3 내지 R_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, $-\text{Si}(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헨테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기; 및
- [0063] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, $-\text{Si}(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헨테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기;
- [0064] 중에서 선택될 수 있다.
- [0065] 다른 구현예에 따르면, 상기 R_1 은 수소, 중수소, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기; 및
- [0066] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, $-\text{Si}(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헨테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레

널기, 폐날레널기, 폐난트레널기, 안트라세널기, 플루오란테널기, 트리페닐레널기, 피리디널기, 피리미딜기, 퀴놀리널기, 이소퀴놀리널기, 벤조퀴놀리널기, 나프티리디널기, 퀴녹살리널기, 퀴나졸리널기, 카바졸일기, 폐난트리디널기, 아크리디널기, 폐난트롤리널기, 페나지널기, 트리아지널기, 디벤조퓨라널기, 디벤조티오페널기, 비페닐기 및 터페닐기;

[0067] 중에서 선택되고,

[0068] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0069] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 R₁은 하기 화학식 A-1 내지 A-15 중에서 선택될 수 있다.

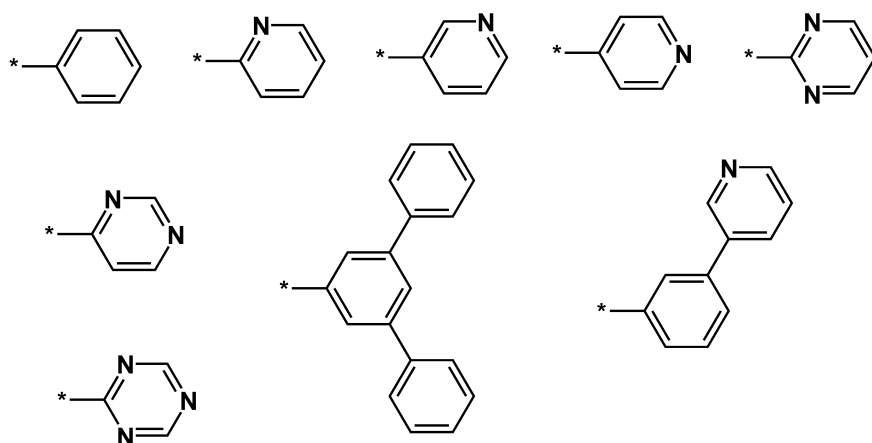


[0071] 상기 화학식 A-1 내지 A-15 중,

[0072] Z₃₁ 및 Z₃₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알케닐기, C₁-C₂₀알키닐기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 트리아지닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중 에서 선택될 수 있다.

[0073] 일 구현예에 따르면, 상기 Z_{31} 및 Z_{32} 는 서로 독립적으로 수소 또는 페닐기이다.

[0074] 또 하나의 구현예에 따르면, 상기 R₁은 하기 구조들 중에서 선택될 수 있다.



[0075]

[0076] 상기 구조들 중,

[0077] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0078] 일 구현예에 따르면, 상기 R₂는 (i) 적어도 하나의 전자끄는기(electron-withdrawing group)로 치환된 C₆-C₆₀아릴기 또는 (ii) 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리기일 수 있다.

[0079] 일 구현예에 따르면, 상기 전자끄는기는 -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기 또는 C₁-C₂₀플루오로알킬기일 수 있고, 이에 한정되지 않는다.

[0080] 다른 구현예에 따르면, 상기 전자끄는기는 -F, -Cl, 시아노기, -CF₃ 또는 -CF₂CF₃일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

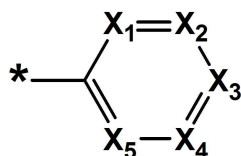
[0081] 일 구현예에 따르면, 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 의미한다.

[0082] 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 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.

[0083] 다른 구현예에 따르면, 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.

[0084] 일 구현예에 따르면, 상기 R₂는 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0085] <화학식 2>

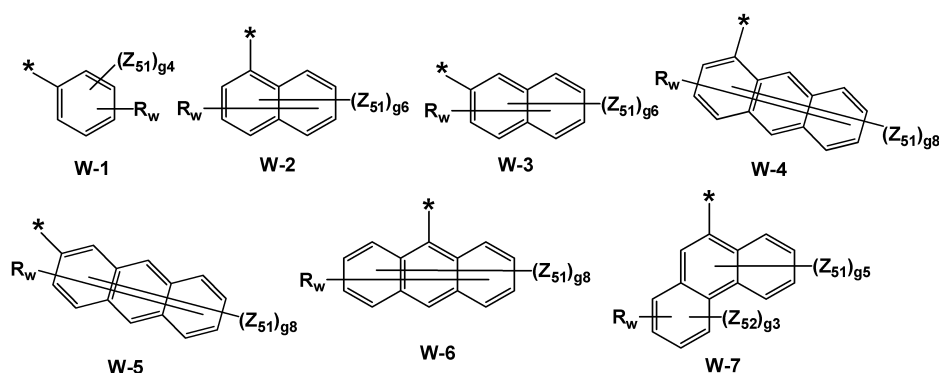


[0086]

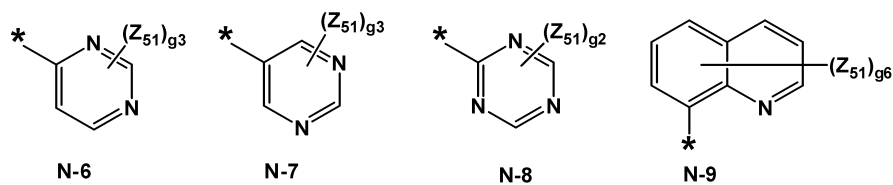
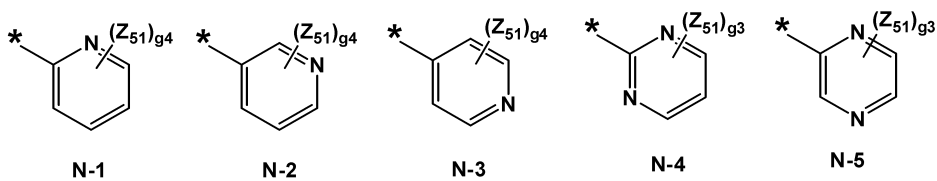
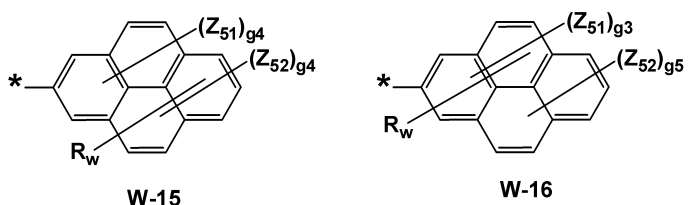
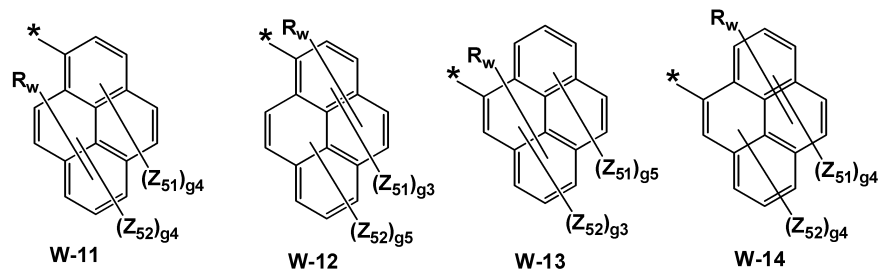
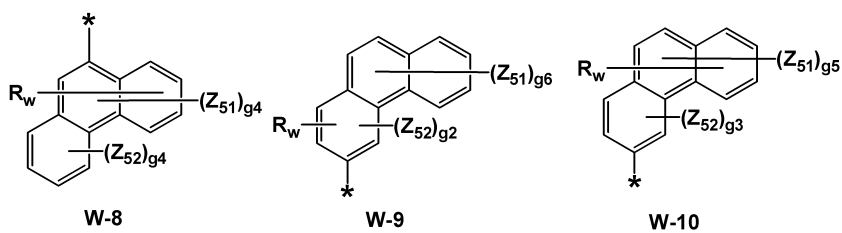
[0087] 상기 화학식 2 중, X₁은 N 또는 CAr₁일 수 있고,

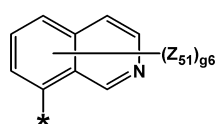
[0088] X₂는 N 또는 CAr₂일 수 있고,

- [0089] X_3 은 N 또는 CAr_3 일 수 있고,
- [0090] X_4 는 N 또는 CAr_4 일 수 있고,
- [0091] X_5 는 N 또는 CAr_5 일 수 있고,
- [0092] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0093] 상기 화학식 2 중, Ar_1 내지 Ar_5 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기 및 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 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고, Ar_1 내지 Ar_5 는 선택적으로 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성하되,
- [0094] (i) X_1 내지 X_5 중 적어도 하나가 N이거나, (ii) Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나가 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리기 또는 전자끄는기이고,
- [0095] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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 선택될 수 있다.
- [0096] 일 구현예에 따르면, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기 중에서 선택될 수 있다.
- [0097] 다른 구현예에 따르면, 상기 R_2 는 하기 화학식 W-1 내지 W-16 및 N-1 내지 N-59 중에서 선택될 수 있다.

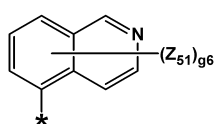


[0098]

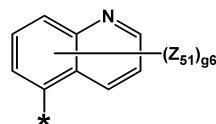




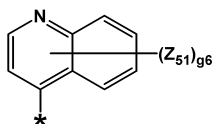
N-10



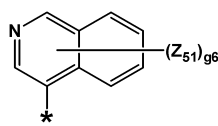
N-11



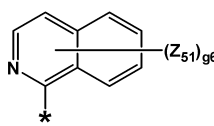
N-12



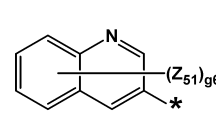
N-13



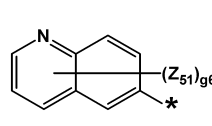
N-14



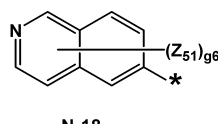
N-15



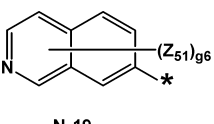
N-16



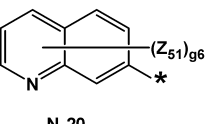
N-17



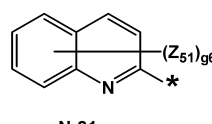
N-18



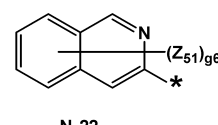
N-19



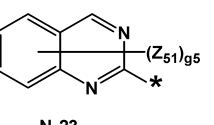
N-20



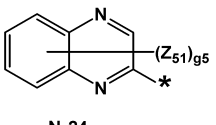
N-21



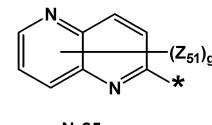
N-22



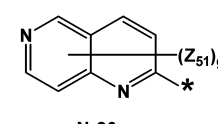
N-23



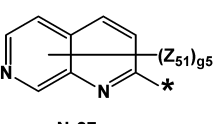
N-24



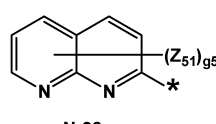
N-25



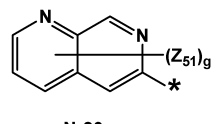
N-26



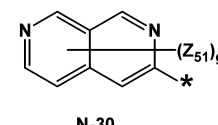
N-27



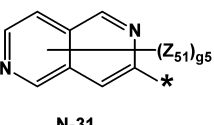
N-28



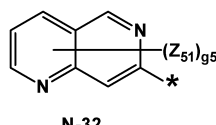
N-29



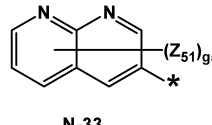
N-30



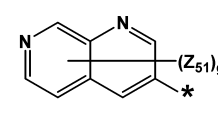
N-31



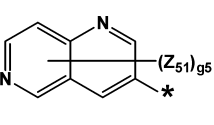
N-32



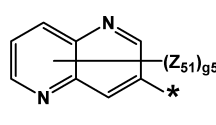
N-33



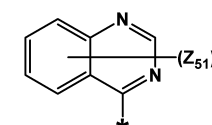
N-34



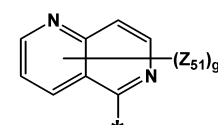
N-35



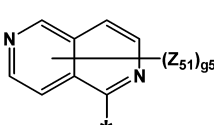
N-36



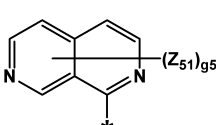
N-37



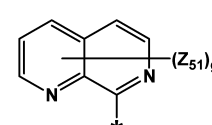
N-38



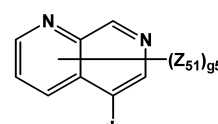
N-39



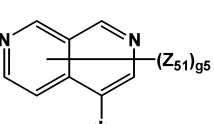
N-40



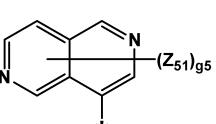
N-41



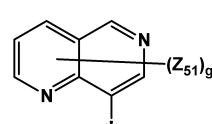
N-42



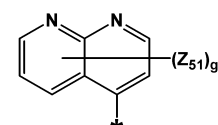
N-43



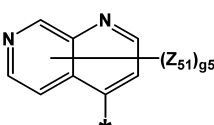
N-44



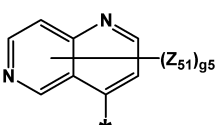
N-45



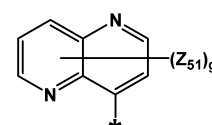
N-46



N-47



N-48

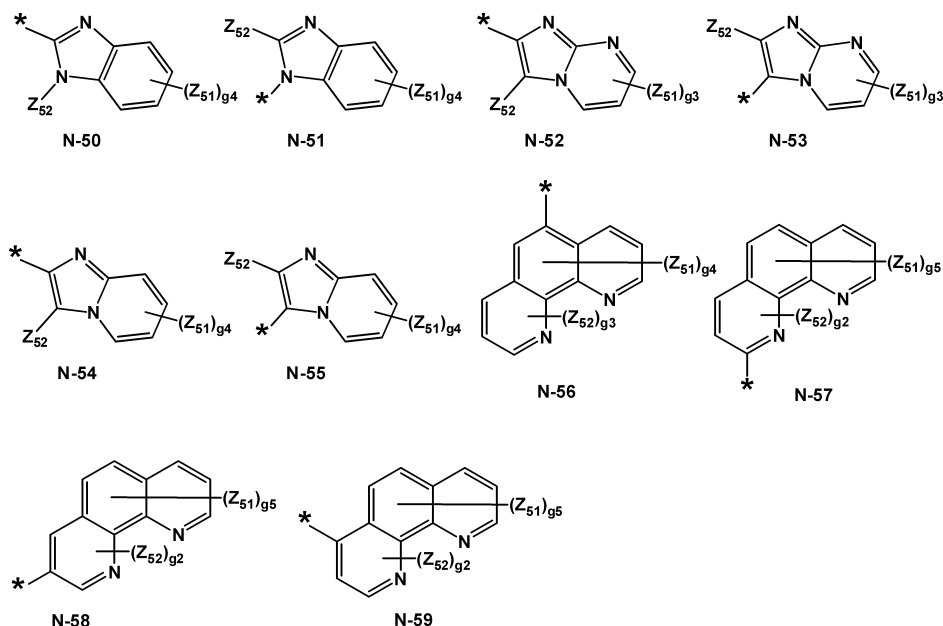


N-49

[0101]

[0102]

[0103]



[0104]

[0105]

상기 화학식 W-1 내지 W-16 및 N-1 내지 N-59 중, R_w 는 시아노기, C_1 - C_{20} 플루오로알킬기 및 상기 화학식 N-1 내지 N-59 중에서 선택될 수 있다.

[0106]

상기 화학식 W-1 내지 W-16 및 N-1 내지 N-59 중, Z_{51} 및 Z_{52} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 플루오로알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 이미다졸일기, 피라졸기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 트리아지닐기, 인다졸일기, 푸리닐(puriny)기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기;

[0107]

중에서 선택될 수 있고,

[0108]

g_2 는 0 내지 2의 정수이고,

[0109]

g_3 는 0 내지 3의 정수이고,

[0110]

g_4 는 0 내지 4의 정수이고,

[0111]

g_5 는 0 내지 5의 정수이고,

[0112]

g_6 는 0 내지 6의 정수이고,

[0113]

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0114]

또 하나의 구현예에 따르면, 상기 R_2 는 하기 구조들 중에서 선택될 수 있다.

[0115]

상기 화학식 W-1 내지 W-16 및 N-1 내지 N-59 중, Z_{51} 및 Z_{52} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 플루오로알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 이미다졸일기, 피라졸기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 트리아지닐기, 인다졸일기, 푸리닐

(purinyl)기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기;

[0116] 중에서 선택될 수 있고,

[0117] g2은 0 내지 2의 정수이고,

[0118] g3은 0 내지 3의 정수이고,

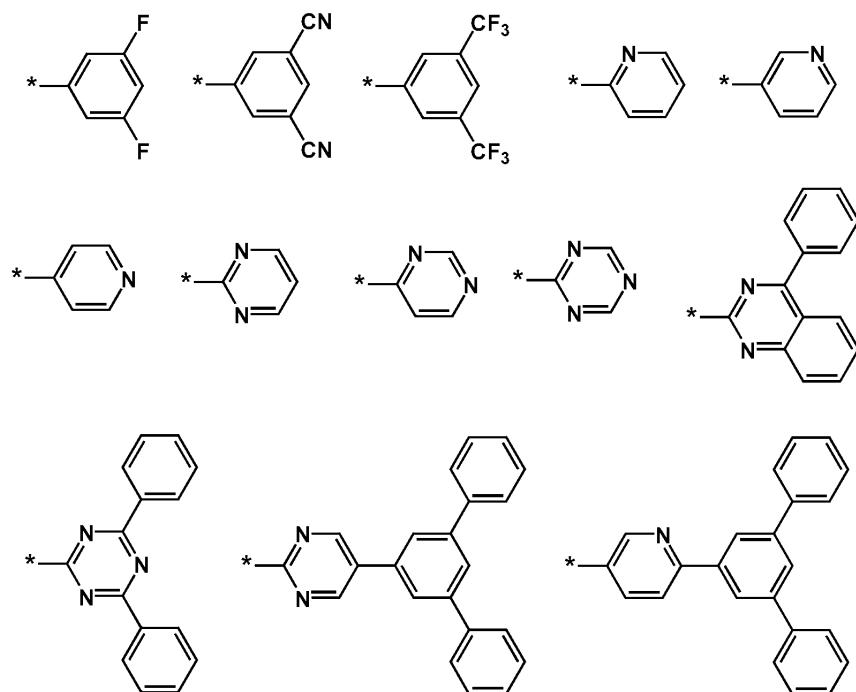
[0119] g4는 0 내지 4의 정수이고,

[0120] g5는 0 내지 5의 정수이고,

[0121] g6는 0 내지 6의 정수이고,

[0122] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0123] 또 하나의 구현예에 따르면, 상기 R₂는 하기 구조들 중에서 선택될 수 있다.

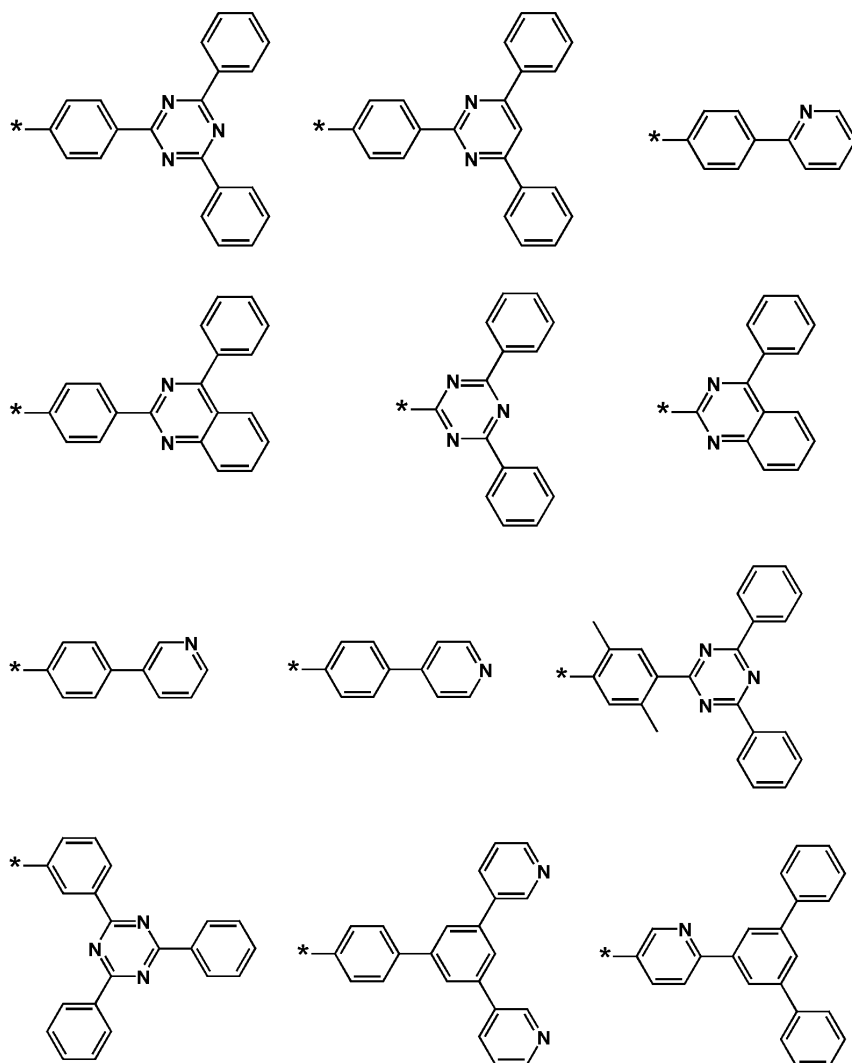


[0124]

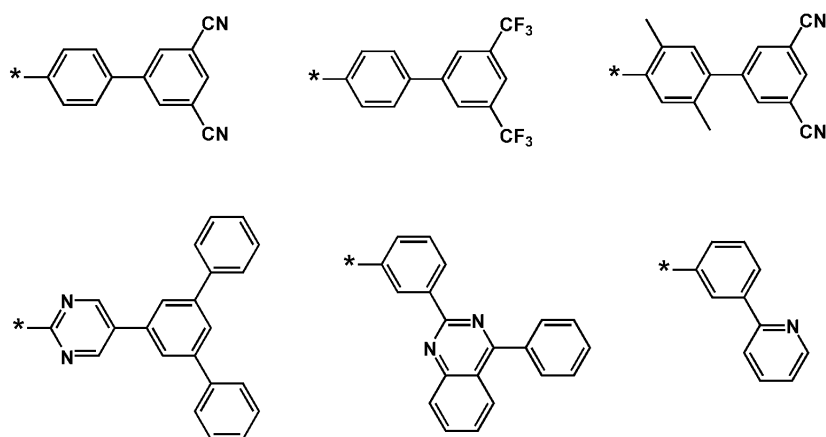
[0125] 상기 구조들 중,

[0126] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

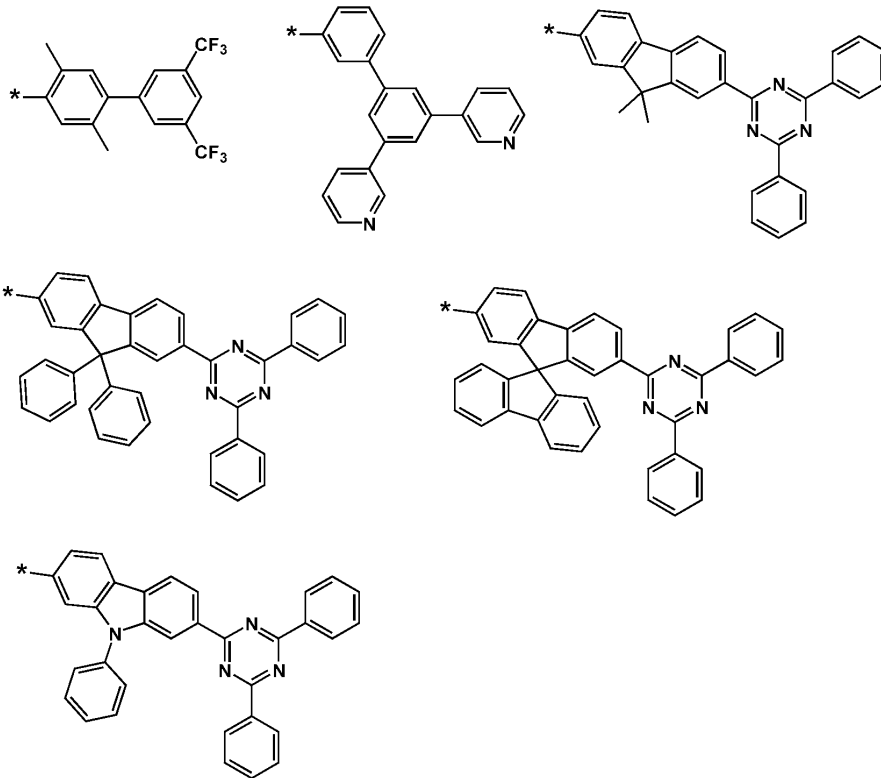
[0127] 일 구현예에 따르면, 상기 $-(L_2)_{a2}-(R_2)_{b2}$ 는 하기 구조들 중에서 선택될 수 있다.



[0128]



[0129]



[0130]

[0131]

상기 구조들 중,

[0132]

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0133]

일 구현예에 따르면, 상기 R_3 내지 R_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜기, 비페닐기 및 터페닐기; 및

[0134]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, -Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}), 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜기, 비페닐기 및 터페닐기;

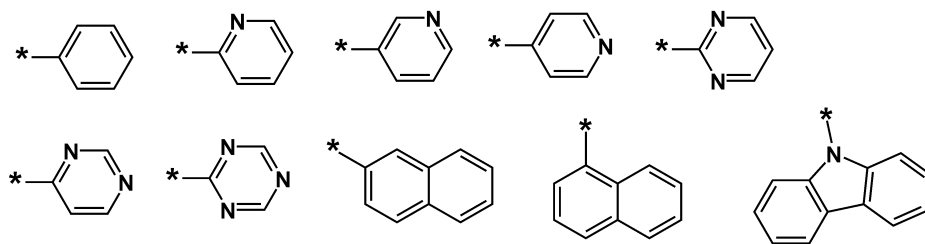
[0135]

중에서 선택되고,

[0136]

상기 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_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 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 선택될 수 있다.

[0137] 다른 구현예에 따르면, 상기 R_3 내지 R_{10} 은 서로 독립적으로, 수소 또는 하기 구조들 중에서 선택될 수 있다.



[0138]

[0139] 상기 구조들 중,

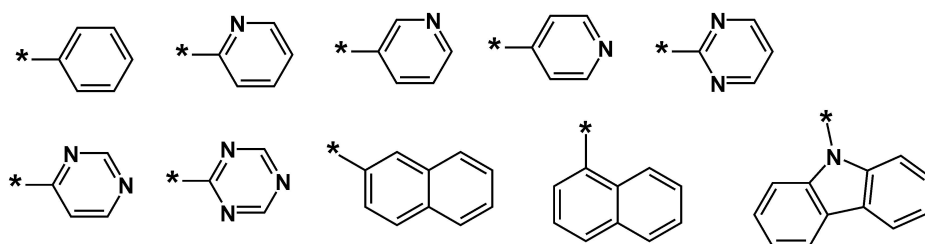
[0140] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0141] 일 구현예에 따르면, 상기 R_4 및 R_9 중 적어도 하나는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 비페닐기 및 터페닐기; 및

[0142] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 트리아지닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피리미딜기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 비페닐기 및 터페닐기;

[0143] 중에서 선택될 수 있다.

[0144] 다른 구현예에 따르면, 상기 R_4 및 R_9 는 서로 독립적으로 하기 구조들 중에서 선택될 수 있다.



[0145]

[0146] 상기 구조들 중,

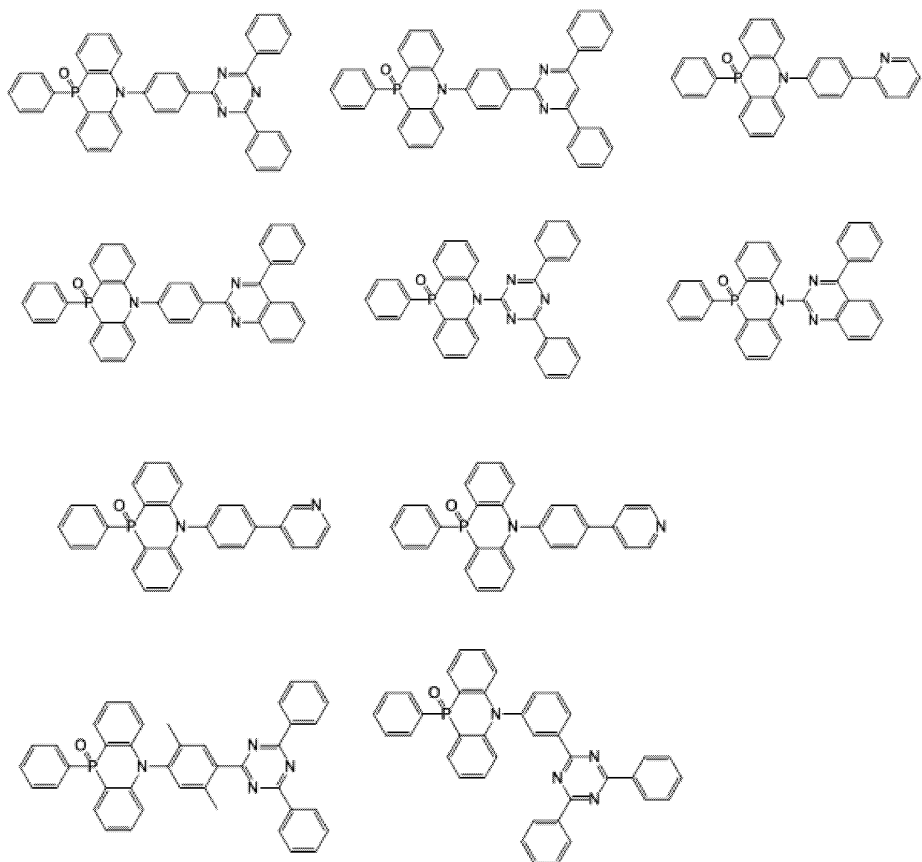
[0147] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0148] 일 구현예에 따르면, 상기 R_3 , R_5 내지 R_8 및 R_{10} 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, -Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}), 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 중에서 선택되고,

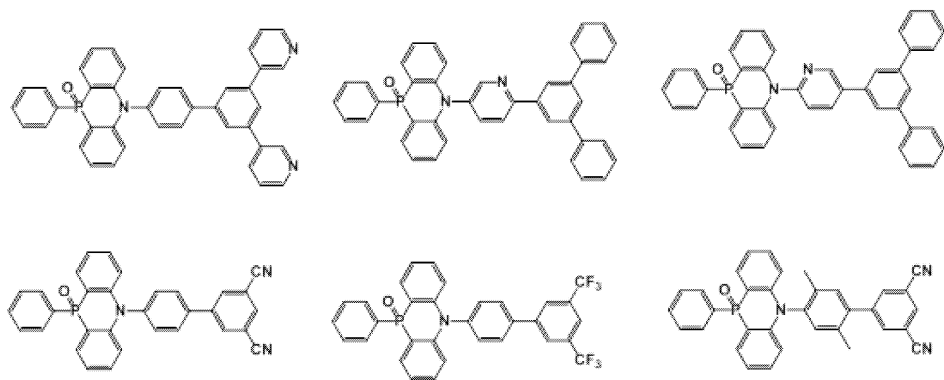
[0149] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{60} 알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_1 - C_{60} 알킬기로 치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0150] 또 하나의 구현예에 따르면, 상기 R_3 , R_5 내지 R_8 및 R_{10} 은 수소일 수 있다.

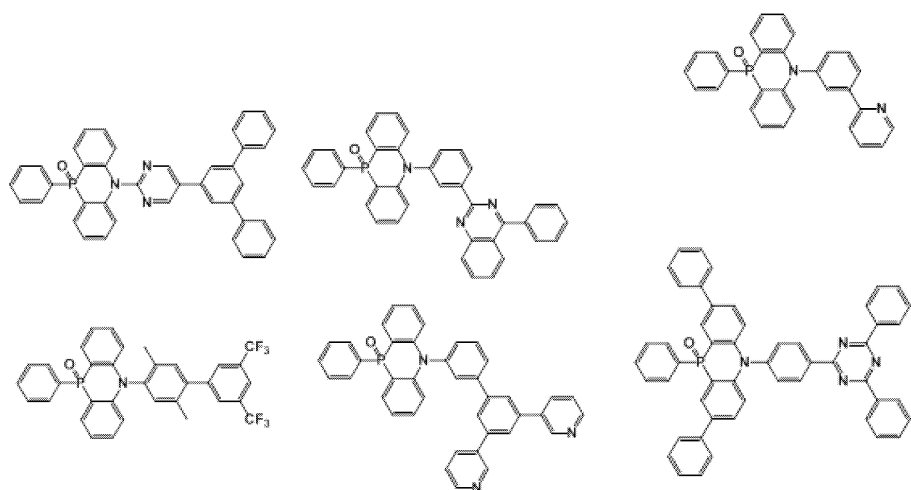
[0151] 일 구현예에 따르면, 상기 헤테로시클릭 화합물은 하기 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



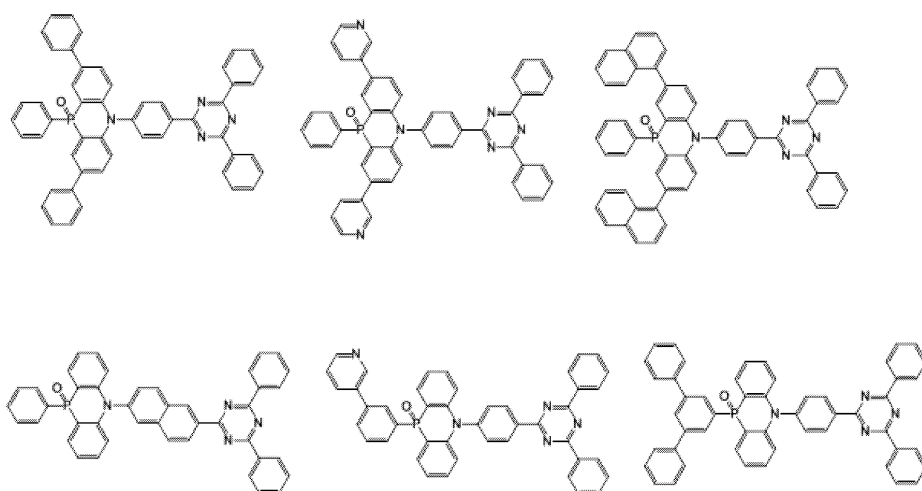
[0152]



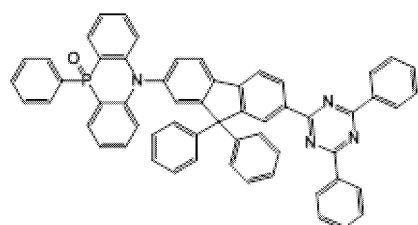
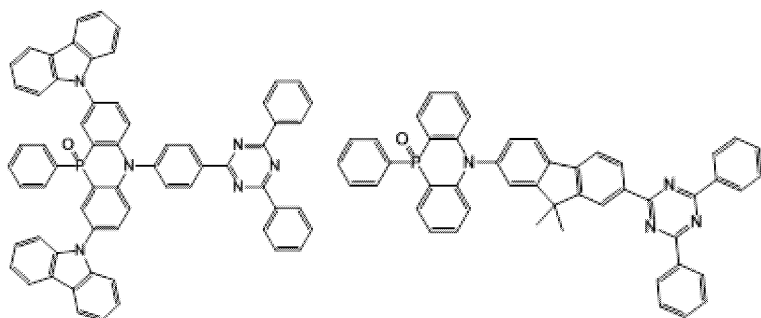
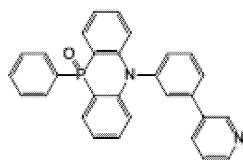
[0153]



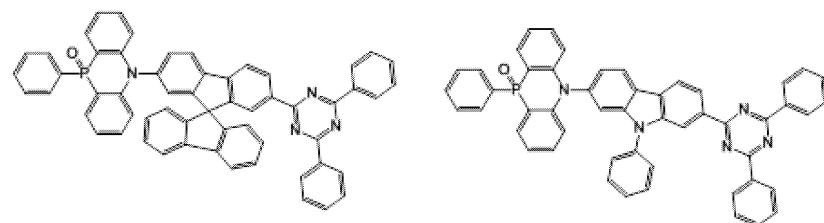
[0154]



[0155]



[0156]



[0157]

[0158] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 페노포스파진 코어에 전자 끄는 성질을 가진 치환기가 N-치환된 구조를 갖는 화합물로서, 포스핀옥사이드(P=O) 구조가 도입되어 있어 삼중항 에너지(triplet energy)가 높아 인광 재료로서 다양하게 적용이 가능하며, 상기 헤테로시클릭 화합물과 유사하지만 포스핀옥사이드 구조를 포함하지 않는 화합물이 일반적으로 녹색을 내는 것과 달리 상기 헤테로시클릭 화합물은 청색을 낸다.

[0159] 한편, 포스핀옥사이드 코어 자체만으로는 삼중항 에너지가 높아 인광 재료로서 적용시 다양하게 응용이 가능하나 소자에 호스트로서 적용할 경우에는 전자 특성이 낮아 구동전압이 크게 상승한다. 따라서, 이러한 현상을 방지하기 위하여 양쪽성(bipolar) 특성을 가지게 하기 위해서 상기 헤테로시클릭 화합물과 같이 전자 끄는 성질을 가진 치환기가 N-치환된 구조를 도입하여 전자 특성을 보완할 수 있다. 그 결과, 상기 헤테로시클릭 화합물을 소자에 적용할 경우에, 소자의 구동전압, 효율 및 수명을 개선할 수 있다.

[0160] 따라서, 상기 화학식 1로 표시된 헤테로시클릭 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는, 저구동 전압, 고전류밀도 및 고효율을 가질 수 있다.

[0161] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.

[0162] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 헤테로시클릭 화합물은 정공 수송 영역 및 발광층 중 적어도 하나에 포함될 수 있다. 또는, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극의 외측에

위치한 캡핑층 재료로 사용될 수 있다.

- [0163] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함하는, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0164] 본 명세서 중 "(유기층이) 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 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.
- [0165] 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.
- [0166] 일 구현예에 따르면,
- [0167] 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 애노드이고,
- [0168] 상기 유기 발광 소자의 제2전극은 캐소드이고,
- [0169] 상기 상기 유기 발광 소자의 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고,
- [0170] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층, 발광 보조층 및 전자 저지층 중에서 선택된 적어도 하나를 포함하고,
- [0171] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나를 포함한 전자 수송 영역을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 전자 수송 영역에 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물이 포함될 수 있다.
- [0172] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 전자 수송 영역이 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함하고, 상기 전자 수송층 및 전자 주입층 중 선택된 적어도 하나가 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0173] 상기 유기 발광 소자는, 상기 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 한 층은, 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 더 조합을 포함할 수 있다.
- [0174] 상기 유기 발광 소자에서, 상기 발광층은 도펀트 및 호스트를 포함하고, 상기 호스트는 안트라센계 화합물, 파이렌계 화합물 및 스파이로-바이폴루오렌계 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0175] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.
- [0176] 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.
- [0177] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0178] 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.
- [0179] 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.
- [0180] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을

형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 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.

[0181] 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.

[0182] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.

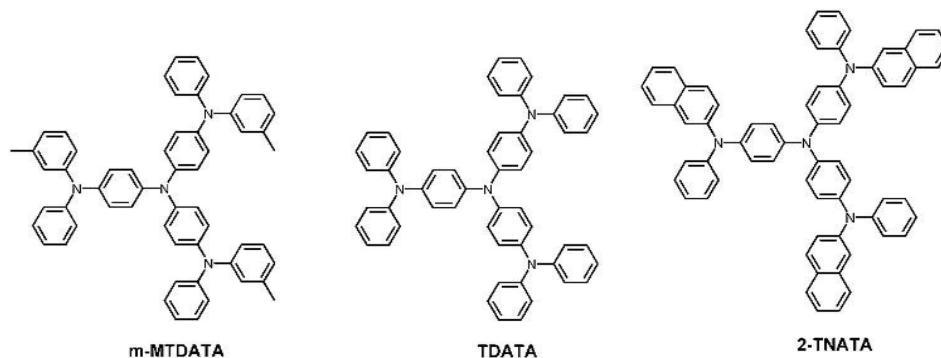
[0183] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극(110)과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.

[0184] 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.

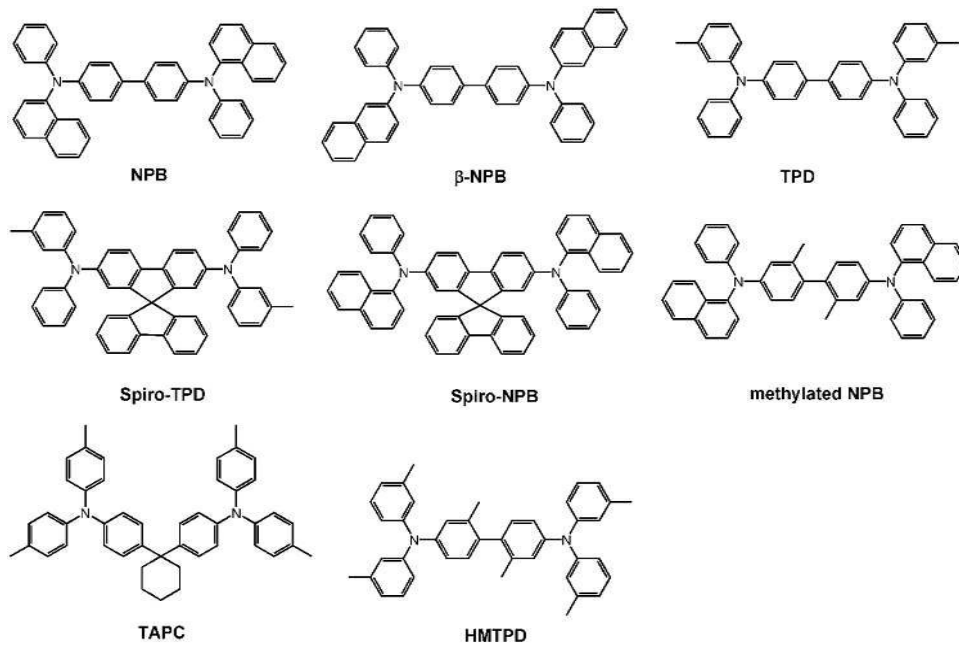
[0185] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.

[0186] 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.

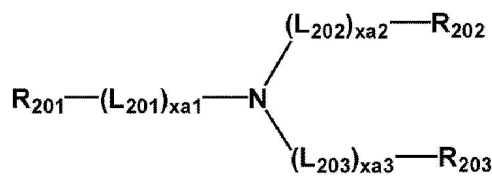
[0187] 상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMTDP, TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine (4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐린/도데실벤젠설포산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트))), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페르설포산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트))), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다:



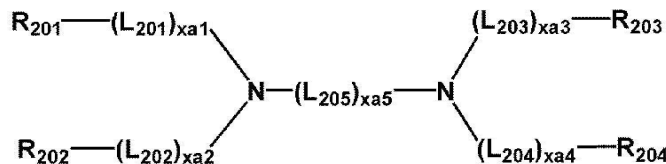
[0188]



<화학식 201>



<화학식 202>



상기 화학식 201 및 202 중,

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,

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,

x_1 내지 x_4 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

x_5 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기,

치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0200] 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.

[0201] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,

[0202] L_{201} 내지 L_{205} 는 서로 독립적으로,

[0203] 페닐렌기, 펜탈렌렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄렌렌기, 헵탈렌렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오렌렌기, 스퀴어로-비플루오렌렌기, 벤조플루오렌렌기, 디벤조플루오렌렌기, 페날렌렌기, 페난트렌렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐렌렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴렌렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발렌렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기; 및

[0204] 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, 펜탈렌렌기, 인데닐렌기, 나프틸기, 아줄렌렌기, 헵탈렌렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸기, 플루오렌렌기, 스퀴어로-비플루오렌렌기, 벤조플루오렌렌기, 디벤조플루오렌렌기, 페날렌렌기, 페난트렌렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐렌렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴렌렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발렌렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}) 및 -N(Q_{31})(Q_{32}) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈렌렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄렌렌기, 헵탈렌렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오렌렌기, 스퀴어로-비플루오렌렌기, 벤조플루오렌렌기, 디벤조플루오렌렌기, 페날렌렌기, 페난트렌렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐렌렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴렌렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발렌렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;

[0205] 중에서 선택되고,

[0206] 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.

[0207] 다른 구현예에 따르면, xa_1 내지 xa_4 는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0208] 또 다른 구현예에 따르면, xa_5 는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.

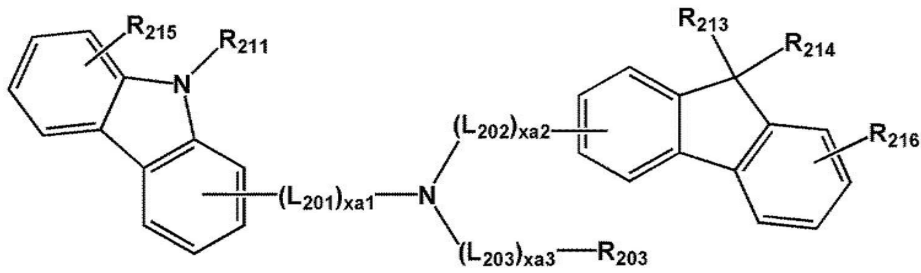
[0209] 또 다른 구현예에 따르면, R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈렌렌기, 인데닐렌기, 나프틸기, 아줄렌렌기, 헵탈렌렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸기, 플루오렌렌기, 스퀴어로-비플루오렌렌기, 벤조플루오렌렌기, 디벤조플루오렌렌기, 페날렌렌기, 페난트렌렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐렌렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴렌렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발렌렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및

[0210] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-

C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기 및 피리디닐기;

- [0211] 중에서 선택될 수 있고,
- [0212] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0213] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₃ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0214] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜레닐기; 및
- [0215] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜레닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜레닐기;
- [0216] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0217] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R₂₀₁과 R₂₀₂은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R₂₀₃과 R₂₀₄은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0218] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 중 적어도 하나는,
- [0219] 카바졸일기; 및
- [0220] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜레닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;
- [0221] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0222] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:

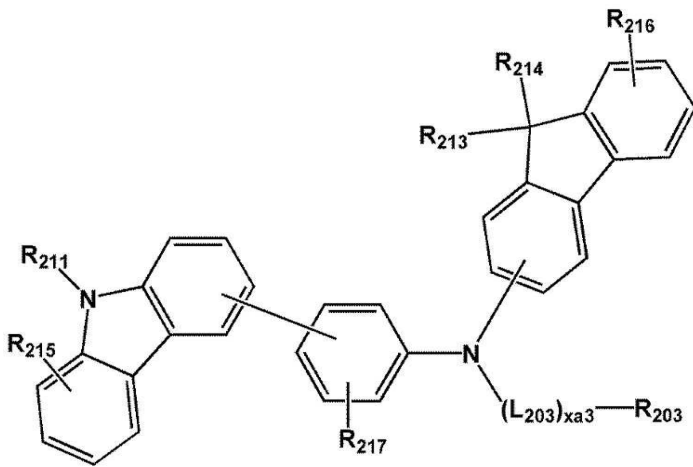
[0223] <화학식 201A>



[0224]

[0225] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

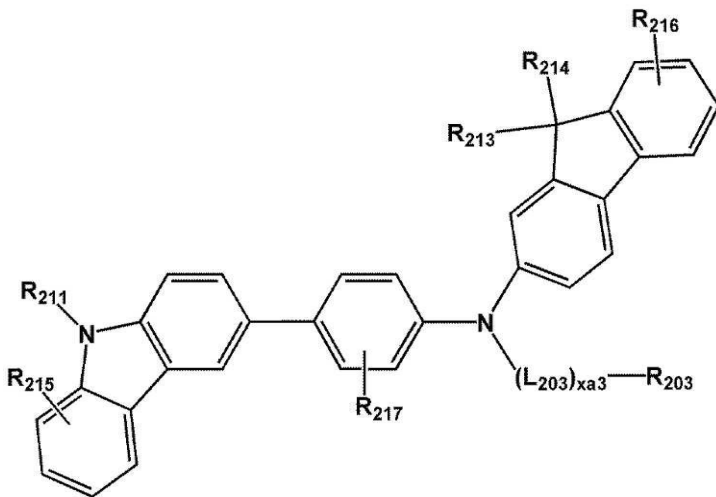
[0226] <화학식 201A(1)>



[0227]

[0228] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

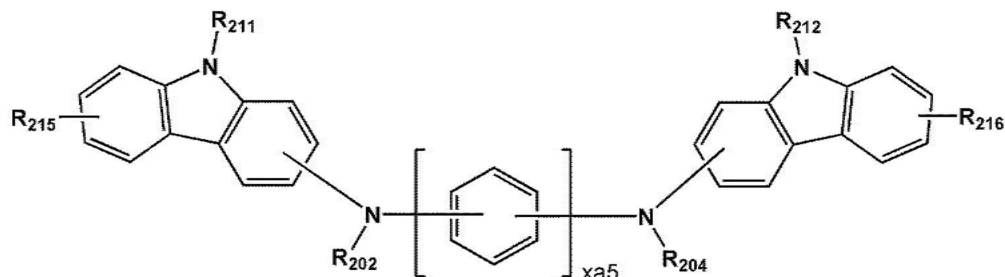
[0229] <화학식 201A-1>



[0230]

[0231] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

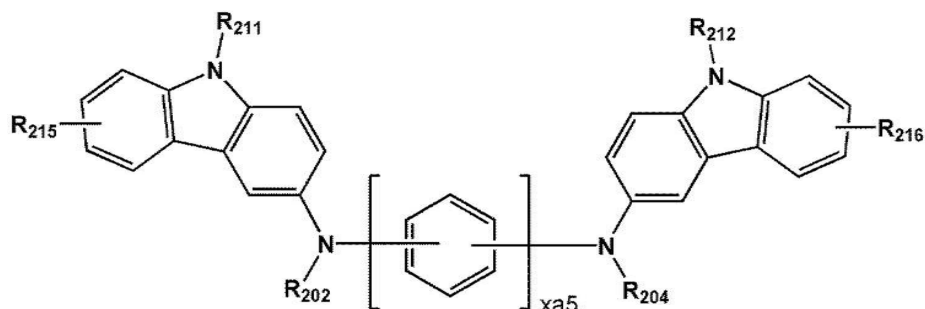
[0232] <화학식 202A>



[0233]

[0234] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0235] <화학식 202A-1>



[0236]

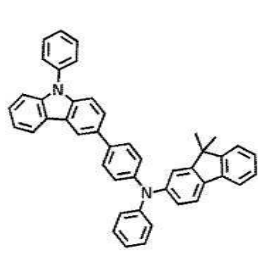
[0237] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

[0238] L201 내지 L203, xa1 내지 xa3, xa5 및 R202 내지 R204에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

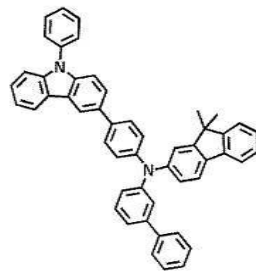
[0239] R211 및 R212에 대한 설명은 본 명세서 중 R203에 대한 설명을 참조하고,

[0240] R213 내지 R217은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

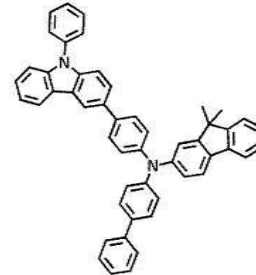
[0241] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



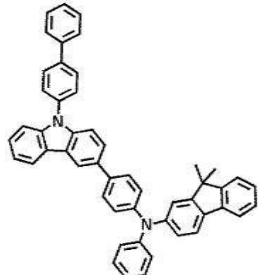
HT1



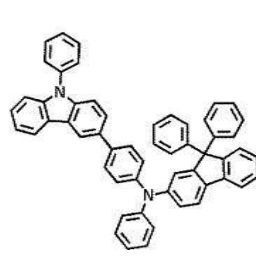
HT2



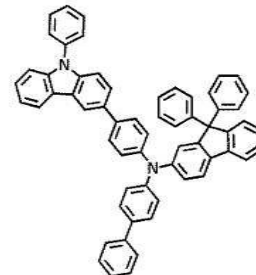
HT3



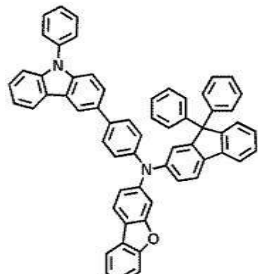
HT4



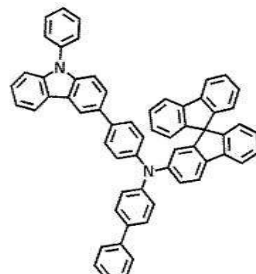
HT5



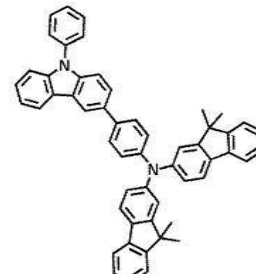
HT6



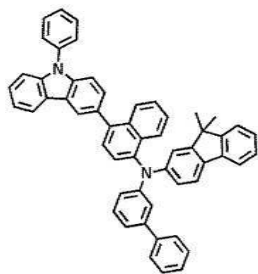
HT7



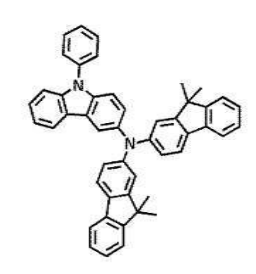
HT8



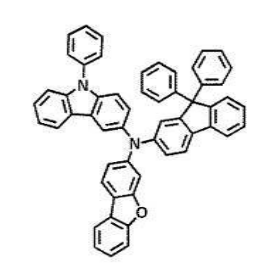
HT9



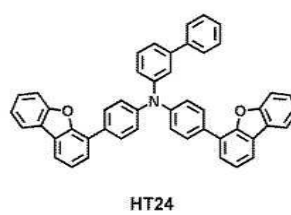
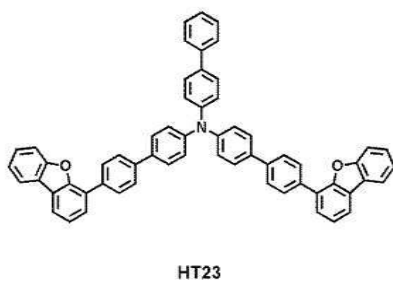
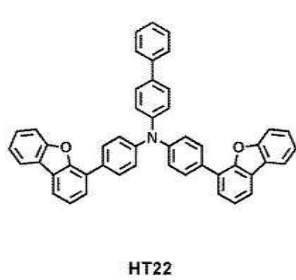
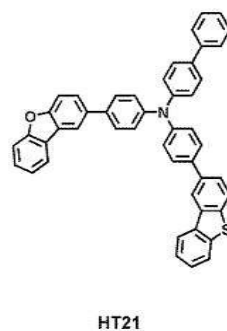
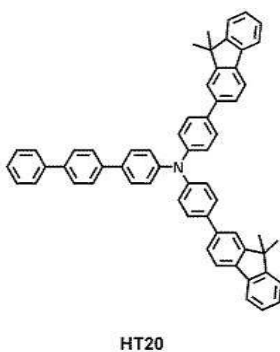
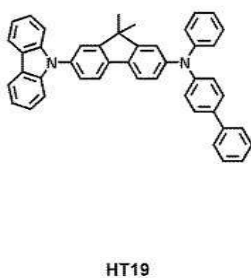
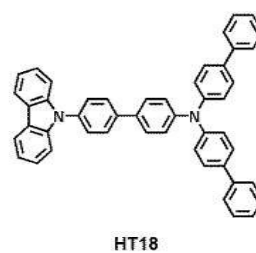
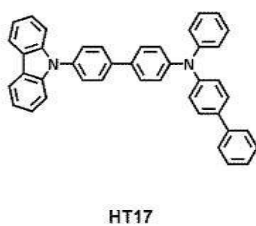
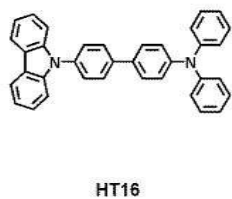
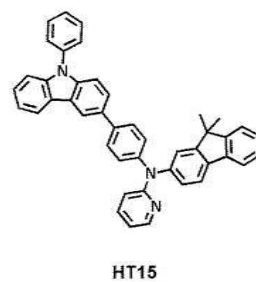
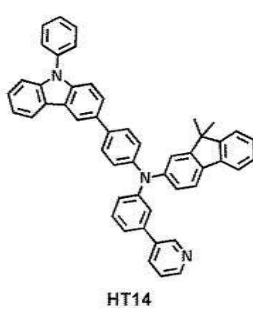
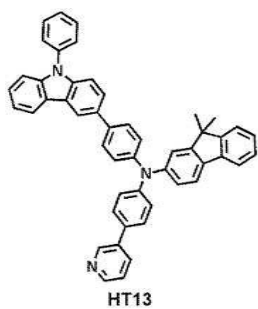
HT10

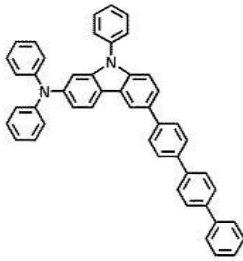


HT11

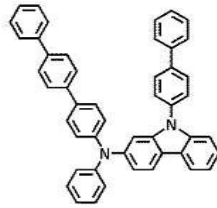


HT12

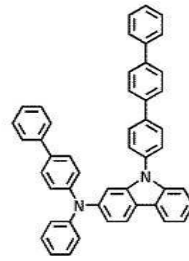




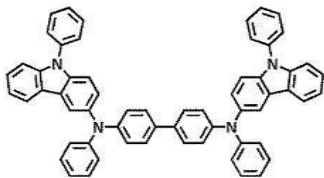
HT25



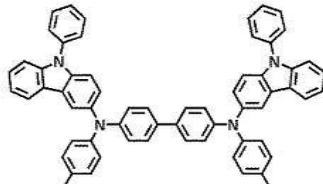
HT26



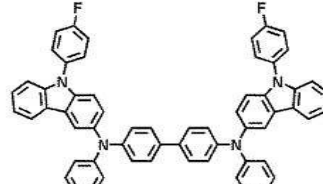
HT27



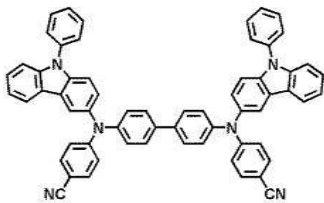
HT28



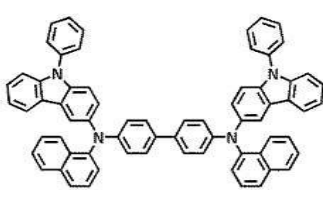
HT29



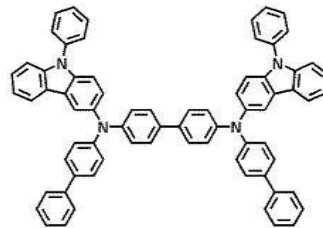
HT30



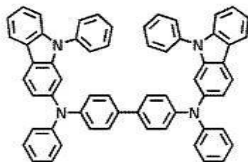
HT31



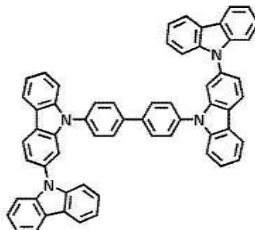
HT32



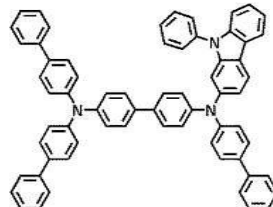
HT33



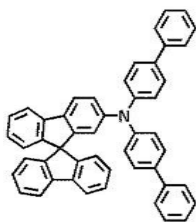
HT34



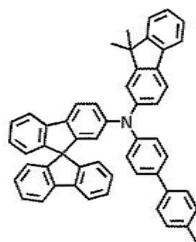
HT35



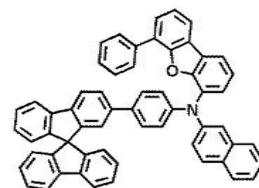
HT36



HT37



HT38



HT39

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

상기 발광 보조층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시키는 역할을 하는 층이고, 상기 전자 저지층은 전자 수송 영역으로부터의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는

층이다. 상기 발광 보조층 및 전자 저지층에는 상술한 바와 같은 물질이 포함될 수 있다.

[0251] 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.

[0252] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0253] 일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다.

[0254] 상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0255] 예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0256] TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체;

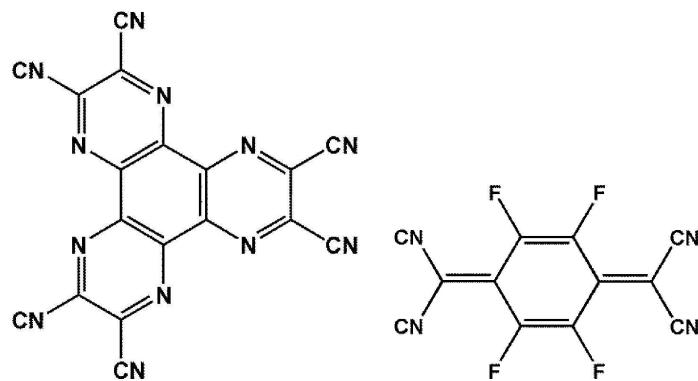
[0257] 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

[0258] HAT-CN (1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및

[0259] 하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

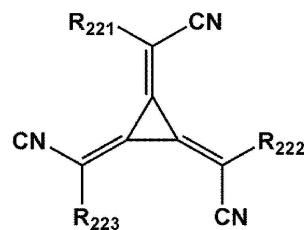
[0260] 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0261] <HAT-CN> <F4-TCNQ>



[0262]

[0263] <화학식 221>



[0264]

[0265] 상기 화학식 221 중,

[0266] R₂₂₁ 내지 R₂₂₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R₂₂₁ 내지 R₂₂₃ 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Cl로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Br로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 및 -I로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0267] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층

중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

- [0268] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0269] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0270] 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.
- [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] $xb11$ 은 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] $xb1$ 은 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] $xb21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0281] Q_{301} 내지 Q_{303} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [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, 페틸렌 그룹, 펜타phen 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, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;

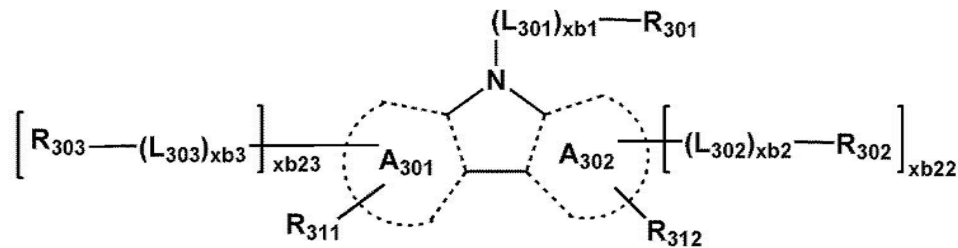
중에서 선택되고,

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.

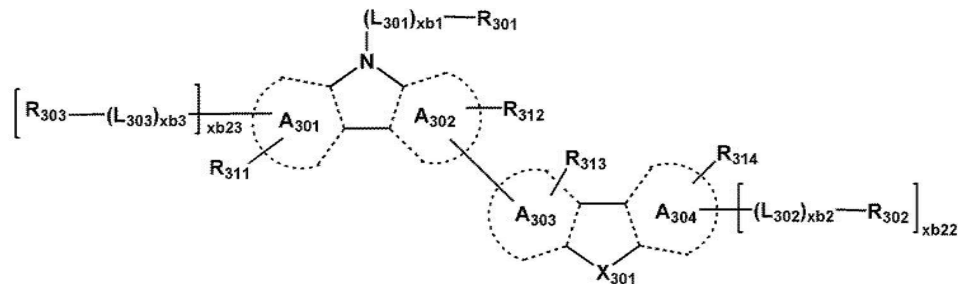
상기 화학식 301 중 $xb1$ 이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{301} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

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

<화학식 301-1>



<화학식 301-2>



상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

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, 나프토피란, 벤조나프토피란, 디나프토피란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 나프토티오펜, 벤조나프토티오펜 및 디나프토티오펜 중에서 선택되고,

X_{301} 은 0, S 또는 $N-[(L_{304})_{xb4}-R_{304}]$ 이고,

R_{311} 내지 R_{314} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택되고,

$xb22$ 및 $xb23$ 은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

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

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

$xb2$ 내지 $xb4$ 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 $xb1$ 에 대한 설명을 참조하고,

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, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 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, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 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, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;

[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, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자

카바졸일기; 및

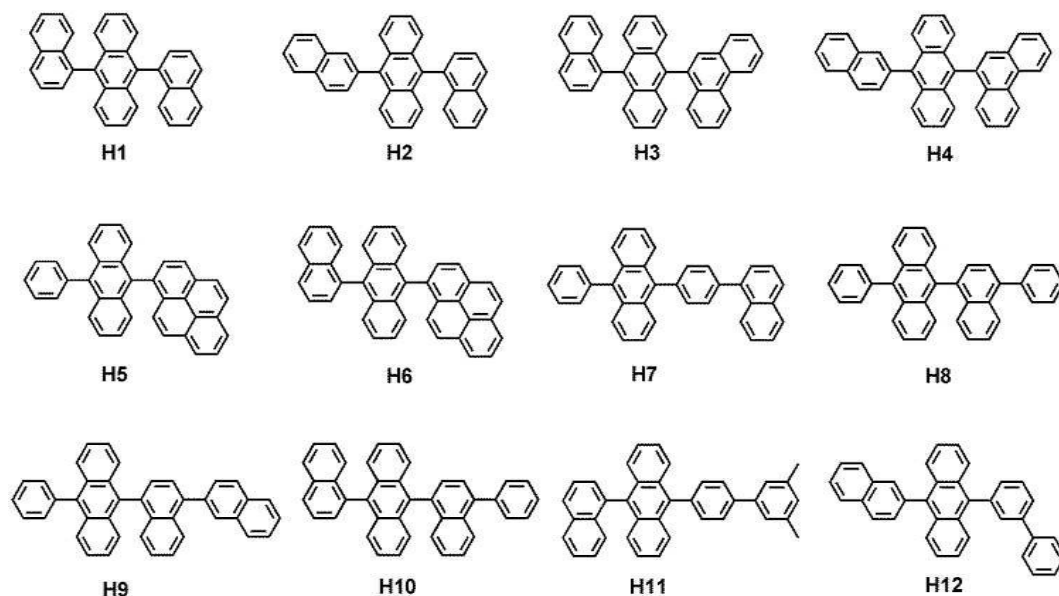
[0309] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기, 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,

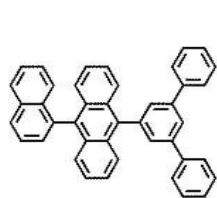
[0311] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[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.

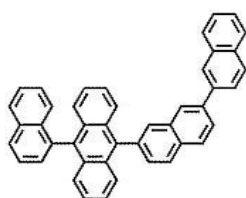
[0313] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



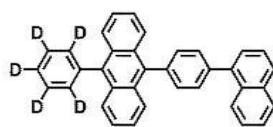
[0314]



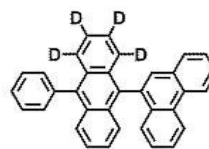
H13



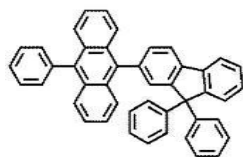
H14



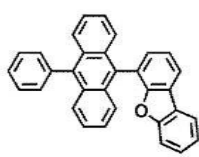
H15



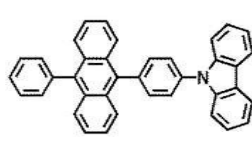
H16



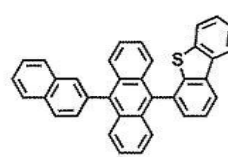
H17



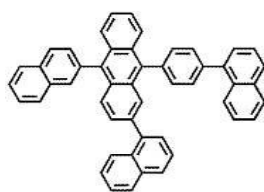
H18



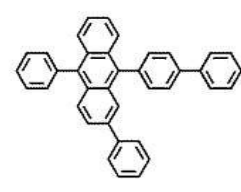
H19



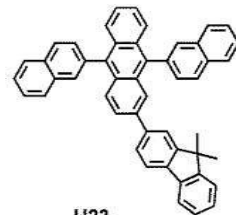
H20



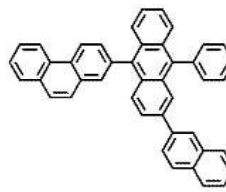
H21



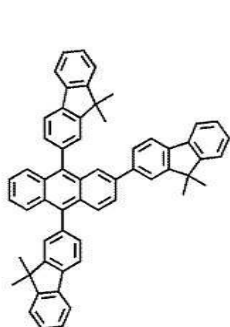
H22



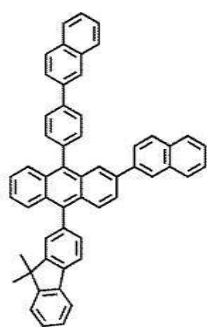
H23



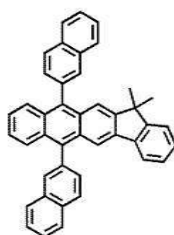
H24



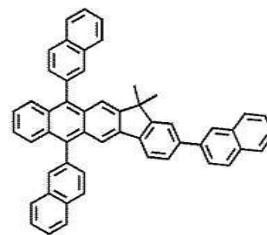
H25



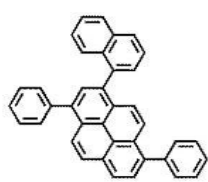
H26



H27



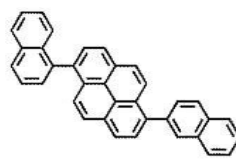
H28



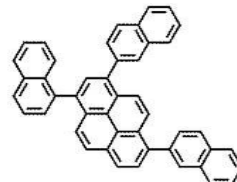
H29



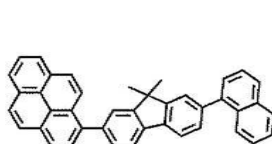
H30



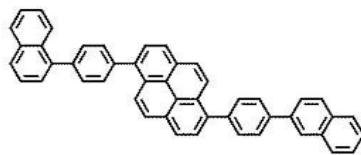
H31



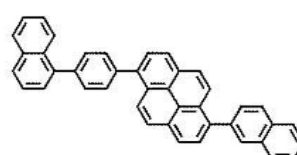
H32



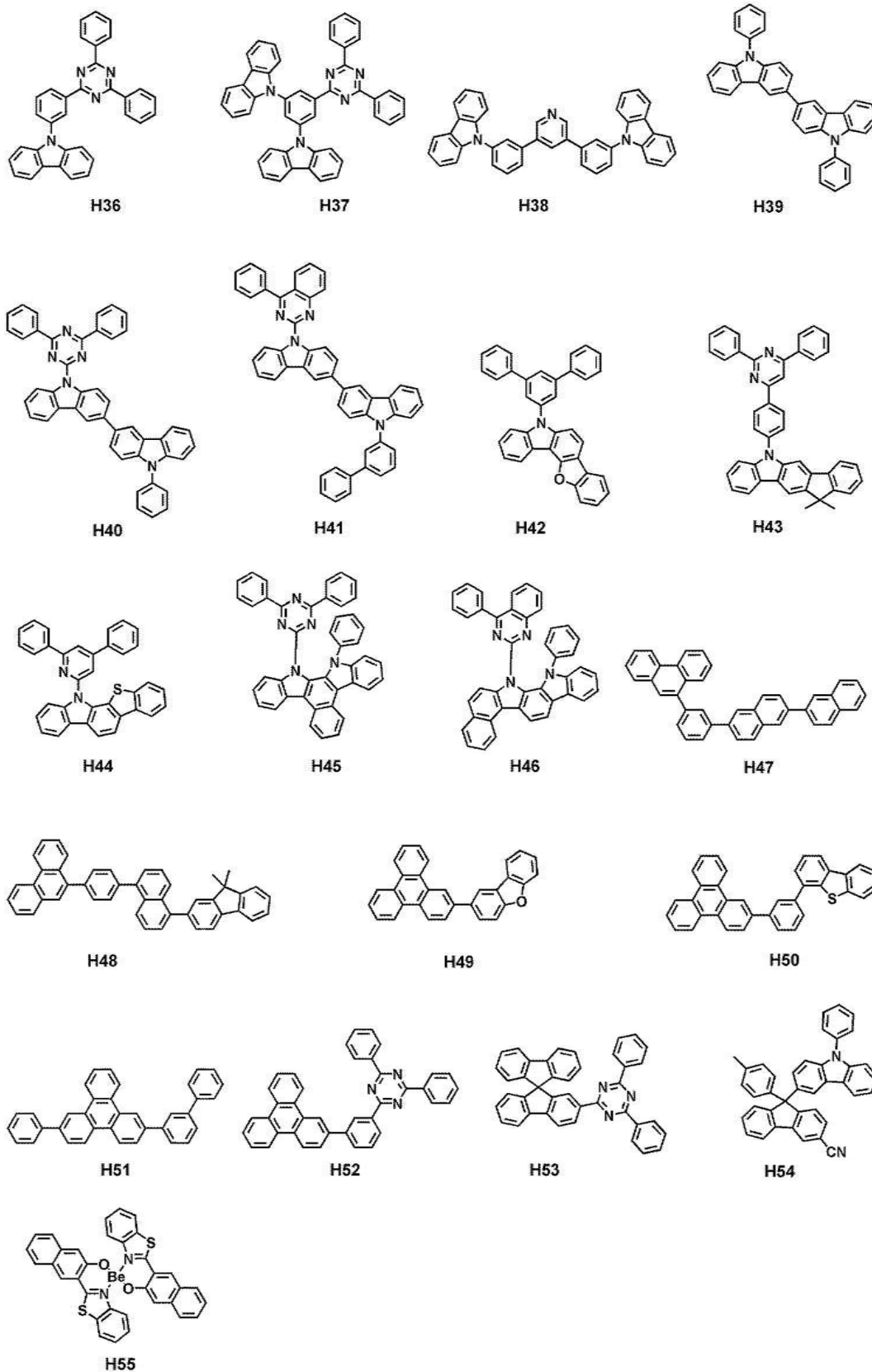
H33



H34

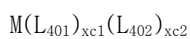


H35

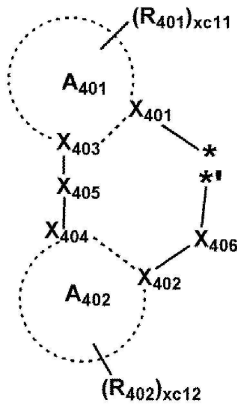


상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함할 수 있다:

<화학식 401>



[0324] <화학식 402>



[0325]

[0326] 상기 화학식 401 및 402 중,

[0327] 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,

[0328] L₄₀₁은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, xc1은 1, 2 또는 3이고, xc1이 2 이상일 경우 2 이상의 L₄₀₁은 서로 동일하거나 상이하고,

[0329] L₄₀₂는 유기 리간드이고, xc2는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, xc2가 2 이상일 경우 2 이상의 L₄₀₂는 서로 동일하거나 상이하고,

[0330] X₄₀₁ 내지 X₄₀₄는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

[0331] X₄₀₁과 X₄₀₃은 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고, X₄₀₂와 X₄₀₄는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,

[0332] A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0333] X₄₀₅는 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(=O)-*, *-N(Q₄₁₁)-*, *-C(Q₄₁₁)(Q₄₁₂)-*, *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*, *-C(Q₄₁₁)=*, 또는 *=C(Q₄₁₁)=*이고, 상기 Q₄₁₁ 및 Q₄₁₂는, 수소, 중수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,

[0334] X₄₀₆은 단일 결합, O 또는 S이고,

[0335] R₄₀₁ 및 R₄₀₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)(Q₄₀₃), -N(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -B(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -C(=O)(Q₄₀₁), -S(=O)₂(Q₄₀₁) 및 -P(=O)(Q₄₀₁)(Q₄₀₂) 중에서 선택되고, 상기 Q₄₀₁ 내지 Q₄₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기 및 C₁-C₂₀헤테로아릴기 중에서 선택되고,

[0336] xc11 및 xc12는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0337] 상기 화학식 402 중 * 및 *'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.

[0338] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌

그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 인텐 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란(furan) 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸(isoxazole) 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 퀴놀살린 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.

[0339] 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.

[0340] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 R_{401} 및 R_{402} 는 서로 독립적으로,

[0341] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

[0342] 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;

[0343] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;

[0344] 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, 퀴놀살리닐기, 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, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및

[0345] $-Si(Q_{401})(Q_{402})(Q_{403})$, $-N(Q_{401})(Q_{402})$, $-B(Q_{401})(Q_{402})$, $-C(=O)(Q_{401})$, $-S(=O)_2(Q_{401})$ 및 $-P(=O)(Q_{401})(Q_{402})$;

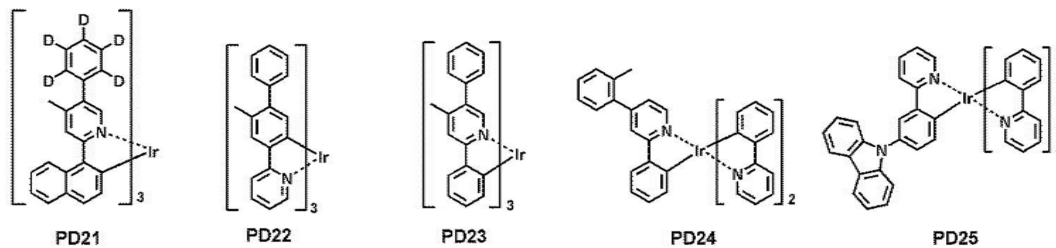
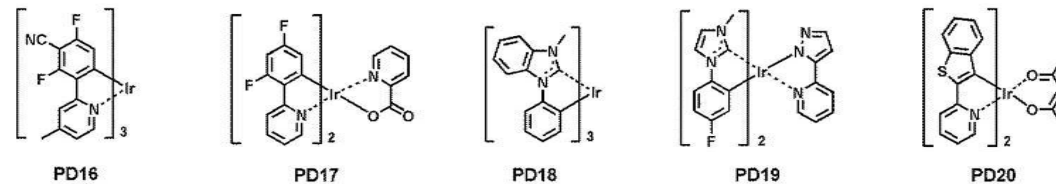
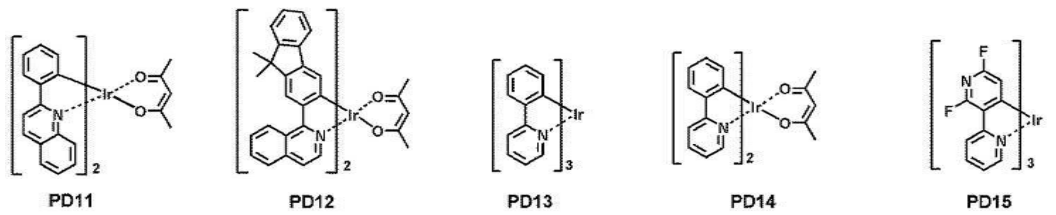
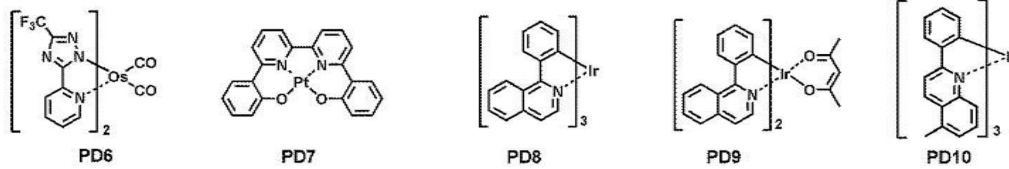
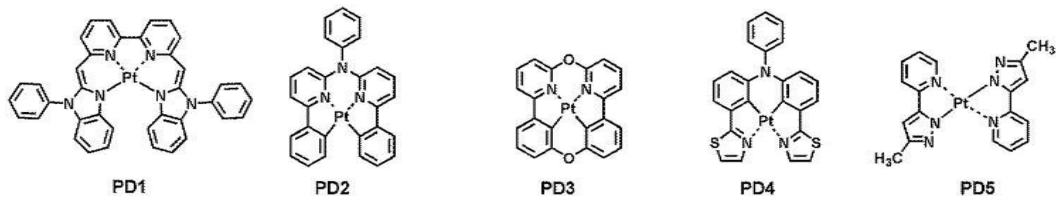
[0346] 중에서 선택되고,

[0347] 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.

[0348] 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.

[0349] 상기 화학식 401 중 L_{402} 는 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기 L_{402} 는 할로젠, 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.

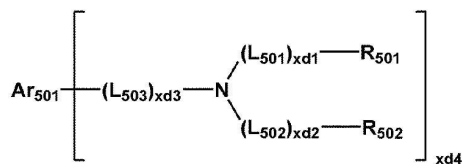
[0350] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



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

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

<화학식 501>



상기 화학식 501 중,

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

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

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

- [0362] 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,
- [0363] x_{d4} 는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.
- [0364] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar_{501} 은,
- [0365] 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹; 및
- [0366] 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, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹;
- [0367] 중에서 선택될 수 있다.
- [0368] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L_{501} 내지 L_{503} 은 서로 독립적으로,
- [0369] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및
- [0370] 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, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기;
- [0371] 중에서 선택될 수 있다.
- [0372] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 R_{501} 및 R_{502} 는 서로 독립적으로,
- [0373] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0374] 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, 벤

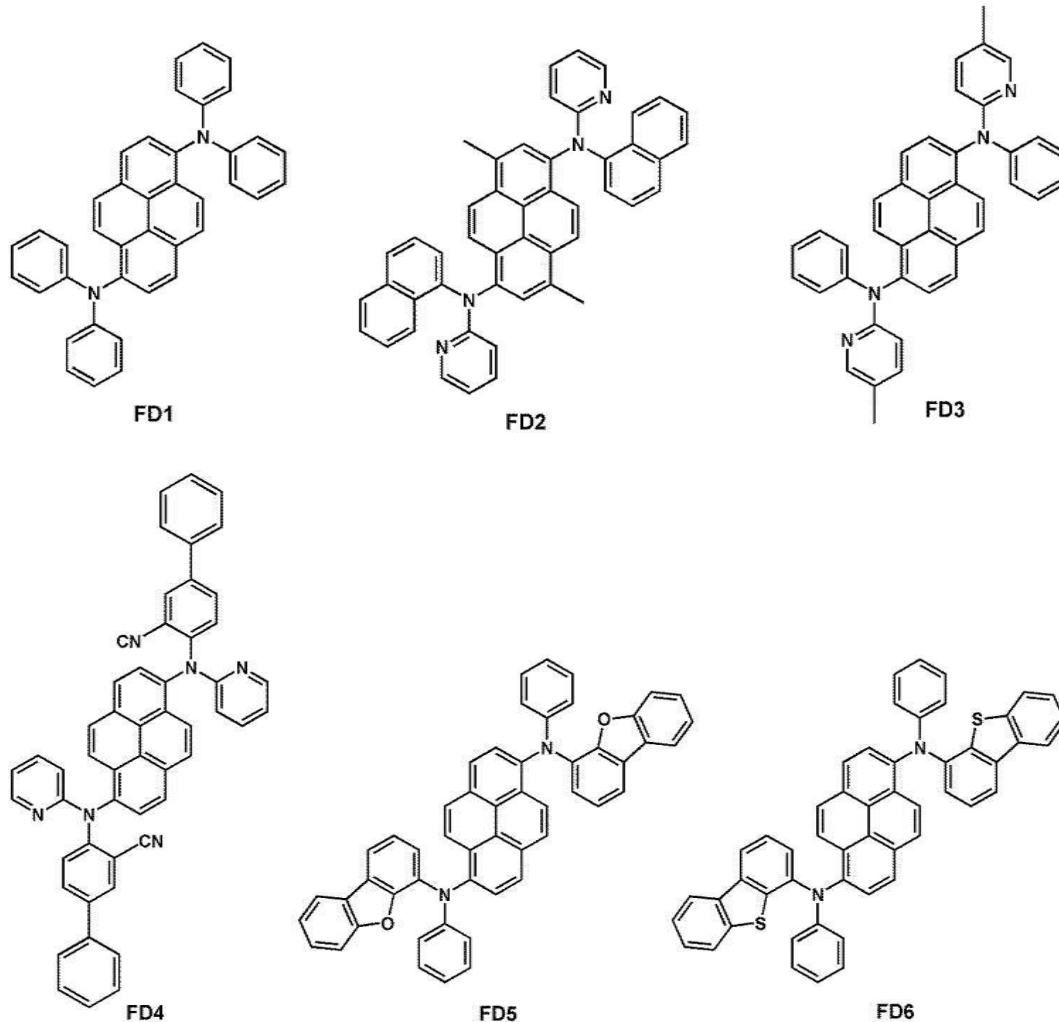
조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 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;

[0375] 중에서 선택되고,

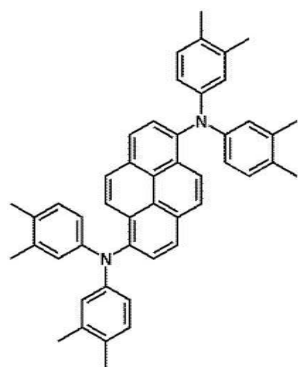
[0376] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0377] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd_4 는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

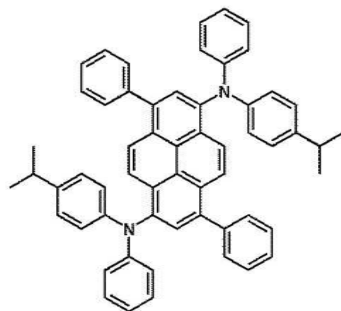
[0378] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:



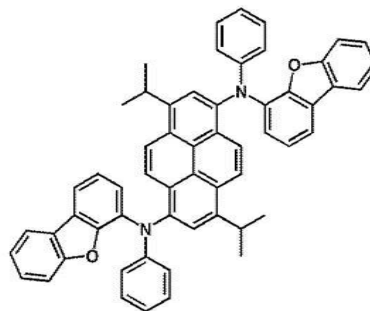
[0380]



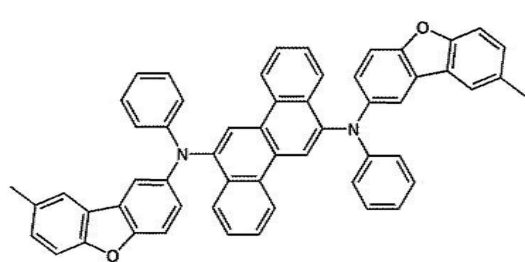
FD7



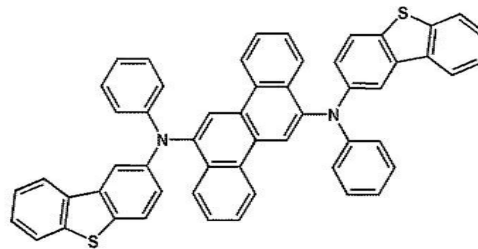
FD8



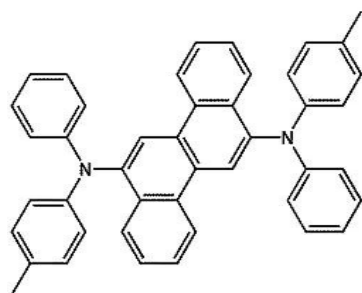
FD9



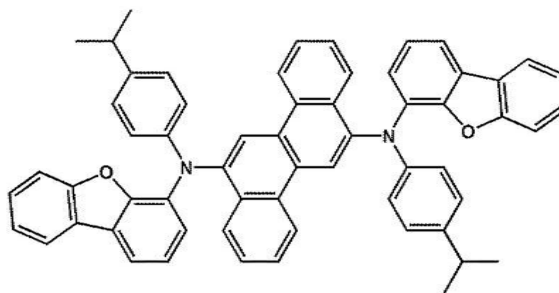
FD10



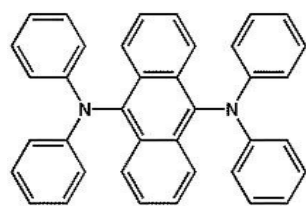
FD11



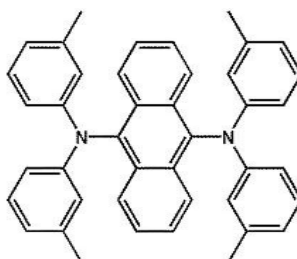
FD12



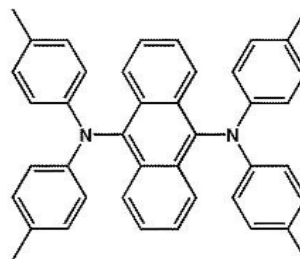
FD13



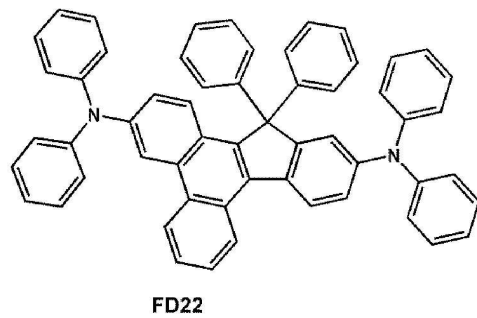
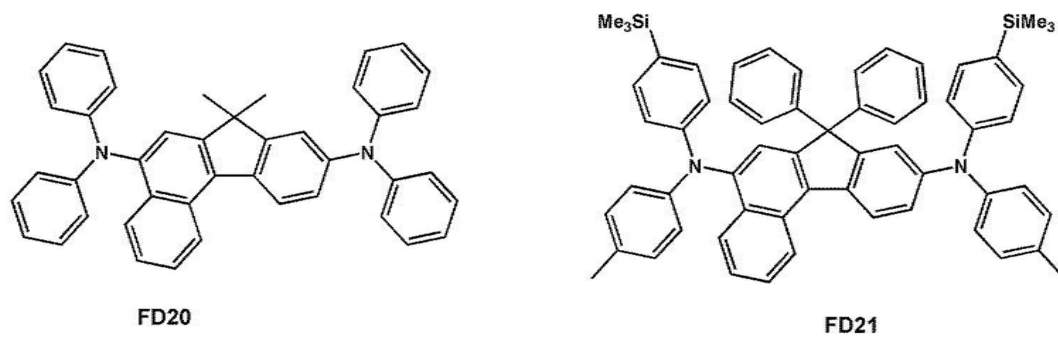
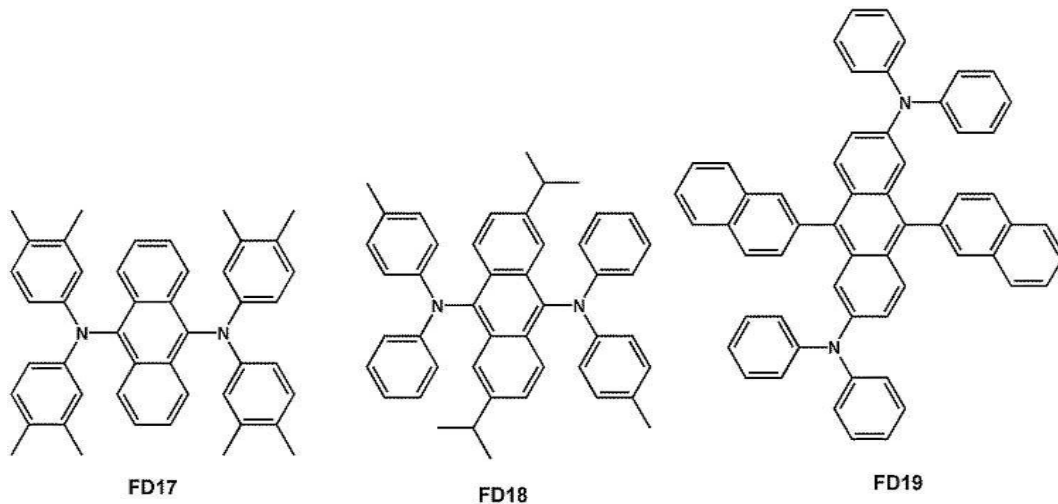
FD14



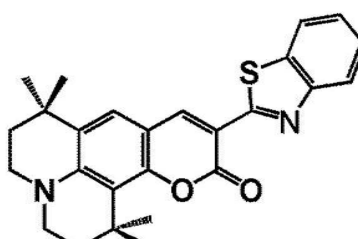
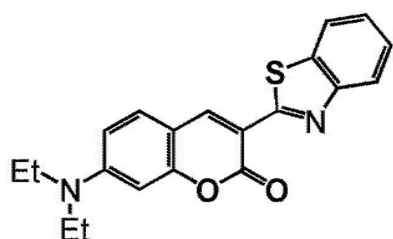
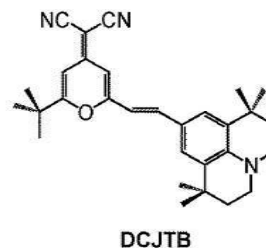
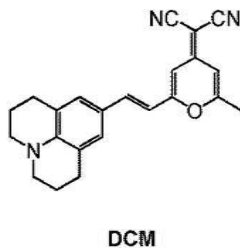
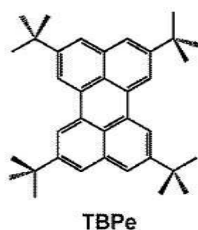
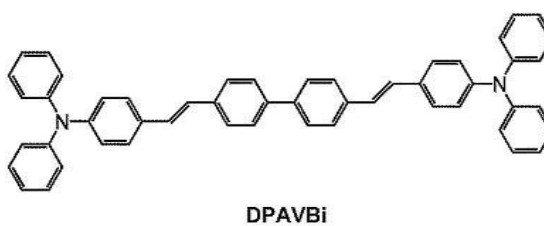
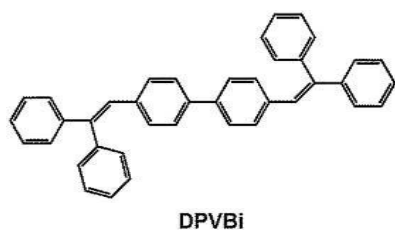
FD15



FD16



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



[0389]

[0390]

[0391]

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.

[0392]

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.

[0393]

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.

[0394]

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.

[0395]

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

[0396]

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} 가보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.

[0397]

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, 퀴놀살린, 퀴나졸린, 시놀린, 페난트리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 벤조이미다졸, 이소벤조티아졸, 벤조옥사졸, 이소벤조옥사졸, 트리아졸, 테트라졸, 옥사디아졸, 트리아진, 티아디아졸, 이미다조피리딘, 이미다조피리미딘, 아자카바졸 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0398]

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

- [0399] <화학식 601>
- [0400] $[Ar_{601}]_{xe11} - [(L_{601})_{xe1} - R_{601}]_{xe21}$
- [0401] 상기 화학식 601 중,
- [0402] Ar_{601} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0403] $xe11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0404] 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,
- [0405] $xe1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0406] 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,
- [0407] 상기 Q_{601} 내지 Q_{603} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0408] $xe21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0409] 일 구현예에 따르면, 상기 $xe11$ 개의 Ar_{601} 및 $xe21$ 개의 R_{601} 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 함질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0410] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar_{601} 은,
- [0411] 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
- [0412] 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;

[0413] 중에서 선택될 수 있고,

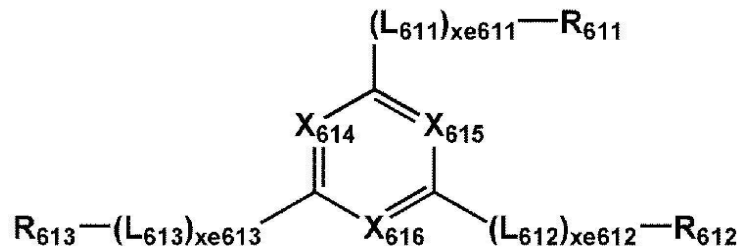
[0414] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0415] 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0416] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0417] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

[0418] <화학식 601-1>



[0419]

[0420] 상기 화학식 601-1 중,

[0421] X₆₁₄는 N 또는 C(R₆₁₄)이고, X₆₁₅는 N 또는 C(R₆₁₅)이고, X₆₁₆은 N 또는 C(R₆₁₆)이고, X₆₁₄ 내지 X₆₁₆ 중 적어도 하나는 N이고,

[0422] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0423] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0424] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0425] R₆₁₄ 내지 R₆₁₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0426] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L₆₀₁ 및 L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로,

[0427] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0428] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤

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

[0429] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0430] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0431] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R₆₀₁ 및 R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로,

[0432] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

[0433] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아

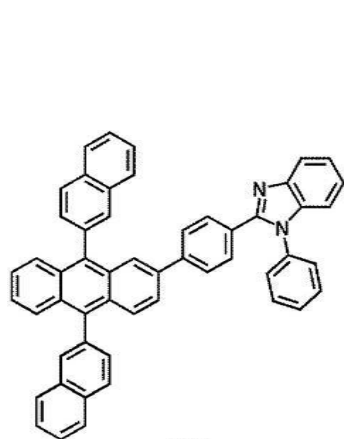
크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0434] $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$;

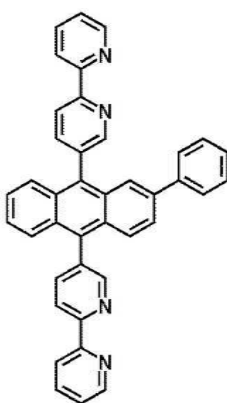
[0435] 중에서 선택되고,

[0436] 상기 Q_{601} 및 Q_{602} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

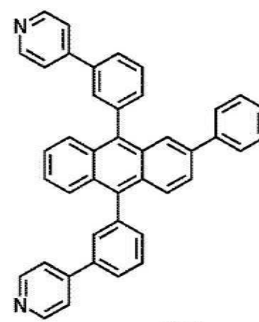
[0437] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



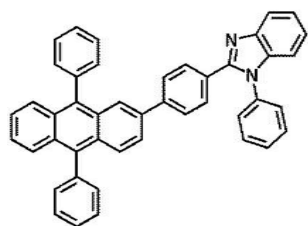
ET1



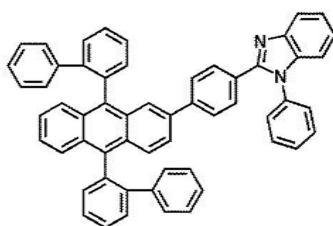
ET2



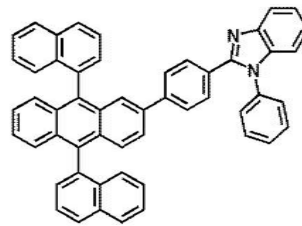
ET3



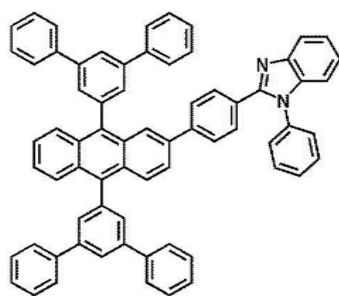
ET4



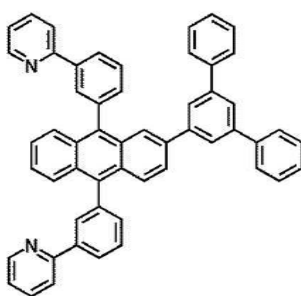
ET5



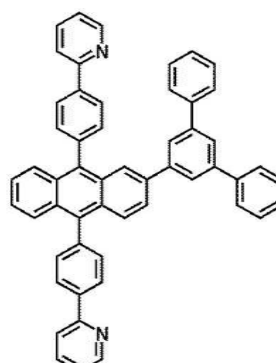
ET6



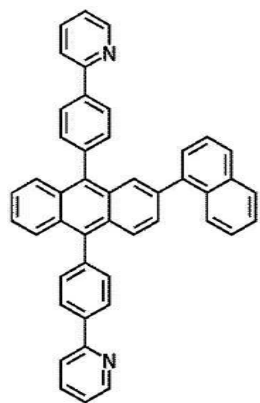
ET7



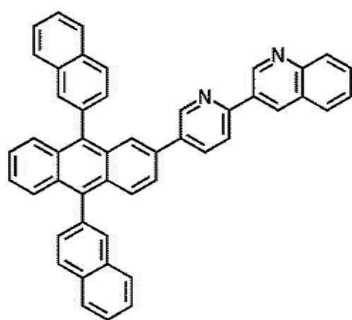
ET8



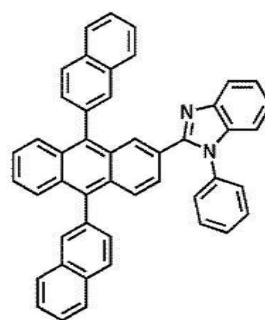
ET9



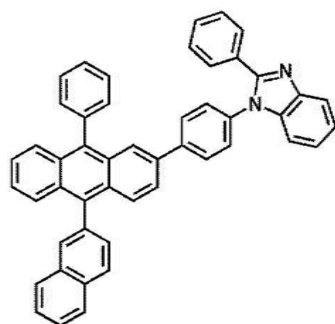
ET10



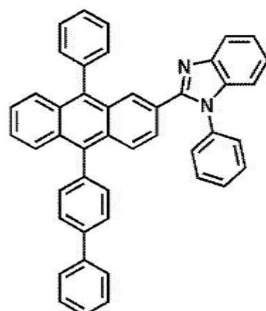
ET11



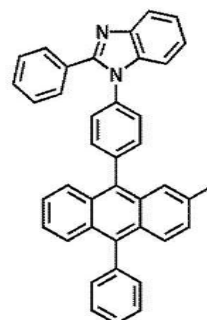
ET12



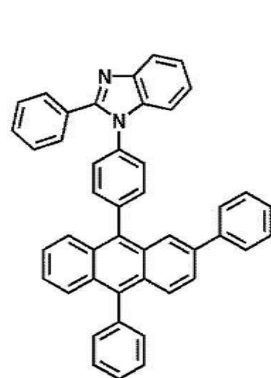
ET13



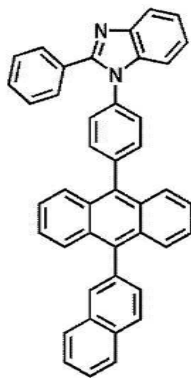
ET14



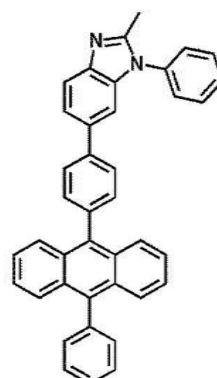
ET15



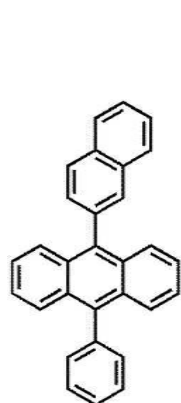
ET16



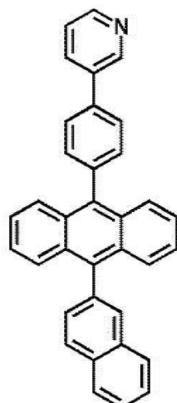
ET17



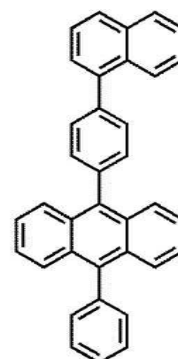
ET18



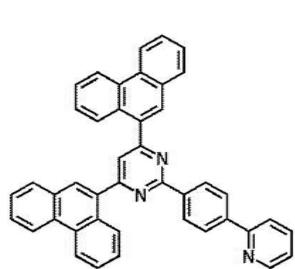
ET19



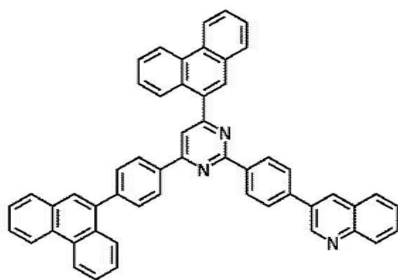
ET20



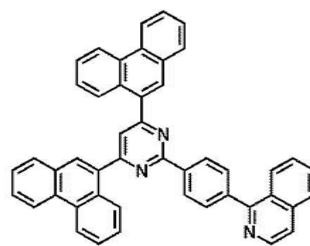
ET21



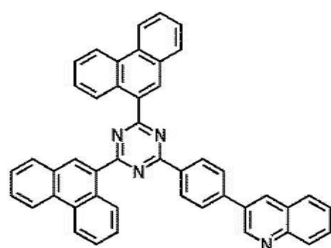
ET22



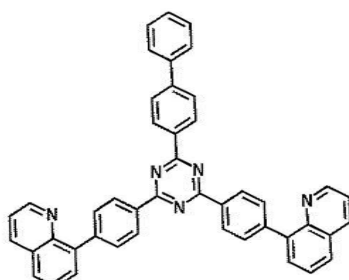
ET23



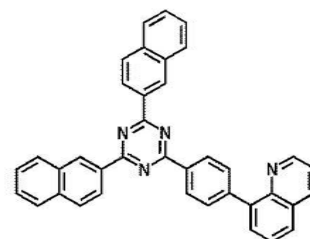
ET24



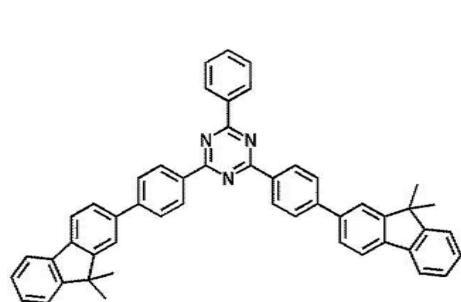
ET25



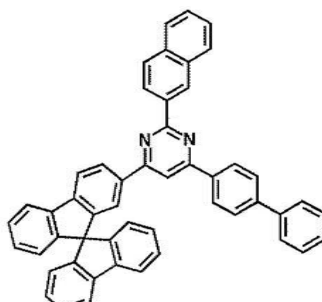
ET26



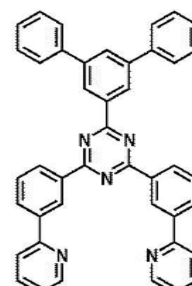
ET27



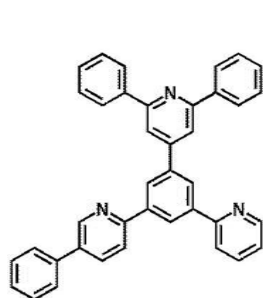
ET28



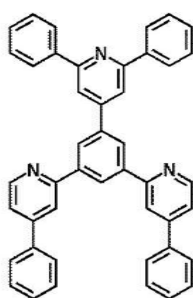
ET29



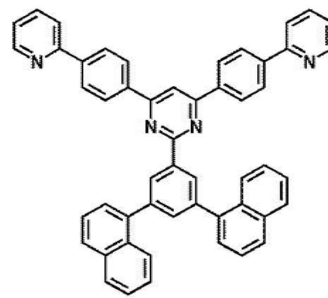
ET30



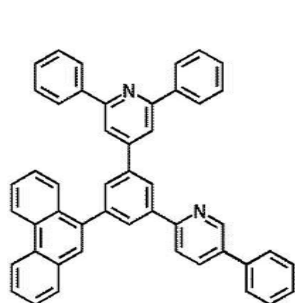
ET31



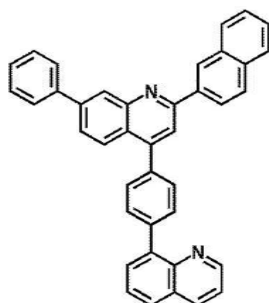
ET32



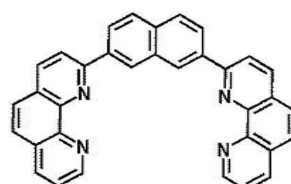
ET33



ET34



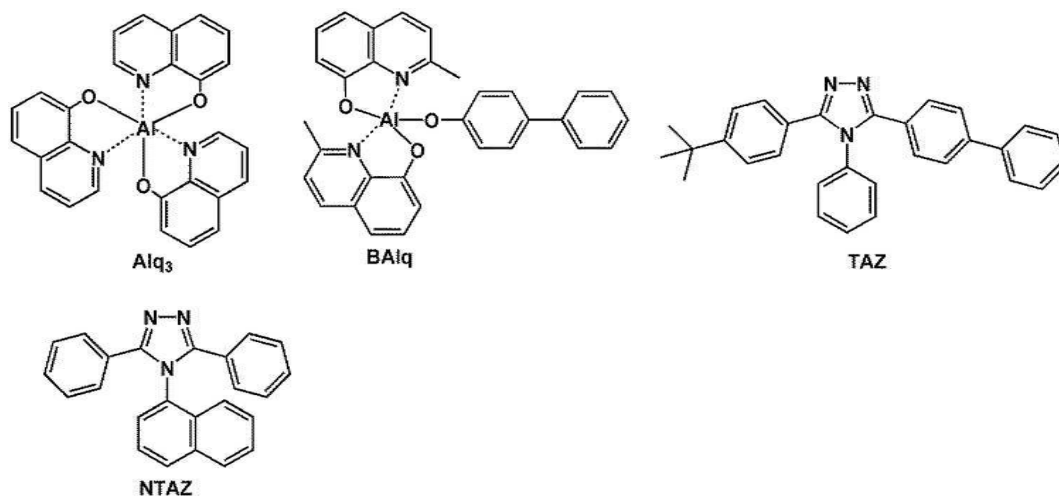
ET35



ET36

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.



[0451]

[0452]

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.

[0453]

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.

[0454]

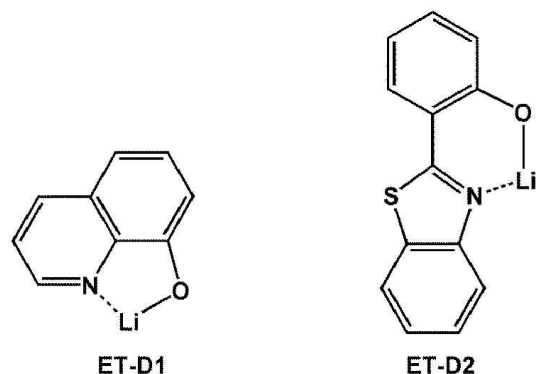
상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0455]

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.

[0456]

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



[0457]

[0458]

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.

[0459]

상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이

루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

- [0460] 상기 전자 주입층은 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 포함할 수 있다.
- [0461] 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.
- [0462] 상기 알칼리 토금속은 Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.
- [0463] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.
- [0464] 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.
- [0465] 상기 알칼리 금속 화합물은, Li_2O , Cs_2O , K_2O 등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI, RbI 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.
- [0466] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO, $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$), $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$) 등과 같은 알칼리 토금속 화합물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0467] 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.
- [0468] 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 배워진 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트론 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0469] 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.
- [0470] 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.
- [0471] 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.
- [0472] 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.

- [0473] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0474] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0475] 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.
- [0476] 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 100 Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0477] 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.
- [0478] 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.
- [0479] 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.
- [0480] 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.
- [0481] 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.
- [0482] 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.
- [0483] 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-옥사트리아졸리딘기(1,2,3,4-oxatriazolidinyl), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기는 상기 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0484] 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.
- [0485] 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-디히드로티오펜틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C_1-C_{10}

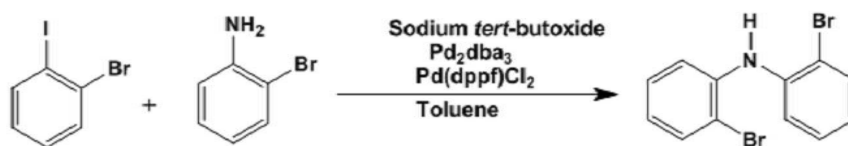
헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0486] 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 의미한다. 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.
- [0487] 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 포함된다. 상기 C_1-C_{60} 헤테로아릴기 및 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0488] 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} 아릴기임)를 가리킨다.
- [0489] 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 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0490] 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.
- [0491] 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.
- [0492] 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.
- [0493] 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,

- [0494] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0495] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0496] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0497] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0498] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0499] 중에서 선택되고,
- [0500] 상기 Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0501] 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.
- [0502] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.
- [0503] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.
- [0504] 본 명세서 중 * 및 '*'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.
- [0505] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성에 및 실시예 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.
- [0506] **[합성예]**
- [0507] **하기 화합물 1의 합성**

[0508] 1) 비스(2-브로모페닐아민)의 합성



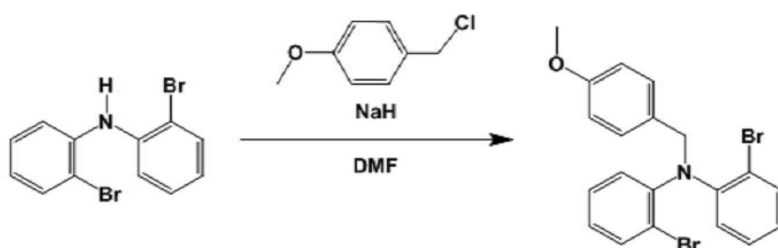
[0509]

[0510] 500 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 플라스크에 2-브로모아닐린(15 g, 0.087 mol) 과 1-브로모-2-아이오도벤젠 (29.6 g, 0.105 mol)을 톨루엔 200 mL에 녹인 후 소듐 *tert*-부톡사이드(16.76 g, 0.174 mol), Pd(dppf)Cl₂ (12.76 g, 0.017 mol), Pd₂dba₃ (7.98 g, 0.009 mol)을 넣고 12 시간 환류 교반하였다. 반응 종결 후 용매를 제거하고, 이에 메틸렌 클로라이드(Methylene chloride, MC)을 이용하여 3회 추출하였다. 추출된 유기층을 MgSO₄를 사용하여 건조시킨 후 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하고, n-헥산 용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 무색의 오일 형태의 화합물 18.3 g(수득율 = 64 %)을 얻었다.

[0511] ¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃)[ppm] δ = 7.64-7.61 (d, 2H), 7.35-7.32 (d, 2H),

[0512] 7.28-7.22 (t, 2H), 6.91-6.85 (t, 2H), 6.50 (s, 1H).

[0513] 2) N,N-비스(2-브로모페닐)-N-(4-메톡시벤질)아민의 제조

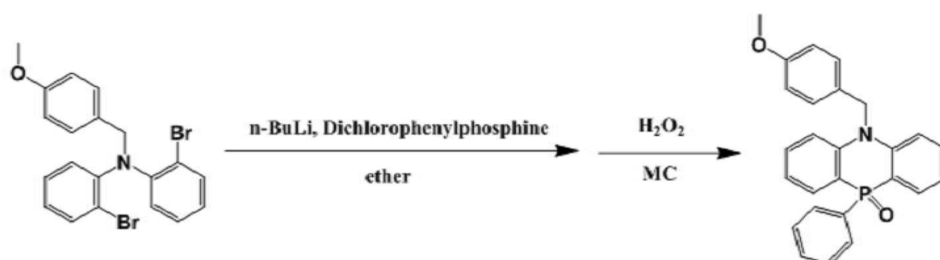


[0514]

[0515] 질소 분위기 하에서, 잘 건조시킨 500 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 비스(2-브로모페닐아민)(39 g, 119.2 mmol), NaH(3.43 g, 143.1 mol) 및 DMF 250 ml을 넣고 상온(25 °C)에서 1 시간 동안 교반하였다. 이 후 1-(클로로메틸)-4-메톡시벤젠 (20.54 g, 131.2 mol) 을 적가하고, 실온에서 14 시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 반응물을 증류수 500 ml을 적가하여 석출된 고체를 여과 분리하였다. 여과된 고체를 MC에 재용해한 후 3회 추출하였다. 추출된 유기층을 MgSO₄를 사용하여 건조시킨 후 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하고, MC/헥산 = 3:1 용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 46.8 g(수득율 = 87 %)을 얻었다.

[0516] ¹H-NMR (300 MHz, DMSO)[ppm] δ = 7.64-7.61 (d, 2H), 7.5 (d, 2H), 7.3 (t, 2H), 7.0 (m, 4H), 6.80 (d, 2H), 4.7 (s, 2H), 3.7 (s, 3H).

[0517] 3) 5-(4-메톡시벤질)-10-페닐-5H-페노포스파진 10-옥사이드의 제조

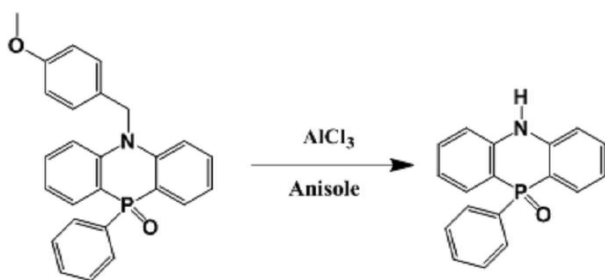


[0518]

[0519] 150 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 2-브로모-N-(2-브로모페닐)-N-(4-메톡시 벤질)아닐린 (7.00 g, 15.6 mmol) 과 에테르 100 ml을 넣고 교반하였다. 반응 온도를 -5°C까지 냉각하고, 2.5M n-BuLi/Hex (13.8 mL, 34.4 mmol)을

1)을 적가하였다. 반응 온도를 유지하면서 40분간 교반한 후 반응 온도를 -78°C 까지 냉각하고 에테르 20 mL에 용해한 Dichlorophenylphosphine (2.5 mL, 18.8 mmol)을 적가 한 후 실온에서 12시간 교반하였다. 반응 종결 후 용매를 제거하고, 이에 에틸아세테이트를 이용하여 3회 추출하였다. 추출된 유기층을 MgSO_4 를 사용하여 건조시킨 후 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하고, 메틸렌 디클로라이드(70mL)와 H_2O_2 (30 mL)를 넣고 상온에서 12시간 교반시킨다. 메틸렌 디클로라이드를 이용하여 3회 추출 한 뒤 추출된 유기층을 MgSO_4 를 사용하여 건조시킨 후 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하고, 에틸 아세테이트/헥산(5:1) 용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4 g(수득율 = 52%)을 얻었다. $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, DMSO)[ppm] δ = 7.85-7.77 (dd, 2H), 7.65-7.58 (dd, 2H), 7.52-7.42 (m, 5H), 7.19-7.13 (m, 6H), 6.96-6.92 (d, 2H), 5.37 (s, 2H), 3.83 (s, 3H).

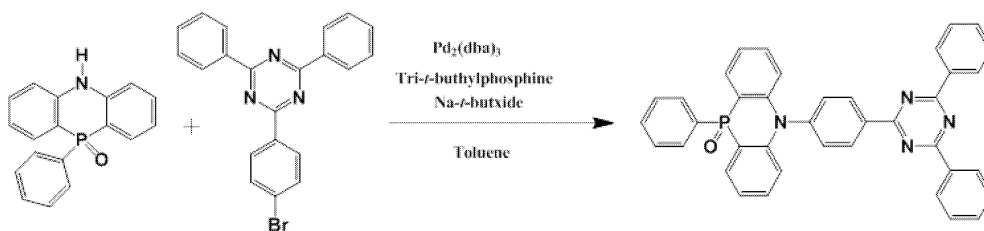
[0520] 4) 10-페닐-5H-페노포스파진 10-옥사이드의 제조



[0521]

[0522] 100 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 AlCl_3 (29.17g, 218.7 mmol)를 넣고 아니솔(200 mL)을 넣는다. 반응 온도를 -5°C 까지 냉각하고 5-(4-메톡시벤질)-10-페닐-5H-페노포스파진 10-옥사이드 (12 g, 29.1 mmol)를 아니솔 (100 mL)에 녹여 넣고 70°C 에서 14 시간 교반하였다. 반응 종결 후 H_2O 를 첨가하고 톨루엔 용매를 이용하여 3회 추출하였다. 추출된 유기층을 MgSO_4 를 사용하여 건조시킨 후 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하고, 에틸 아세테이트/메탄올(9:1) 용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 5.6 g(수득율 = 66%) 얻었다.

[0523] 5) 화합물 1의 제조



[0524]

[0525] 30 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(3.2 g, 8.24 mmol), 10-페닐-5H-페노포스파진 10-옥사이드(2 g, 6.87 mmol), 소듐-tert-부톡사이드(1.98 g, 20.60 mmol), 트리스(tert-부틸)포스핀 (0.14 g, 0.69 mmol)과 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.31 g, 0.34 mmol)을 톨루엔 50 mL에 용해한 후 110°C 에서 12 시간 교반하였다. 반응 종결 후 물을 붓고, 클로로포름을 이용하여 3회 추출하였다. 추출된 유기층을 MgSO_4 를 사용하여 건조시킨 후 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하고, 에틸 아세테이트 용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 0.54 g(수득율 = 63%)을 얻었다.

[0526] $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CD_2Cl_2)[ppm] δ = 9.18-9.14 (d, 2H), 8.90-8.86 (d, 4H), 7.85-7.64 (m, 12H), 7.54-7.50 (m, 3H), 7.41-7.36 (t, 2H), 7.16-7.11(t, 2H), 6.71-6.67 (t, 2H). Mass: $\text{C}_{39}\text{H}_{27}\text{N}_4\text{O}$ calcd. 598.19; found. 598.19

[0527] [실시예]

[0528] 실시예 1

[0529] 애노드로는 코닝(corning)사의 $15\Omega/\text{cm}^2(1000\text{\AA})$ ITO 유리 기판을 $50\text{mm} \times 50\text{mm} \times 0.5\text{mm}$ 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각각 10분 동안 초음파 세정한 후 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정한 다음, 진공 증착 장치에 장착하였다.

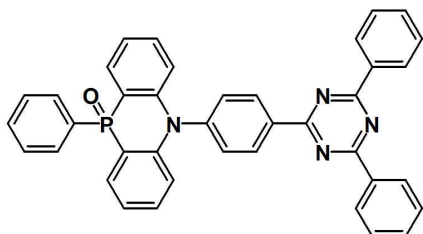
[0530] 상기 유리 상부에 DNTPD를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0531] 상기 정공 수송층 상부에 B보조층으로 CBP진공 증착하여 100 Å 두께를 형성한 다음, 청색 인광 도펀트로서 FIrpic과 호스트로서 화합물1을 300:15% 의 중량비로 동시 증착함으로써 300Å 두께의 청색 발광층을 형성하였다.

[0532] 이어서, 상기 발광층 상부에 TSP0를 진공 증착하여 100Å 두께의 정공 차단층을 형성하였고, 정공 차단층 상부에 ET1 : Liq를 50:50% 비율로 300 Å 두께의 전자 수송층을 진공 증착하였다.

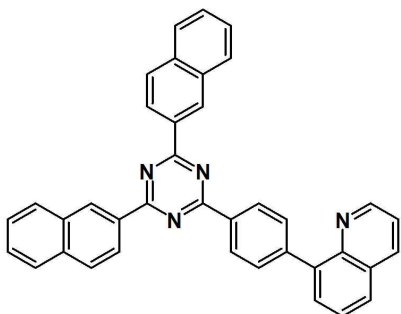
[0533] 상기 전자 수송층 상부에 전자 주입층으로 Liq 20 Å 두께를 형성한 다음, 캐소드로 Al를 진공 증착하여 1000Å 두께의 캐소드를 형성하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0534] <화합물 1>



[0535]

[0536] <ET 1>

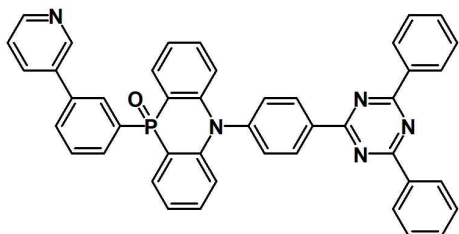


[0537]

[0538] **실시예 2**

[0539] 발광층에 화합물 1 대신 하기 화합물 2를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0540] <화합물 2>

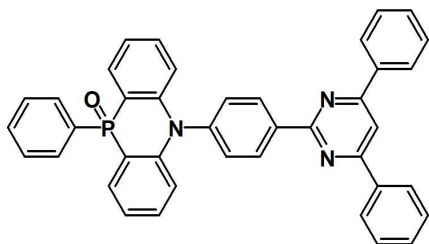


[0541]

[0542] **실시예 3**

[0543] 발광층에 화합물 1 대신 하기 화합물 3를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0544] <화합물 3>

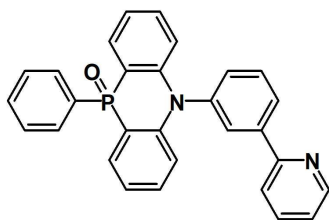


[0545]

[0546] **실시예 4**

[0547] 발광층에 화합물 1 대신 하기 화합물 4를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0548] <화합물 4>

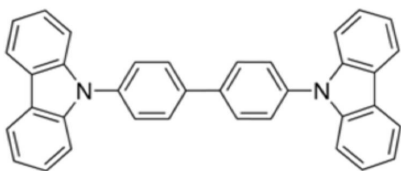


[0549]

[0550] **비교예 1**

[0551] 발광층에 화합물 1 대신 하기 CBP를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0552] <CBP>

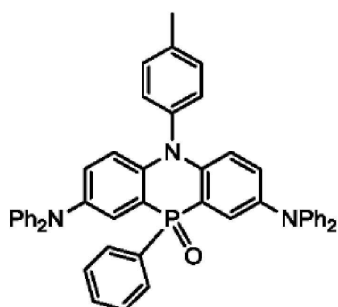


[0553]

[0554] **비교예 2**

[0555] 발광층에 화합물 1 대신 하기 비교 화합물 1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0556] <비교 화합물 1>



[0557]

[0558] **평가예 1**

[0559] 상기 실시예 1 내지 4 및 비교예 1 내지 4에서 제작된 유기 발광 소자의 구동전압, 발광 효율 및 색좌표를 Keithley SMU 236 및 휘도계 PR650을 이용하여 600 nit에서 측정하여, 그 결과를 [표 1]에 나타내었다.

표 1

	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	색좌표
실시예 1 (화합물1)	5.1	27.4	(0.18, 0.31)
실시예 2 (화합물2)	5.3	26.8	(0.18, 0.30)
실시예 3 (화합물3)	5.2	25.2	(0.18, 0.32)
실시예 4 (화합물4)	5.9	23.8	(0.17, 0.29)
비교예 1 (CBP)	7.8	18.3	(0.18, 0.30)
비교예 2 (비교 화합물 1)	4.8	8.2	(0.18, 0.33)

[0561] 상기 표 1로부터 실시예 1 내지 4의 유기 발광 소자의 구동 전압이 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자의 구동 전압보다 낮음을 확인할 수 있다. 또한, 실시예 1 내지 4의 유기 발광 소자는 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자에 비하여 발광 효율 특성 또한 우수함을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0562] 10: 유기 발광 소자
110: 제1전극
150: 유기층
190: 제2전극

도면

도면1

10

190
150
110