



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0058715
(43) 공개일자 2022년05월10일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07F 7/08 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
H01L 27/32 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/52 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07F 7/0805 (2018.08)
C09K 11/06 (2022.01)

(21) 출원번호 10-2020-0142519

(22) 출원일자 2020년10월29일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

경상국립대학교산학협력단

경상남도 진주시 진주대로 501 (가좌동)

(72) 발명자

엄현아

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

김윤희

경상남도 진주시 가좌안골길21번길 5, 101동 110
3호 (가좌동, 가좌제일풍경채)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

리엔목특허법인

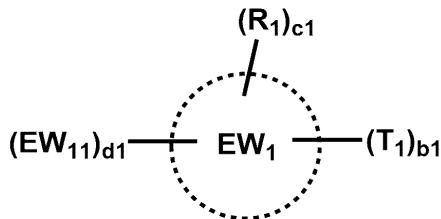
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 **헤테로고리 화합물, 이를 포함한 발광 소자 및 이를 포함한 전자 장치**

(57) 요약

하기 화학식 1로 표시된 헤테로고리 화합물, 이를 포함한 발광 소자 및 상기 발광 소자를 포함한 전자 장치가 개시된다:

<화학식 1>



상기 화학식 1에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

대표도 - 도1

<u>10</u>
150
130
110

(52) CPC특허분류

H01L 27/32 (2013.01)
H01L 51/0094 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
H01L 51/5072 (2013.01)
H01L 51/5092 (2013.01)
H01L 51/5096 (2013.01)
H01L 51/5262 (2013.01)
C09K 2211/1018 (2013.01)

(72) 발명자

권순기

경상남도 진주시 가좌안골길21번길 5, 101동 1103호 (가좌동, 가좌제일풍경채)

안희춘

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

박지현

경상남도 통영시 용남면 대곡길 12, 105동 106호 (통영청구하이츠아파트)

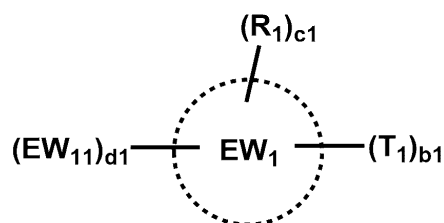
명세서

청구범위

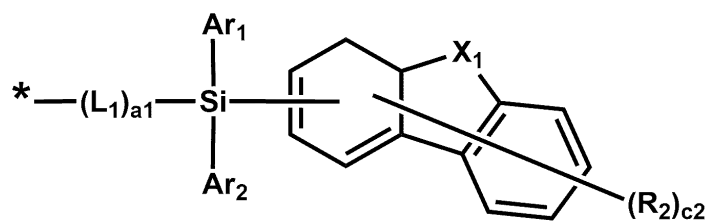
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는, 헤테로고리 화합물:

<화학식 1>



<화학식 2>



상기 화학식 1 중

EW₁은 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

EW₁₁은 -CN이고,

d₁은 0 또는 1이고,

단, EW₁이 π 전자 결핍성 함질소 C₁-C₆₀시클릭 그룹(π electron-depleted nitrogen-containing C₁-C₆₀ cyclic group)이거나 d₁은 1이고,

T₁은 상기 화학식 2로 표시된 그룹이고,

b₁은 1 내지 5의 정수 중 하나이고,

상기 화학식 2 중

X₁은 0 또는 S이고,

L₁은 단일 결합, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

a₁은 0 내지 5의 정수 중 하나이고,

Ar₁ 및 Ar₂는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 π 전자 과잉 C₃-C₆₀시클릭 그룹(π electron-rich C₃-C₆₀ cyclic group)이고,

상기 화학식 1 및 2 중

R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 적어도 하

나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알킬닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, 또는 $-C(=O)(Q_1)$ 이고,

c1 및 c2는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중 하나이고,

상기 R_{10a} 는,

중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 또는 니트로기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, $-B(Q_{11})(Q_{12})$, $-C(=O)(Q_{11})$, $-S(=O)_2(Q_{11})$, $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알킬닐기, 또는 C_1-C_{60} 알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알킬닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$, $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6-C_{60} 아릴옥시기, 또는 C_6-C_{60} 아릴티오기; 또는

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

상기 Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; -F; -Cl; -Br; -I; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{60} 알킬기; C_2-C_{60} 알케닐기; C_2-C_{60} 알킬닐기; C_1-C_{60} 알콕시기; 또는 중수소, -F, 시아노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹;이고,

상기 화학식 2 중 *는 상기 화학식 1 중 EW_1 과의 결합 사이트이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 EW_1 은, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 피리미딘 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 벤조퀴녹살린 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, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아크리딘 그룹 또는 피리도피라진 그룹인, 헤테로고리 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 EW_1 은,

벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 또는 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹이고,

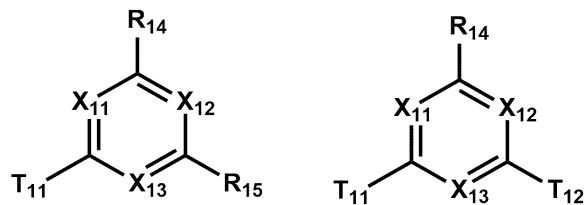
상기 d1은 1인, 헤테로고리 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 EW₁은 하기 화학식 1(a) 또는 1(b)인, 헤테로고리 화합물:

<화학식 1(a)> <화학식 1(b)>



상기 화학식 1(a) 및 1(b) 중,

X₁₁은 N 또는 C(R₁₁)이고,

X₁₂은 N 또는 C(R₁₂)이고,

X₁₃은 N 또는 C(R₁₃)이고,

X₁₁ 내지 X₁₃ 중 적어도 하나는 N 또는 C(CN)이고,

R₁₁ 내지 R₁₅에 대한 설명은 상기 R₁에 대한 설명을 참조하고,

T₁₁ 및 T₁₂에 대한 설명은 상기 T₁에 대한 설명을 참조한다.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 X₁₁ 내지 X₁₃ 중 적어도 2개는 N인, 헤테로고리 화합물.

청구항 6

제4항에 있어서,

상기 X₁₁은 C(R₁₁)이고,

상기 X₁₂은 C(R₁₂)이고,

상기 X₁₃은 C(R₁₃)이고,

X₁₁ 내지 X₁₃ 중 적어도 하나는 C(CN)인, 헤테로고리 화합물.

청구항 7

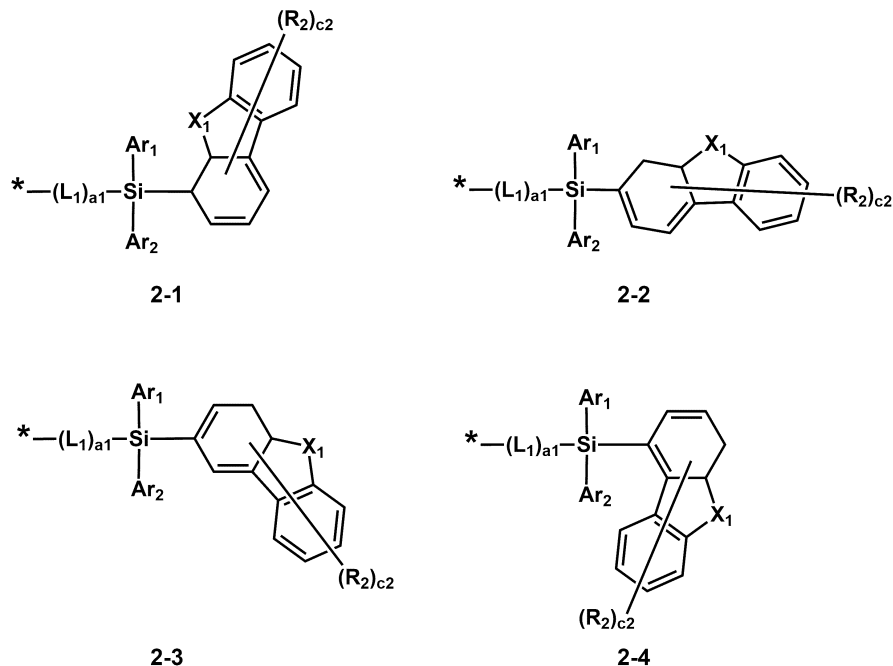
제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 b₁은, 1 또는 2인, 헤테로고리 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 화학식 2는, 하기 화학식 2-1 내지 2-4로 표시된 그룹 하나로 표시되는, 헤테로고리 화합물:



상기 화학식 2-1 내지 2-4 중,

X₁, L₁, a₁, Ar₁, Ar₂, R₂ 및 c₂는 각각 제1항에 기재된 바를 참조하고,

*는 상기 화학식 1 중 EW₁과의 결합 사이트이다.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 L₁은 단일 결합; 또는 적어도 하나의 상기 R_{10a}로 치환 또는 비치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 또는 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹;인, 헤테로고리 화합물.

청구항 10

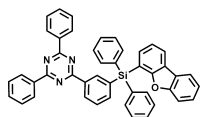
제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 및 Ar₂는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 상기 R_{10a}로 치환 또는 비치환된, 벤젠 그룹, 헵탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프틸렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 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, 펜타센 그룹, 헥사센 그룹, 펜타펜 그룹, 루비센 그룹, 코로넨 그룹, 오발렌 그룹, 피롤 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 나프토피롤 그룹, 나프토피란 그룹, 나프토티오펜 그룹, 나프토티롤 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디벤조카바졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 인데노카바졸 그룹, 인돌로카바졸 그룹, 벤조퓨로카바졸 그룹, 벤조티에노카바졸 그룹, 벤조실롤로카바졸 그룹, 트라이인돌로벤젠 그룹, 피롤로페난트렌 그룹, 퓨라노페난트렌 그룹, 티에노페난트렌 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹, (인돌로)페난트렌 그룹, (벤조퓨라노)페난트렌 그룹, 또는 (벤조티에노)페난트렌 그룹인, 헤테로고리 화합물.

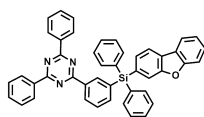
청구항 11

제1항에 있어서,

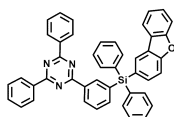
하기 화합물 1 내지 96 중에서 선택된, 헤테로고리 화합물:



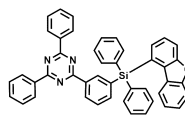
1



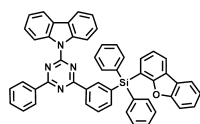
2



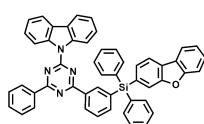
3



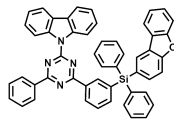
4



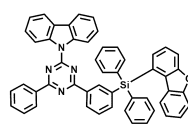
5



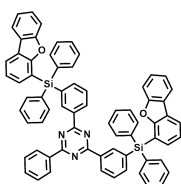
6



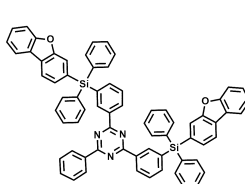
7



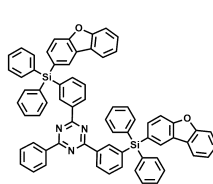
8



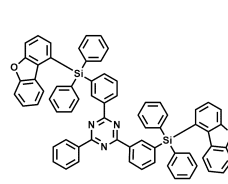
9



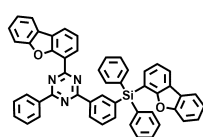
10



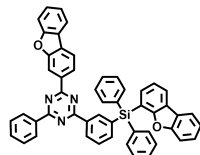
11



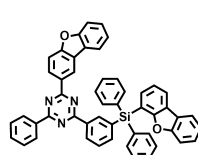
12



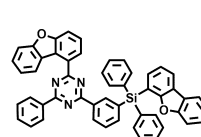
13



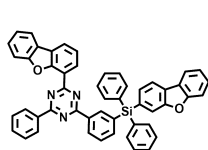
14



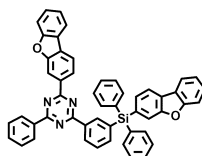
15



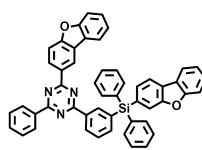
16



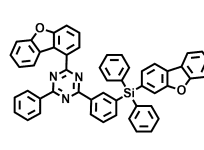
17



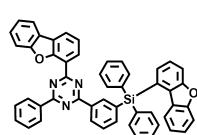
18



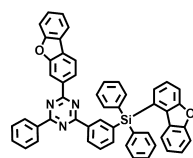
19



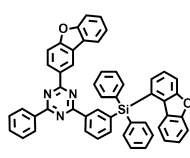
20



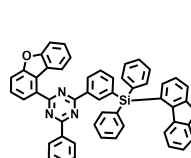
21



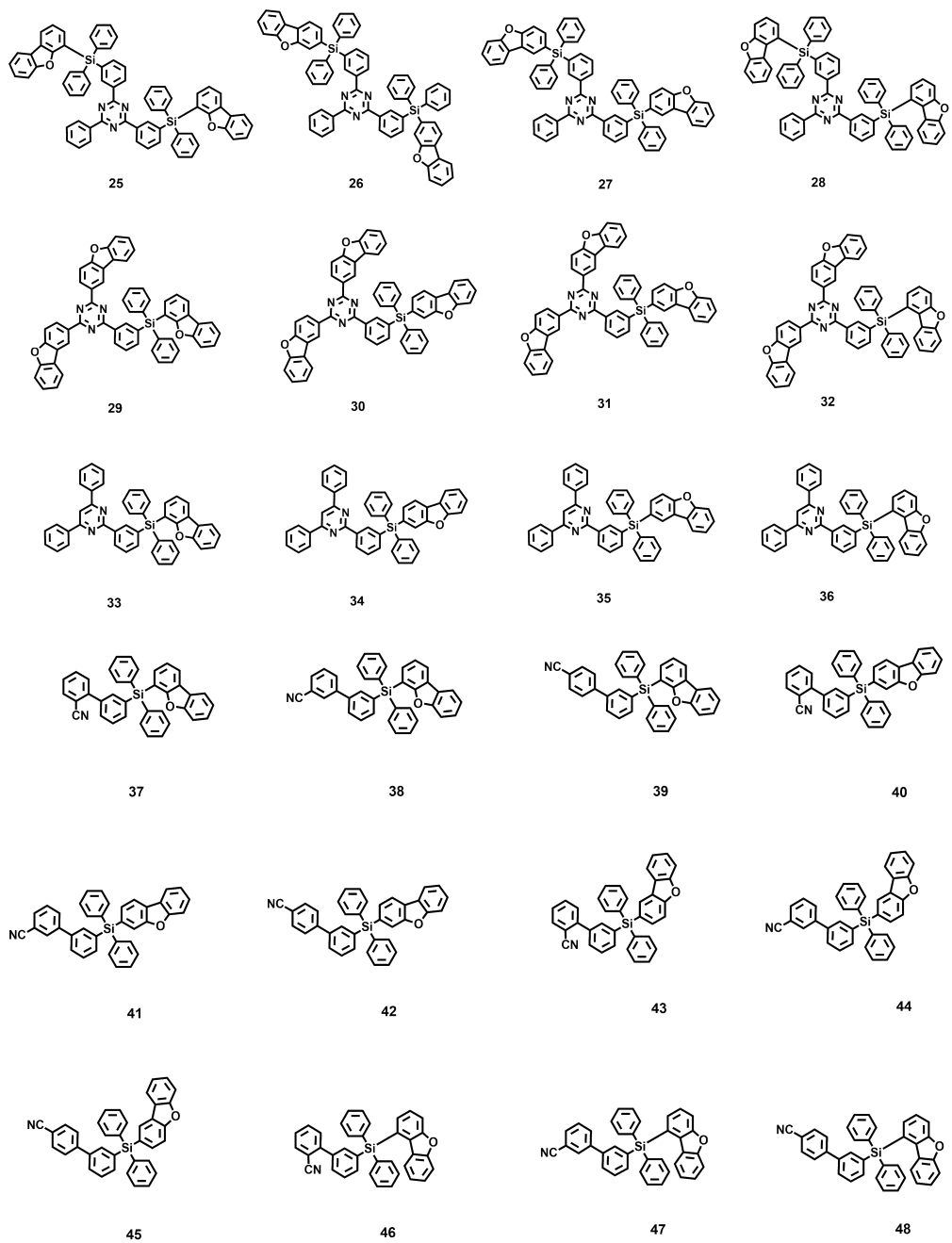
22

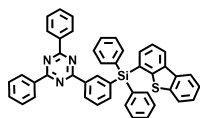


23

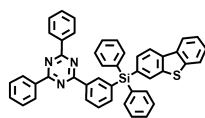


24

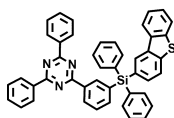




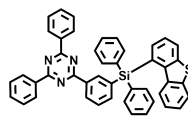
49



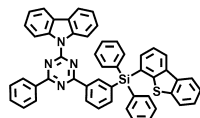
50



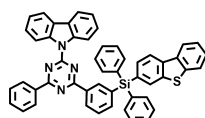
51



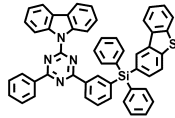
52



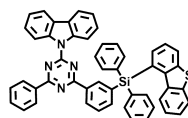
53



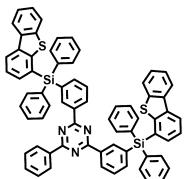
54



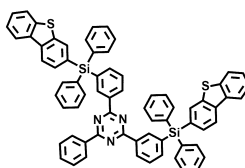
55



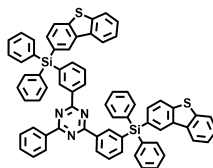
56



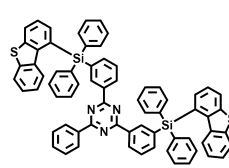
57



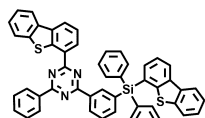
58



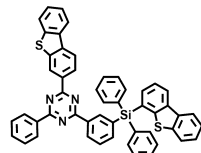
59



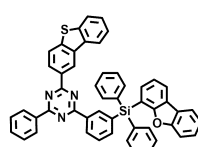
60



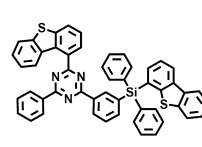
61



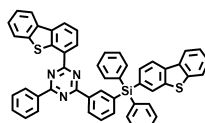
62



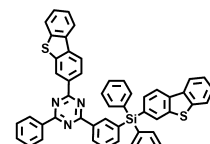
63



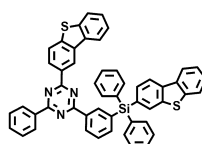
64



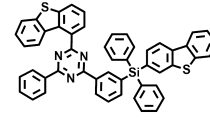
65



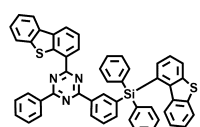
66



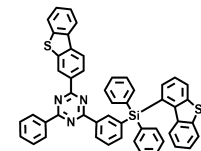
67



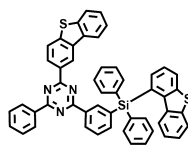
68



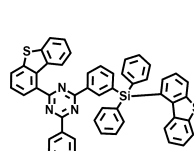
69



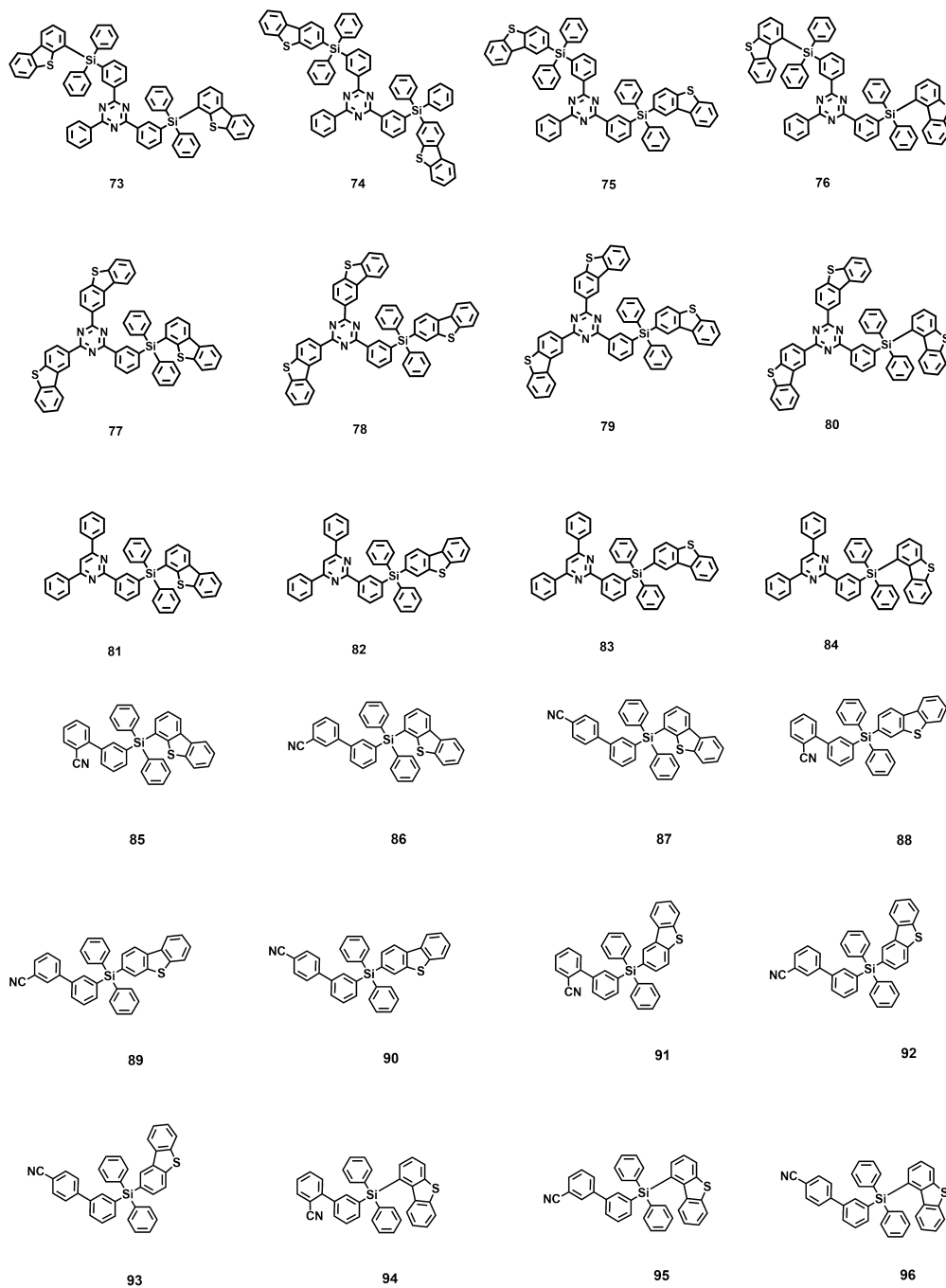
70



71



72



청구항 12

제1항에 있어서,

400nm 이상 및 465nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 청색광을 방출하고,

0.5 eV 이하의 일중항(S_1) 에너지 레벨과 삼중항(T_1) 에너지 레벨의 차를 갖는, 헤테로고리 화합물.

청구항 13

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 중간층;

을 포함하고,

상기 제1항 내지 제12항 중 어느 한 항의 헤테로고리 화합물을 포함한, 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

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

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

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

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 발광층 또는 전자 수송 영역 중 적어도 하나에 상기 헤테로고리 화합물이 포함되어 있는, 발광 소자.

청구항 16

제13항에 있어서,

상기 헤테로고리 화합물은 호스트의 역할을 하는, 발광 소자.

청구항 17

제14항에 있어서,

상기 제1전극의 외측에 배치되고, 상기 화학식 1로 표시된 헤테로고리 화합물을 포함한 제1캡핑층;

상기 제2전극의 외측에 배치되고, 상기 화학식 1로 표시된 헤테로고리 화합물을 포함한 제2캡핑층; 또는

상기 제1캡핑층 및 상기 제2캡핑층;

을 포함한, 발광 소자.

청구항 18

제14항의 발광 소자를 포함한, 전자 장치.

청구항 19

제18항에 있어서,

박막 트랜지스터를 더 포함하고,

상기 박막 트랜지스터는 소스 전극 및 드레인 전극을 포함하고,

상기 발광 소자의 제1전극이 상기 박막 트랜지스터의 소스 전극 및 드레인 전극 중 적어도 하나와 전기적으로 연결된, 전자 장치.

청구항 20

제18항에 있어서,

컬러 필터, 색변환층, 터치스크린층, 편광층, 또는 이의 임의의 조합을 더 포함한, 전자 장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 헤테로고리 화합물, 상기 헤테로고리 화합물을 포함한 발광 소자 및 상기 발광 소자를 포함한 전자 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 발광 소자 중 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서, 종래 소자에 비하여, 시야 각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하다.

[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

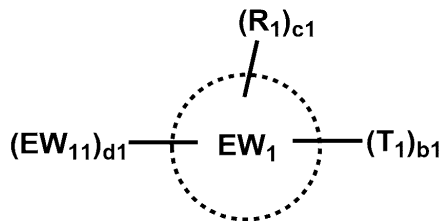
해결하려는 과제

[0004] 우수한 광효율을 갖는 화합물을 포함한 발광 소자 및 상기 발광 소자를 포함한 전자 장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

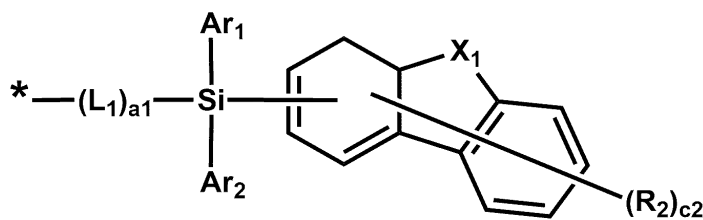
[0005] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는, 헤테로고리 화합물이 제공된다:

[0006] <화학식 1>



[0007]

[0008] <화학식 2>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1 중

[0011] EW₁은 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0012] EW₁₁은 -CN이고,

[0013] d₁은 0 또는 1이고,

[0014] 단, EW₁이 π 전자 결핍성 함질소 C₁-C₆₀시클릭 그룹(π electron-depleted nitrogen-containing C₁-C₆₀ cyclic group)이거나 d₁은 1이고,

[0015] T₁은 상기 화학식 2로 표시된 그룹이고,

[0016] b₁은 1 내지 5의 정수 중 하나이고,

- [0017] 상기 화학식 2 중
- [0018] X_1 은 0 또는 S이고,
- [0019] L_1 은 단일 결합, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0020] a_1 은 0 내지 5의 정수 중 하나이고,
- [0021] Ar_1 및 Ar_2 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 π 전자 과잉 C_3-C_{60} 시클릭 그룹(π electron-rich C_3-C_{60} cyclic group)이고,
- [0022] 상기 화학식 1 및 2 중
- [0023] R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, 또는 $-C(=O)(Q_1)$ 이고,
- [0024] c_1 및 c_2 는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중 하나이고,
- [0025] 상기 R_{10a} 는,
- [0026] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 또는 니트로기;
- [0027] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, $-B(Q_{11})(Q_{12})$, $-C(=O)(Q_{11})$, $-S(=O)_2(Q_{11})$, $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, 또는 C_1-C_{60} 알콕시기;
- [0028] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$, $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, C_6-C_{60} 아릴옥시기, 또는 C_6-C_{60} 아릴티오기; 또는
- [0029] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$, 또는 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$;이고,
- [0030] 상기 Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; -F; -Cl; -Br; -I; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{60} 알킬기; C_2-C_{60} 알케닐기; C_2-C_{60} 알키닐기; C_1-C_{60} 알콕시기; 또는 중수소, -F, 시아노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_1-C_{60} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹;이고,
- [0031] 상기 화학식 2 중 *는 상기 화학식 1 중 EW_1 과의 결합 사이트이다.
- [0032] 다른 측면에 따르면,
- [0033] 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 중간층을 포함하고, 상술한 바와 같은 헤테로고리 화합물을 포함한, 발광 소자가 제공된다.
- [0034] 또 다른 측면에 따르면, 상기 발광 소자를 포함한 전자 장치가 제공된다.

발명의 효과

[0035] 상기 헤테로고리 화합물은 고효율 및 장수명을 갖는 발광 소자의 제작에 사용될 수 있으며, 상기 발광 소자는 우수한 광효율 및 장수명을 갖는 고품위 전자 장치 제작에 사용될 수 있다.

도면의 간단한 설명

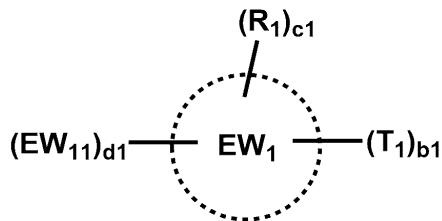
[0036] 도 1은 일 구현예를 따르는 발광 소자의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다.

도 2 및 도 3은 각각 일 구현예를 따르는 발광 장치의 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0037] 하기 화학식 1로 표시되는, 헤테로고리 화합물이 제공될 수 있다:

[0038] <화학식 1>



[0039]

[0040] 상기 화학식 1 중 EW_1 은 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

[0041]

일 구현예에 따르면 상기 화학식 1 중 EW_1 은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인텐 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저물 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인텐 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저물 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저물 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹일 수 있다.

[0042]

상기 화학식 1 중 EW_{11} 은 -CN 일 수 있다.

[0043]

상기 화학식 1 중 d_1 은 0 또는 1일 수 있다. 상기 d_1 은 EW_{11} 의 개수이다.

[0044]

단, 상기 화학식 1 중 EW_1 은 π 전자 결핍성 함질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹(π electron-depleted nitrogen-containing C_1 - C_{60} cyclic group)이거나 d_1 은 1일 수 있다. 즉, EW_1 이 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고 π 전자 결핍성 함질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹인 경우, d_1 은 0 또는 1일 수 있으나, EW_1 이 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이나 π 전자 결핍성 함질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹이 아닌 경우, d_1 은 1일 수 있다.

[0045]

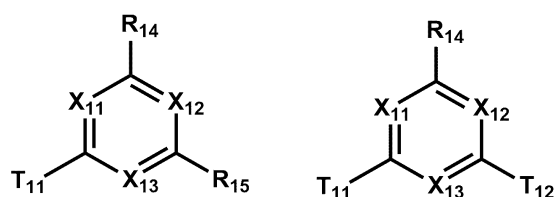
일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 EW_1 은, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥

사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 피리미딘 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 벤조퀴녹살린 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, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아크리딘 그룹 또는 피리도피라진 그룹일 수 있다.

[0046] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 EW₁은, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 또는 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 (1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹이고, 상기 d1은 1일 수 있다.

[0047] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 EW₁은 하기 화학식 1(a) 또는 1(b)일 수 있다:

[0048] <화학식 1(a)> <화학식 1(b)>



[0049] 상기 화학식 1(a) 및 1(b) 중,
 [0050] X₁₁은 N 또는 C(R₁₁)일 수 있고,
 [0051] X₁₂은 N 또는 C(R₁₂)일 수 있고,
 [0052] X₁₃은 N 또는 C(R₁₃)일 수 있고,
 [0053] X₁₁ 내지 X₁₃ 중 적어도 하나는 N 또는 C(CN)일 수 있고,
 [0054] R₁₁ 내지 R₁₅에 대한 설명은 본 명세서 중 R₁에 대한 설명을 참조하고,
 [0055] T₁₁ 및 T₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 T₁에 대한 설명을 참조한다.

[0056] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1(a) 및 1(b) 중 상기 X₁₁ 내지 X₁₃ 중 적어도 2개는 N일 수 있다.

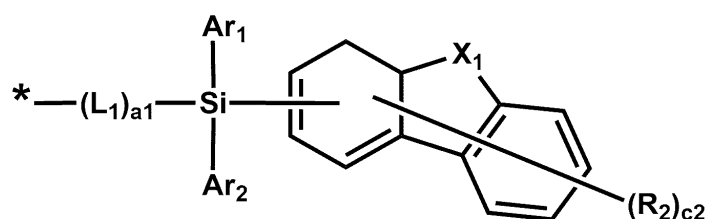
[0057] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1(a) 및 1(b) 중 상기 X₁₁은 C(R₁₁)이고, 상기 X₁₂은 C(R₁₂)이고, 상기 X₁₃은 C(R₁₃)이고, X₁₁ 내지 X₁₃ 중 적어도 하나는 C(CN)일 수 있다.

[0058] 상기 화학식 1 중 b1은 1 내지 5의 정수 중 하나일 수 있다. 상기 b1은 T₁의 개수이다.

[0059] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 b1은 1 또는 2일 수 있다.

[0060] 상기 화학식 1 중 T₁은 하기 화학식 2로 표시된 그룹일 수 있다:

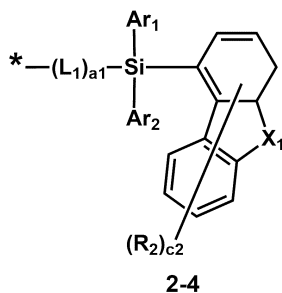
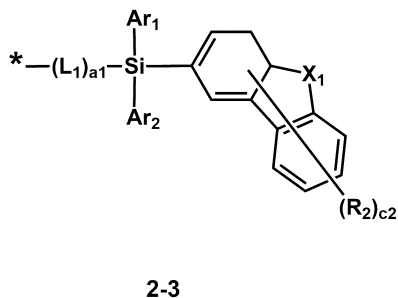
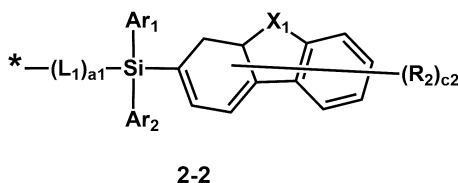
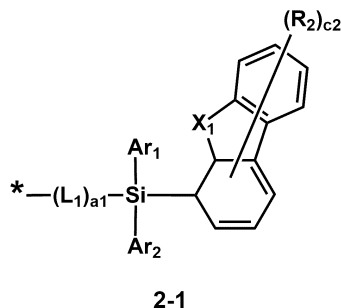
[0061] <화학식 2>



[0062] 상기 화학식 2 중 X₁은 O 또는 S일 수 있다.

- [0065] 예를 들어, 상기 화학식 2 중 X_1 은 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0066] 상기 화학식 2 중 L_1 은 단일 결합, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹일 수 있다.
- [0067] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2 중 L_1 은 단일 결합; 또는 적어도 하나의 상기 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 또는 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹;일 수 있다.
- [0068] 예를 들어, 상기 화학식 2 중 L_1 은 단일 결합; 또는 적어도 하나의 상기 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된, 벤젠 그룹;일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0069] 상기 화학식 2 중 a_1 은 0 내지 5의 정수 중 하나일 수 있다. a_1 은 L_1 의 개수이다.
- [0070] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2 중 a_1 은 0, 1, 또는 2일 수 있다.
- [0071] 상기 화학식 2 중 Ar_1 및 Ar_2 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 π 전자 과잉 C_3-C_{60} 시클릭 그룹(π electron-rich C_3-C_{60} cyclic group)일 수 있다.
- [0072] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2 중 Ar_1 및 Ar_2 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 상기 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된, 벤젠 그룹, 헵탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프틸렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 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, 펜타센 그룹, 헥사센 그룹, 펜타켄 그룹, 루비센 그룹, 코로넨 그룹, 오발렌 그룹, 피롤 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 나프토피롤 그룹, 나프토피란 그룹, 나프토티오펜 그룹, 나프토티롤 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디벤조카바졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 인데노카바졸 그룹, 인돌로카바졸 그룹, 벤조퓨로카바졸 그룹, 벤조티에노카바졸 그룹, 벤조실롤로카바졸 그룹, 트라이인돌로벤젠 그룹, 피롤로페난트렌 그룹, 퓨라노페난트렌 그룹, 티에노페난트렌 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹, (인돌로)페난트렌 그룹, (벤조퓨라노)페난트렌 그룹, 또는 (벤조티에노)페난트렌 그룹일 수 있다.
- [0073] 예를 들어, 상기 화학식 2 중 Ar_1 및 Ar_2 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 상기 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된, 벤젠 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0074] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2는, 하기 화학식 2-1 내지 2-4로 표시된 그룹 하나로 표시될 수 있다:



[0075]

[0076] 상기 화학식 2-1 내지 2-4 중,

[0077] X_1 , L_1 , a_1 , Ar_1 , Ar_2 , R_2 및 c_2 는 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0078] *는 상기 화학식 1 중 EW_1 과의 결합 사이트이다.

[0079] 상기 화학식 1 및 2 중 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, 또는 $-C(=O)(Q_1)$ 일 수 있다.

[0080] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 및 2 중 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기 또는 니트로기;

[0081] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany), 노르보나닐기(norbornany), 노르보네닐기(norborneny), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$, $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_1 - C_{20} 알킬기, C_2 - C_{20} 알케닐기, C_2 - C_{20} 알키닐기 또는 C_1 - C_{20} 알콕시기;

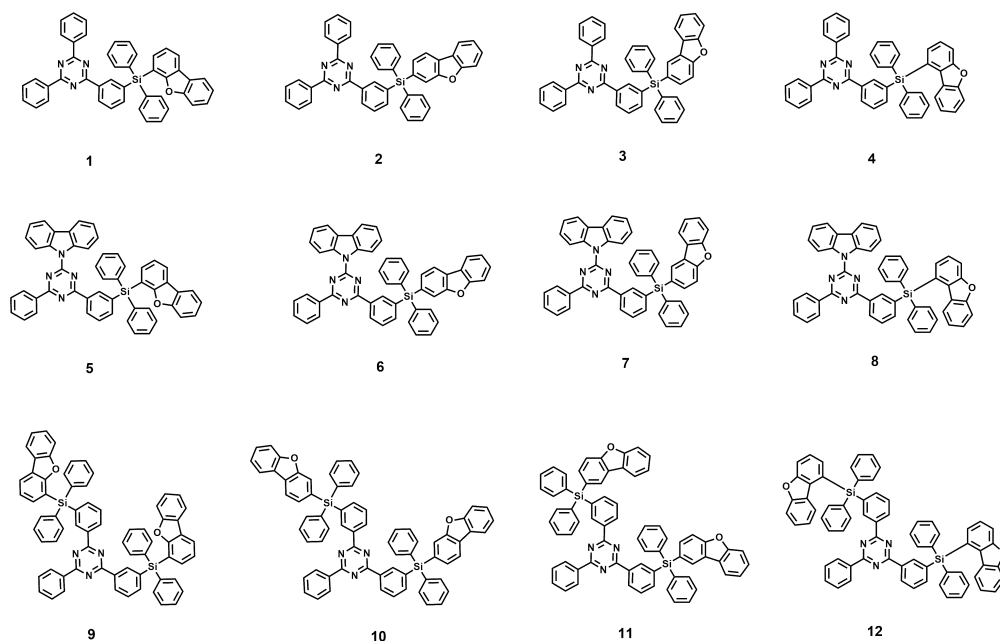
[0082] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_2 - C_{20} 알케닐기, C_2 - C_{20} 알키닐기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤릴기, 티오펜릴기, 퓨라닐기, 이미다졸릴기, 피라졸릴기, 티아졸릴기, 이소티아졸릴기, 옥사졸릴기, 이속사졸릴기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌릴기, 인돌릴기, 인다졸릴기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸릴기, 페

난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, $-\text{Si}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})(\text{Q}_{33})$, $-\text{N}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{B}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{31})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{31})$, $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기; 또는

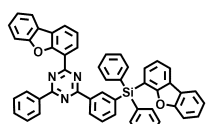
[0083] $-\text{Si}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)(\text{Q}_3)$, $-\text{N}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, $-\text{B}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_1)$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_1)$, $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, 또는 $-\text{P}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$; 일 수 있다.

[0084] 상기 화학식 1 및 2 중 c1 및 c2는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중 하나일 수 있다. c1은 R₁의 개수이고, c2는 R₂의 개수이다.

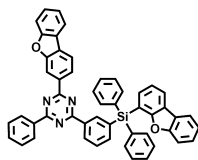
[0085] 일 구현예에 따르면, 상기 헤테로고리 화합물은, 하기 화합물 1 내지 96 중에서 선택될 수 있다:



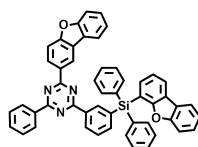
[0086]



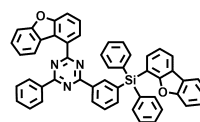
13



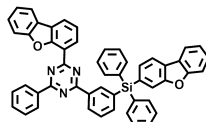
14



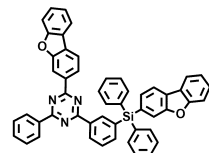
15



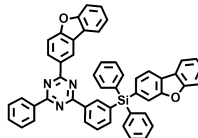
16



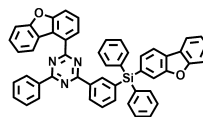
17



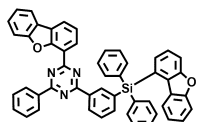
18



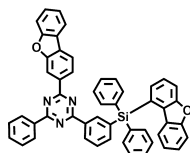
19



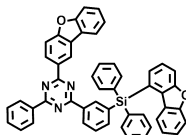
20



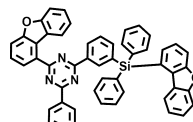
21



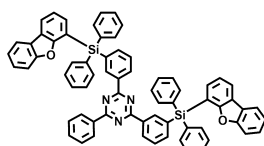
22



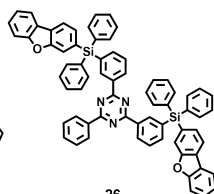
23



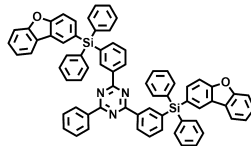
24



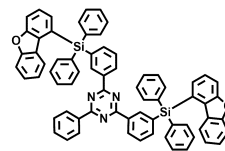
25



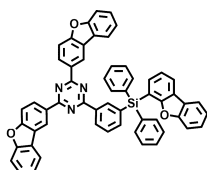
26



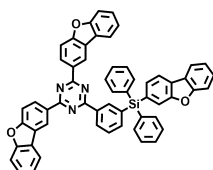
27



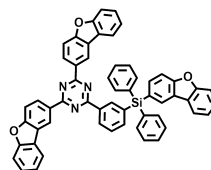
28



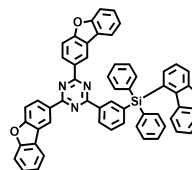
29



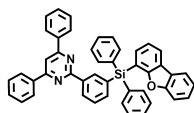
30



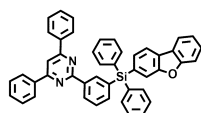
31



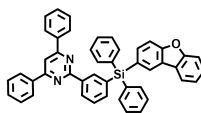
32



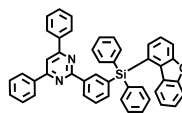
33



34



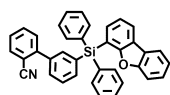
35



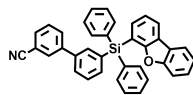
36

[0087]

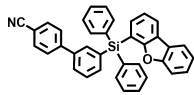
[0088]



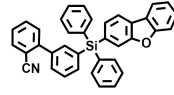
37



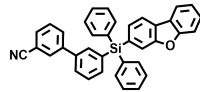
38



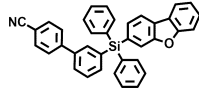
39



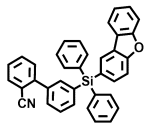
40



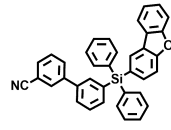
41



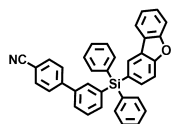
42



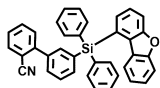
43



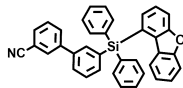
44



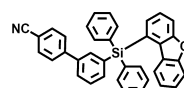
45



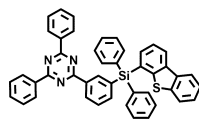
46



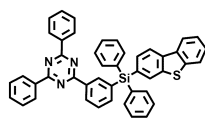
47



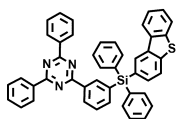
48



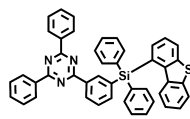
49



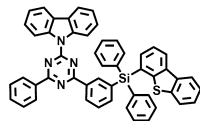
50



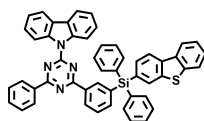
51



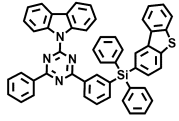
52



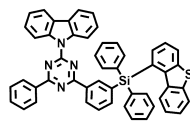
53



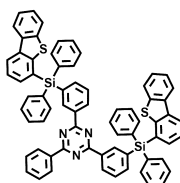
54



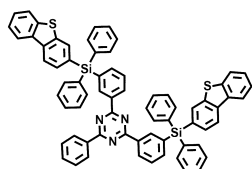
55



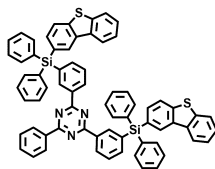
56



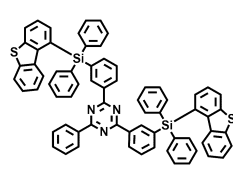
57



58



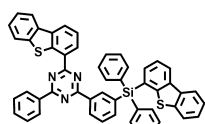
59



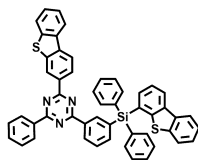
60

[0089]

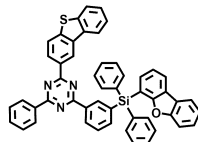
[0090]



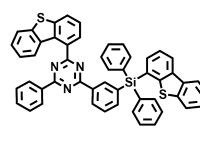
61



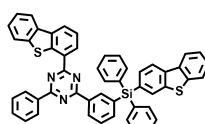
62



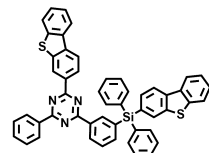
63



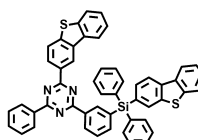
64



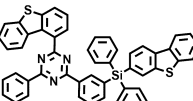
65



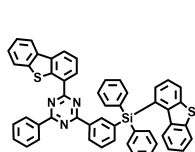
66



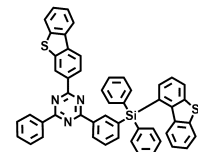
67



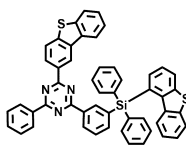
68



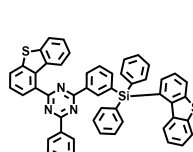
69



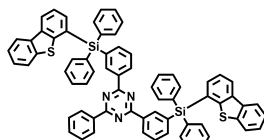
70



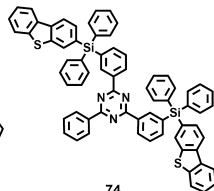
71



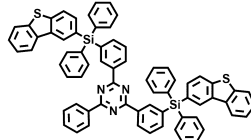
72



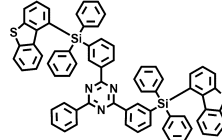
73



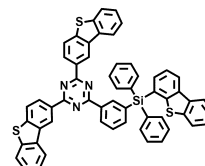
74



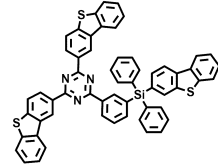
75



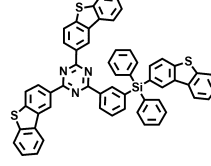
76



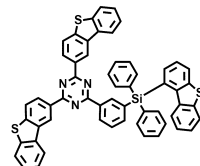
77



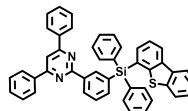
78



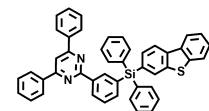
79



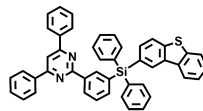
80



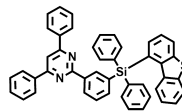
81



82



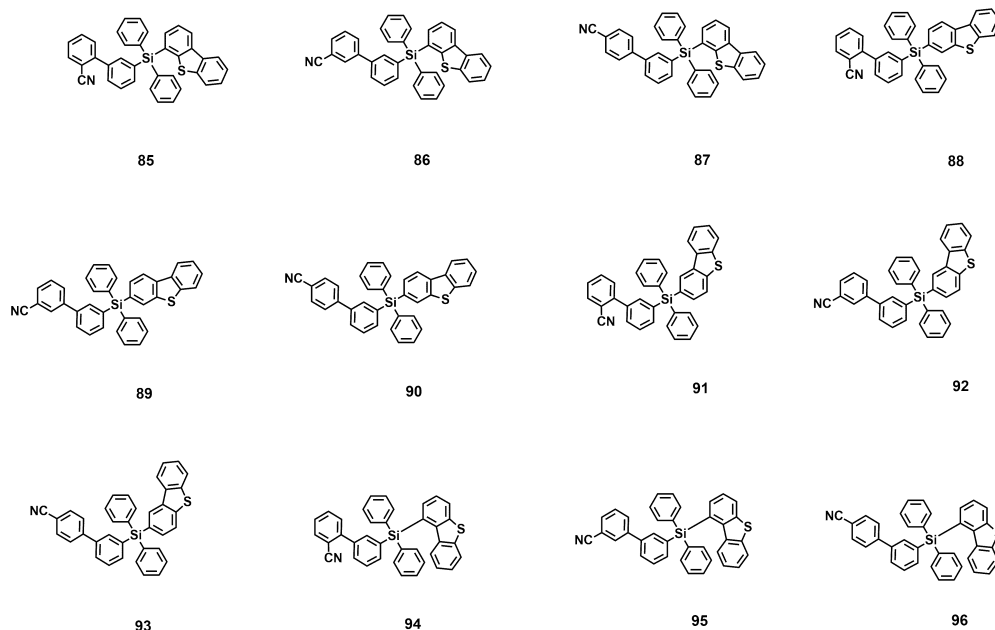
83



84

[0091]

[0092]



[0093]

[0094]

상기 헤테로고리 화합물은, i) 상기 화학식 1 내지 2로 표시된 그룹이고, 상기 화학식 2 중 X_1 이 O 또는 S이다. X_1 이 O또는 S일 경우, N인 경우와 비교하여 유사한 LUMO 에너지 레벨을 갖고 있으면서 상대적으로 낮은 HOMO 에너지 레벨을 갖게 되어 큰 에너지 밴드갭 특성을 가질 수 있게 된다. 상기 화학식 1 내지 2로 표시된 그룹은 입체장애 효과로 인해 삼중항(T_1) 에너지 레벨 향상되므로, 일중항(S_1) 에너지 레벨과 삼중항(T_1) 에너지 레벨의 차가 증대된다. 또한, ii) 상기 화학식 1 중 EW_1 이 π 전자 결핍성 합질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹이거나 d1이 1이므로, 전자 수용 능력이 향상되어, 전자 수송 특성이 증대된다. 따라서, 상기 헤테로고리 화합물은 고효율 지연형광 발광재료로 사용될 수 있고, 상기 헤테로고리 화합물을 포함한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는, 저구동 전압, 우수한 광효율 및 장수명을 가질 수 있다.

[0095]

일 구현예에 따르면, 상기 헤테로고리 화합물은 400 nm 이상 및 465nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 청색광을 방출하고,

[0096]

0.5 eV 이하의 일중항(S_1) 에너지 레벨과 삼중항(T_1) 에너지 레벨의 차를 가질 수 있다.

[0097]

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물의 합성 방법은 후술하는 합성에 및/또는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.

[0098]

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 중 적어도 하나는 발광 소자(예를 들면, 유기 발광 소자)에 사용될 수 있다. 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 중간층;을 포함하고, 본 명세서에 기재된 바와 같은 화학식 1로 표시된 헤테로고리 화합물을 포함한, 발광 소자가 제공된다.

[0099]

일 구현예에 따르면,

[0100]

상기 발광 소자의 제1전극은 애노드이고,

[0101]

상기 발광 소자의 제2전극은 캐소드이고,

[0102]

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

[0103]

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

[0104]

상기 전자 수송 영역은, 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0105]

다른 구현예에 따르면, 상기 헤테로고리 화합물은 상기 발광 소자의 제1전극 및 제2 전극 사이에 포함될 수 있

다. 따라서, 상기 헤테로고리 화합물은 상기 발광 소자의 중간층, 예를 들면, 상기 중간층의 발광층 또는 전자 수송 영역에 포함될 수 있다.

[0106] 다른 구현예에 따르면, 상기 발광 소자의 중간층 중 발광층은 도펀트 및 호스트를 포함하고, 상기 호스트에 상기 헤테로고리 화합물이 포함되어 있을 수 있다. 즉, 상기 헤테로고리 화합물은 호스트의 역할을 할 수 있다. 상기 발광층은 적색광, 녹색광, 청색광 및/또는 백색광을 방출할 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층은 청색광을 방출할 수 있다. 상기 청색광은, 예를 들어, 400nm 내지 465nm 범위의 최대 발광 파장을 가질 수 있다. 상기 발광층 및 호스트에 관한 보다 상세한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0107] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 발광 소자는 제1전극의 외측 또는 제2전극의 외측에 배치된 캡핑층을 포함할 수 있다.

[0108] 예를 들어, 상기 발광 소자는 제1전극의 외측에 배치된 제1캡핑층 및 제2전극의 외측에 배치된 제2캡핑층 중 적어도 하나를 더 포함하고, 상기 제1캡핑층 및 제2캡핑층 중 적어도 하나에 상기 화학식 1로 표시된 헤테로고리 화합물이 포함되어 있을 수 있다. 상기 제1캡핑층 및/또는 제2캡핑층에 대한 보다 상세한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0109] 일 구현예에 따르면, 상기 발광 소자는, 상기 제1전극의 외측에 배치되고, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함한 제1캡핑층; 상기 제2전극의 외측에 배치되고, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함한 제2캡핑층; 또는 상기 제1캡핑층 및 상기 제2캡핑층;을 포함할 수 있다.

[0110] 본 명세서 중 "(중간층 및/또는 캡핑층이) 헤테로고리 화합물을 포함한다"란, "(중간층 및/또는 캡핑층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 헤테로고리 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0111] 예를 들어, 상기 중간층 및/또는 캡핑층은, 상기 헤테로고리 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 중간층은 상기 헤테로고리 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 수송 영역에 존재할 수 있음)할 수 있다.

[0112] 본 명세서 중 "중간층"은 상기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 배치된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다.

[0113] 또 다른 측면에 따르면, 상술한 바와 같은 발광 소자를 포함한 전자 장치가 제공된다. 상기 전자 장치는 박막 트랜지스터를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 장치는 소스 전극 및 드레인 전극을 포함한 박막 트랜지스터를 더 포함하고, 상기 발광 소자의 제1전극은 상기 소스 전극 또는 드레인 전극과 전기적으로 연결될 수 있다. 한편, 상기 전자 장치는, 컬러 필터, 색변환층, 터치스크린층, 편광층, 또는 이의 임의의 조합을 더 포함할 수 있다. 상기 전자 장치에 대한 보다 상세한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0114] [도 1에 대한 설명]

[0115] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 발광 소자(10)는 제1전극(110), 중간층(130) 및 제2전극(150)을 포함한다.

[0116] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.

[0117] [제1전극(110)]

[0118] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(150)의 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 유리 기판 또는 플라스틱 기판을 사용할 수 있다. 또는, 상기 기판은 가요성 기판일 수 있으며, 예를 들어, 폴리이미드(polyimide), 폴리에틸렌 테레프탈레이트(PET; polyethylene terephthalate), 폴리카보네이트(polycarbonate), 폴리에틸렌 나프탈레이트(polyethylene naphthalate), 폴리아릴레이트(PAR; polyarylate), 폴리에테리미드(polyether imide), 또는 이의 임의의 조합과 같이, 내열성 및 내구성이 우수한 플라스틱을 포함할 수 있다.

[0119] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 상기 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 제1전극용 물질로서, 정공 주입이 용이한

고일함수 물질을 이용할 수 있다.

[0120] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질로서, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO), 또는 이의 임의의 조합을 이용할 수 있다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질로서, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), 또는 이의 임의의 조합을 이용할 수 있다.

[0121] 상기 제1전극(110)은 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조 또는 복수의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있다.

[0122] [중간층(130)]

[0123] 상기 제1전극(110) 상부에는 중간층(130)이 배치되어 있다. 상기 중간층(130)은 발광층을 포함한다.

[0124] 상기 중간층(130)은, 상기 제1전극(110)과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극(150) 사이에 배치된 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.

[0125] 상기 중간층(130)은 각종 유기물 외에, 유기금속 화합물과 같은 금속-함유 화합물, 양자점과 같은 무기물 등도 더 포함할 수 있다.

[0126] 한편, 상기 중간층(130)은, i) 상기 제1전극(110)과 상기 제2전극(150) 사이에 순차적으로 적층되어 있는 2 이상의 발광 단위(emitting unit) 및 ii) 상기 2개의 발광 단위 사이에 배치된 전하 생성층(charge generation layer)을 포함할 수 있다. 상기 중간층(130)이 상술한 바와 같은 발광 단위 및 전하 생성층을 포함할 경우, 상기 발광 소자(10)는 탠덤(tandem) 발광 소자일 수 있다.

[0127] [중간층(130) 중 정공 수송 영역]

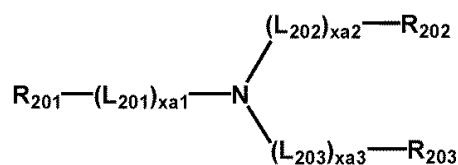
[0128] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진(consist of) 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조, ii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 복수의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

[0129] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0130] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 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 있다.

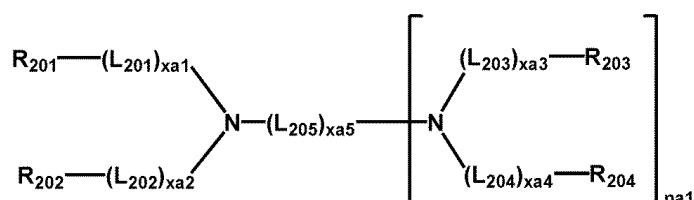
[0131] 상기 정공 수송 영역은, 하기 화학식 201로 표시되는 화합물, 하기 화학식 202로 표시되는 화합물, 또는 이의 임의의 조합(any combination thereof)을 포함할 수 있다:

[0132] <화학식 201>



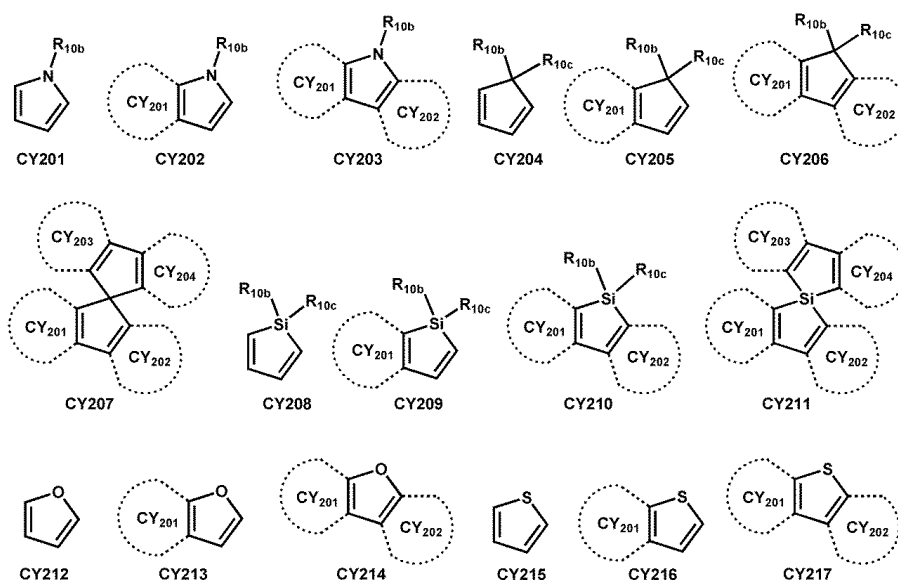
[0133]

[0134] <화학식 202>



[0135]

- [0136] 상기 화학식 201 및 202 중,
- [0137] L_{201} 내지 L_{204} 는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0138] L_{205} 은, $*-O-*'$, $*-S-*'$, $*-N(Q_{201})-*'$, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{20} 알킬렌기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{20} 알케닐렌기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0139] $xa1$ 내지 $xa4$ 는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중 하나이고,
- [0140] $xa5$ 는 1 내지 10의 정수 중 하나이고,
- [0141] R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0142] R_{201} 과 R_{202} 는, 선택적으로(optionally) 단일 결합, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_5 알킬렌기 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2 - C_5 알케닐렌기를 통하여 서로 연결되어, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_8 - C_{60} 폴리스클릭 그룹(예를 들면, 카바졸 그룹 등)을 형성할 수 있고(예를 들면, 하기 화합물 HT16 등을 참조함),
- [0143] R_{203} 과 R_{204} 는, 선택적으로(optionally) 단일 결합, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_5 알킬렌기 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2 - C_5 알케닐렌기를 통하여 서로 연결되어, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_8 - C_{60} 폴리스클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0144] $na1$ 은 1 내지 4의 정수 중 하나일 수 있다.
- [0145] 예를 들어, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 하기 화학식 CY201 내지 CY217로 표시된 그룹 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



- [0146]
- [0147] 상기 화학식 CY201 내지 CY217 중, R_{10b} 및 R_{10c} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_{10a} 에 대한 설명을 참조하고, 고리 CY_{201} 내지 고리 CY_{204} 는 서로 독립적으로, C_3 - C_{20} 카보시클릭 그룹 또는 C_1 - C_{20} 헤테로시클릭 그룹이고, 상기 화학식 CY201 내지 CY217 중 적어도 하나의 수소는 본 명세서에 기재된 바와 같은 R_{10a} 로 치환 또는 비치환될 수 있다.
- [0148] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 CY201 내지 CY217 중 고리 CY_{201} 내지 고리 CY_{204} 는 서로 독립적으로, 벤젠 그

룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹 또는 안트라센 그룹일 수 있다.

[0149] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 상기 화학식 CY201 내지 CY203으로 표시된 그룹 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0150] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201은, 상기 화학식 CY201 내지 CY203으로 표시된 그룹 중 적어도 하나 및 상기 화학식 CY204 내지 CY217로 표시된 그룹 중 적어도 하나를 각각 포함할 수 있다.

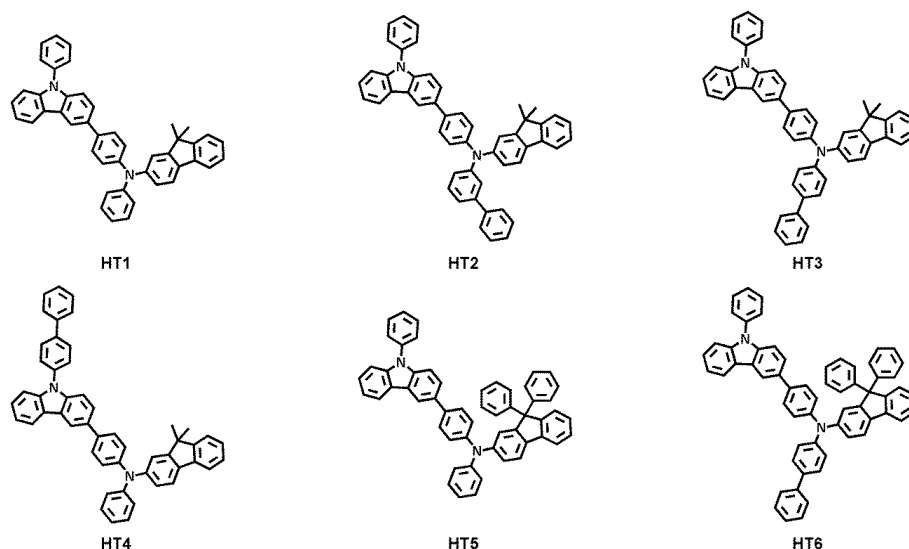
[0151] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 x_{a1} 은 1이고, R_{201} 은 상기 화학식 CY201 내지 CY203 중 하나로 표시된 그룹이고, x_{a2} 는 0이고, R_{202} 는 상기 화학식 CY204 내지 CY207 중 하나로 표시된 그룹일 수 있다.

[0152] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 상기 화학식 CY201 내지 CY203으로 표시된 그룹을 비포함할 수 있다.

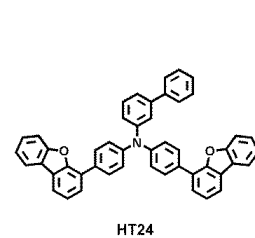
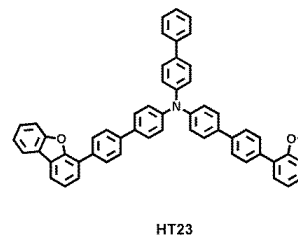
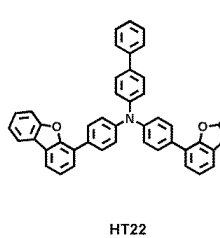
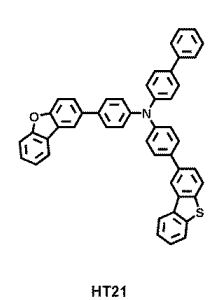
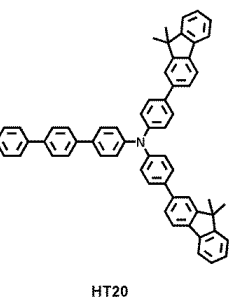
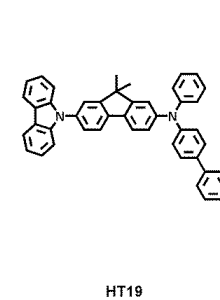
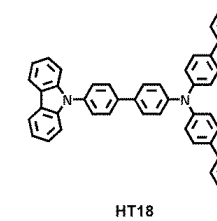
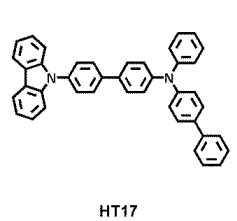
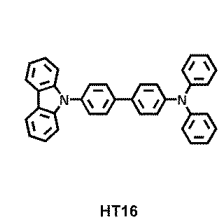
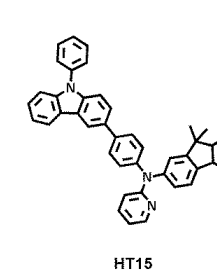
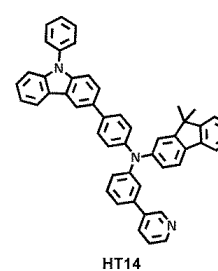
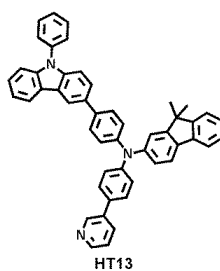
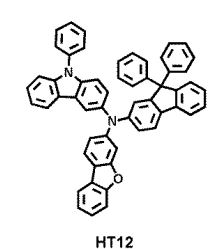
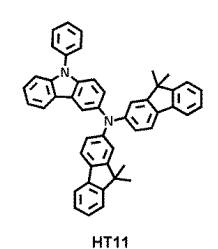
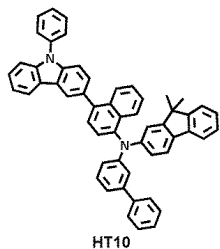
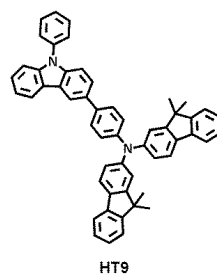
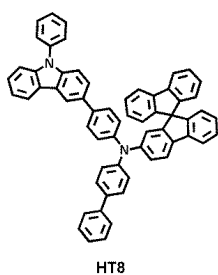
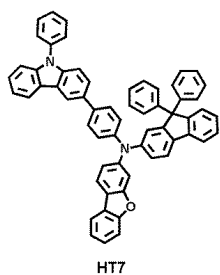
[0153] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 상기 화학식 CY201 내지 CY203으로 표시된 그룹을 비포함하고, 상기 화학식 CY204 내지 CY217로 표시된 그룹 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0154] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201 및 202 각각은, 상기 화학식 CY201 내지 CY217로 표시된 그룹을 비포함할 수 있다.

[0155] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT6 중 하나, 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))), 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:



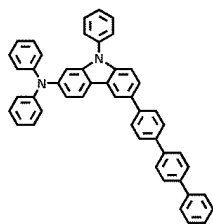
[0156]



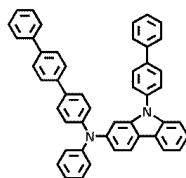
[0157]

[0158]

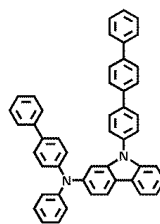
[0159]



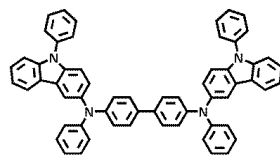
HT25



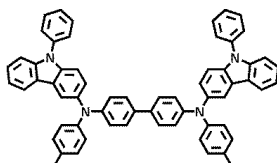
HT26



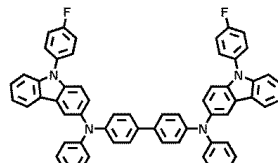
HT27



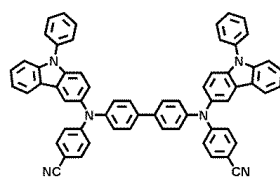
HT28



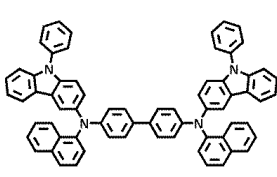
HT29



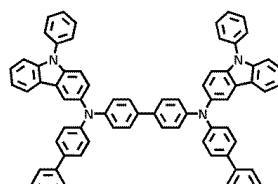
HT30



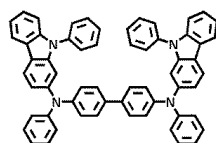
HT31



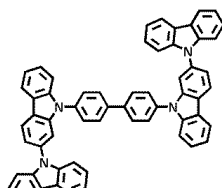
HT32



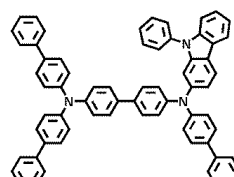
HT33



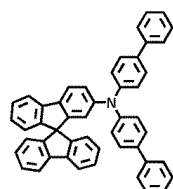
HT34



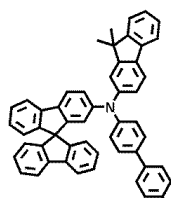
HT35



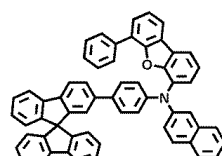
HT36



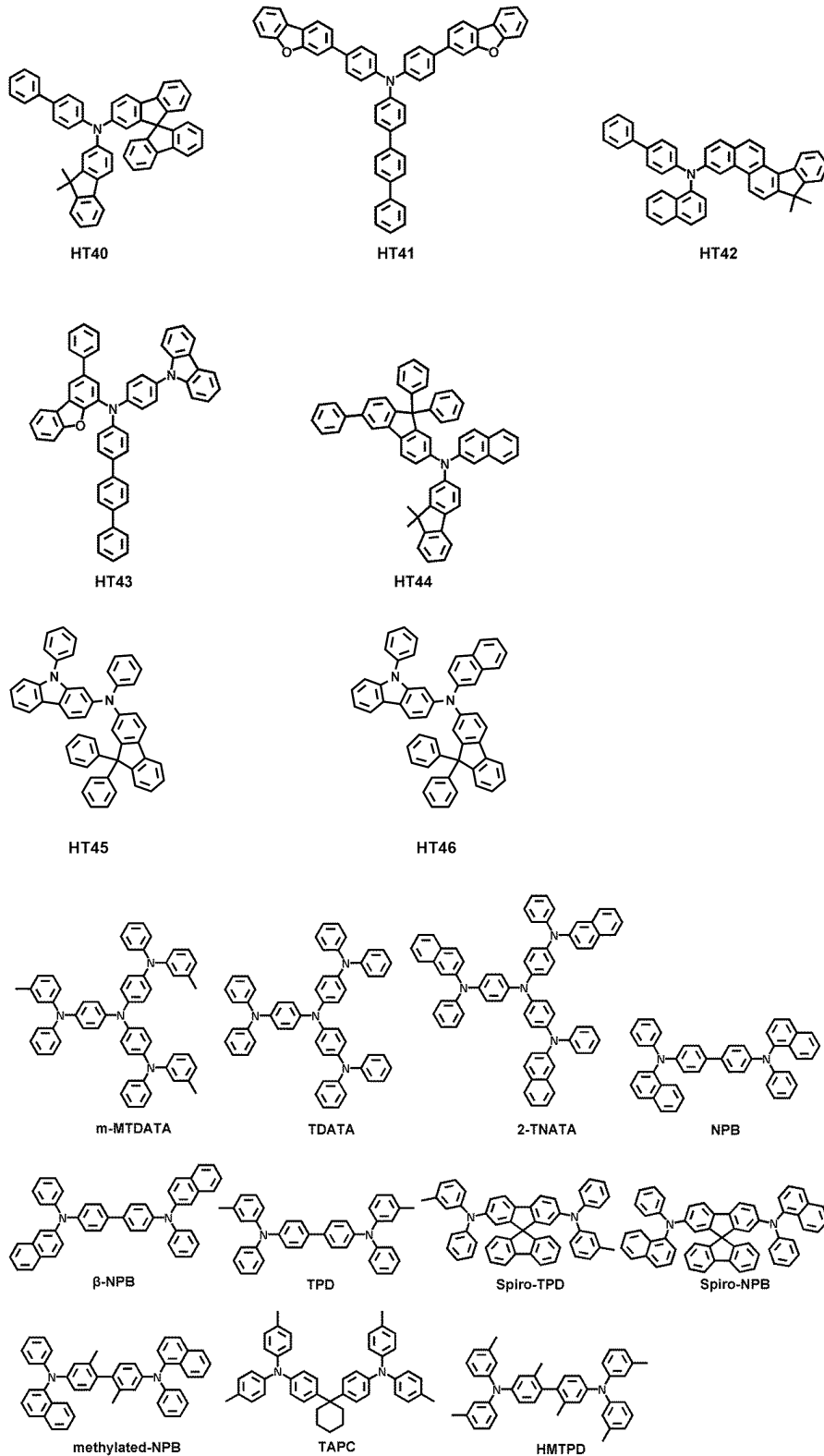
HT37



HT38



HT39



상기 정공 수송 영역의 두께는 약 50Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 4000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층, 정공 수송층, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 경우, 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 상승 없이 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 발광층으로부터 정공 수송 영역으로의 전자 유출(leakage)을

방지하는 역할을 하는 층이다. 상술한 정공 수송 영역에 포함될 수 있는 물질이 발광 보조층 및 전자 저지층에 포함될 수 있다.

[0168] [p-도펀트]

[0169] 상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하-생성 물질을 포함할 수 있다. 상기 전하-생성 물질은 상기 정공 수송 영역 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산(예를 들면, 전하-생성 물질로 이루어진(consist of) 단일층 형태)되어 있을 수 있다.

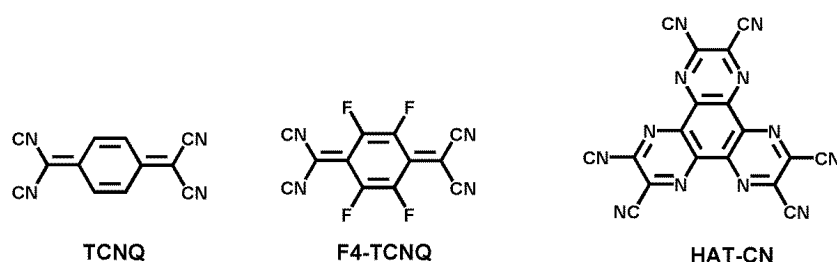
[0170] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0171] 예를 들어, 상기 p-도펀트의 LUMO 에너지 레벨은 -3.5eV 이하일 수 있다.

[0172] 일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 시아노기-함유 화합물, 원소 EL1 및 원소 EL2-함유 화합물, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

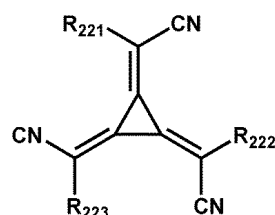
[0173] 상기 퀴논 유도체의 예는, TCNQ, F4-TCNQ 등을 포함할 수 있다.

[0174] 상기 시아노기-함유 화합물의 예는 HAT-CN, 하기 화학식 221로 표시된 화합물 등을 포함할 수 있다.



[0175]

[0176] <화학식 221>



[0177]

[0178] 상기 화학식 221 중,

[0179] R_{221} 내지 R_{223} 은 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0180] 상기 R_{221} 내지 R_{223} 중 적어도 하나는 서로 독립적으로, 시아노기; -F; -Cl; -Br; -I; 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, 또는 이의 임의의 조합으로 치환된 C_1-C_{20} 알킬기; 또는 이의 임의의 조합으로 치환된, C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

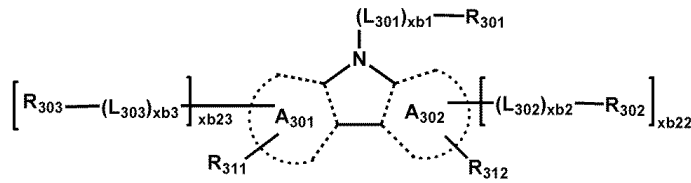
[0181] 상기 원소 EL1 및 원소 EL2-함유 화합물 중, 원소 EL1은 금속, 준금속, 또는 이의 조합이고, 원소 EL2는 비금속, 준금속, 또는 이의 조합일 수 있다.

[0182] 상기 금속의 예는, 알칼리 금속(예를 들면, 리튬(Li), 나트륨(Na), 칼륨(K), 루비듐(Rb), 세슘(Cs) 등); 알칼리 토금속(예를 들면, 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 스트론튬(Sr), 바륨(Ba) 등); 전이 금속(예를 들면, 티타늄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 바나듐(V), 니오브(Nb), 탄탈(Ta), 크롬(Cr), 몰리브덴(Mo), 텅스텐(W), 망간(Mn), 테크네튬(Tc), 레늄(Re), 철(Fe), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 코발트(Co), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 니켈(Ni), 팔라듐(Pd), 백금(Pt), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au) 등); 전이후 금속(예를 들면, 아연(Zn), 인듐(In), 주석(Sn) 등); 란타나이드 금속(예를 들면, 란타넘(La), 세륨(Ce), 프라세오디뮴(Pr), 네오디뮴(Nd), 프로메튬(Pm), 사마륨(Sm), 유로퓸(Eu), 가돌리늄(Gd), 터븀(Tb), 디스프로슘(Dy), 홀뮴(Ho), 어븀(Er), 툴륨(Tm), 이터븀(Yb), 루테튬(Lu) 등); 등을 포함할 수 있다.

- [0183] 상기 준금속의 예는, 실리콘(Si), 안티모니(Sb), 텔루륨(Te) 등을 포함할 수 있다.
- [0184] 상기 비금속의 예는, 산소(O), 할로젠(예를 들면, F, Cl, Br, I 등) 등을 포함할 수 있다.
- [0185] 예를 들어, 상기 원소 EL1 및 원소 EL2-함유 화합물은, 금속 산화물, 금속 할로겐화물(예를 들면, 금속 불화물, 금속 염화물, 금속 브롬화물, 금속 요오드화물 등), 준금속 할로겐화물(예를 들면, 준금속 불화물, 준금속 염화물, 준금속 브롬화물, 준금속 요오드화물 등), 금속 텔루라이드, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0186] 상기 금속 산화물의 예는, 텅스텐 옥사이드(예를 들면, WO, W₂O₃, WO₂, WO₃, W₂O₅ 등), 바나듐 옥사이드(예를 들면, VO, V₂O₃, VO₂, V₂O₅ 등), 몰리브덴 옥사이드(MoO, Mo₂O₃, MoO₂, MoO₃, Mo₂O₅ 등), 레늄 옥사이드(예를 들면, ReO₃ 등) 등을 포함할 수 있다.
- [0187] 상기 금속 할로겐화물의 예는, 알칼리 금속 할로겐화물, 알칼리 토금속 할로겐화물, 전이 금속 할로겐화물, 전이후 금속 할로겐화물, 란타나이드 금속 할로겐화물 등을 포함할 수 있다.
- [0188] 상기 알칼리 금속 할로겐화물의 예는, LiF, NaF, KF, RbF, CsF, LiCl, NaCl, KCl, RbCl, CsCl, LiBr, NaBr, KBr, RbBr, CsBr, LiI, NaI, KI, RbI, CsI 등을 포함할 수 있다.
- [0189] 상기 알칼리 토금속 할로겐화물의 예는, BeF₂, MgF₂, CaF₂, SrF₂, BaF₂, BeCl₂, MgCl₂, CaCl₂, SrCl₂, BaCl₂, BeBr₂, MgBr₂, CaBr₂, SrBr₂, BaBr₂, BeI₂, MgI₂, CaI₂, SrI₂, BaI₂ 등을 포함할 수 있다.
- [0190] 상기 전이 금속 할로겐화물의 예는, 티타늄 할로겐화물(예를 들면, TiF₄, TiCl₄, TiBr₄, TiI₄ 등), 지르코늄 할로겐화물(예를 들면, ZrF₄, ZrCl₄, ZrBr₄, ZrI₄ 등), 하프늄 할로겐화물(예를 들면, HfF₄, HfCl₄, HfBr₄, HfI₄ 등), 바나듐 할로겐화물(예를 들면, VF₃, VCl₃, VBr₃, VI₃ 등), 니오브 할로겐화물(예를 들면, NbF₃, NbCl₃, NbBr₃, NbI₃ 등), 탄탈 할로겐화물(예를 들면, TaF₃, TaCl₃, TaBr₃, TaI₃ 등), 크롬 할로겐화물(예를 들면, CrF₃, CrCl₃, CrBr₃, CrI₃ 등), 몰리브덴 할로겐화물(예를 들면, MoF₃, MoCl₃, MoBr₃, MoI₃ 등), 텅스텐 할로겐화물(예를 들면, WF₃, WCl₃, WBr₃, WI₃ 등), 망간 할로겐화물(예를 들면, MnF₂, MnCl₂, MnBr₂, MnI₂ 등), 테크네튬 할로겐화물(예를 들면, TcF₂, TcCl₂, TcBr₂, TcI₂ 등), 레늄 할로겐화물(예를 들면, ReF₂, ReCl₂, ReBr₂, ReI₂ 등), 철 할로겐화물(예를 들면, FeF₂, FeCl₂, FeBr₂, FeI₂ 등), 루테튬 할로겐화물(예를 들면, RuF₂, RuCl₂, RuBr₂, RuI₂ 등), 오스뮴 할로겐화물(예를 들면, OsF₂, OsCl₂, OsBr₂, OsI₂ 등), 코발트 할로겐화물(예를 들면, CoF₂, CoCl₂, CoBr₂, CoI₂ 등), 로듐 할로겐화물(예를 들면, RhF₂, RhCl₂, RhBr₂, RhI₂ 등), 이리듐 할로겐화물(예를 들면, IrF₂, IrCl₂, IrBr₂, IrI₂ 등), 니켈 할로겐화물(예를 들면, NiF₂, NiCl₂, NiBr₂, NiI₂ 등), 팔라듐 할로겐화물(예를 들면, PdF₂, PdCl₂, PdBr₂, PdI₂ 등), 백금 할로겐화물(예를 들면, PtF₂, PtCl₂, PtBr₂, PtI₂ 등), 구리 할로겐화물(예를 들면, CuF, CuCl, CuBr, CuI 등), 은 할로겐화물(예를 들면, AgF, AgCl, AgBr, AgI 등), 금 할로겐화물(예를 들면, AuF, AuCl, AuBr, AuI 등) 등을 포함할 수 있다.
- [0191] 상기 전이후 금속 할로겐화물의 예는, 아연 할로겐화물(예를 들면, ZnF₂, ZnCl₂, ZnBr₂, ZnI₂ 등), 인듐 할로겐화물(예를 들면, InI₃ 등), 주석 할로겐화물(예를 들면, SnI₂ 등), 등을 포함할 수 있다.
- [0192] 상기 란타나이드 금속 할로겐화물의 예는, YbF, YbF₂, YbF₃, SmF₃, YbCl, YbCl₂, YbCl₃, SmCl₃, YbBr, YbBr₂, YbBr₃, SmBr₃, YbI, YbI₂, YbI₃, SmI₃ 등을 포함할 수 있다.
- [0193] 상기 준금속 할로겐화물의 예는, 안티모니 할로겐화물(예를 들면, SbCl₅ 등) 등을 포함할 수 있다.
- [0194] 상기 금속 텔루라이드의 예는, 알칼리 금속 텔루라이드(예를 들면, Li₂Te, Na₂Te, K₂Te, Rb₂Te, Cs₂Te 등), 알칼리 토금속 텔루라이드(예를 들면, BeTe, MgTe, CaTe, SrTe, BaTe 등), 전이 금속 텔루라이드(예를 들면, TiTe₂, ZrTe₂, HfTe₂, V₂Te₃, Nb₂Te₃, Ta₂Te₃, Cr₂Te₃, Mo₂Te₃, W₂Te₃, MnTe, TcTe, ReTe, FeTe, RuTe, OsTe, CoTe, RhTe, IrTe, NiTe, PdTe, PtTe, Cu₂Te, CuTe, Ag₂Te, AgTe, Au₂Te 등), 전이후 금속 텔루라이드(예를 들면, ZnTe 등), 란타나이드 금속 텔루라이드(예를 들면, LaTe, CeTe, PrTe, NdTe, PmTe, EuTe, GdTe, TbTe, DyTe, HoTe, ErTe, TmTe, YbTe, LuTe 등) 등을 포함할 수 있다.

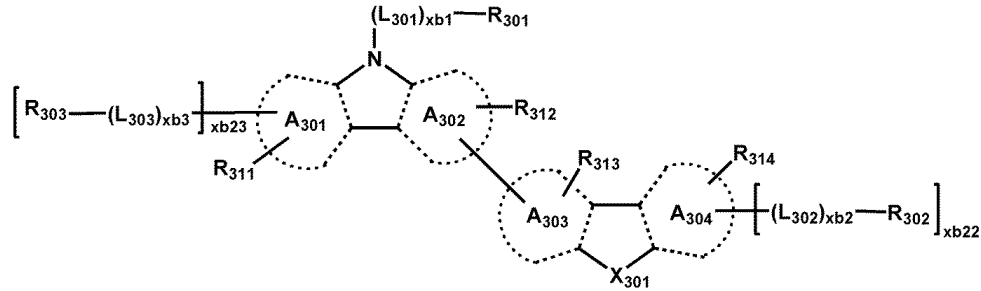
- [0195] [중간층(130) 중 발광층]
- [0196] 상기 발광 소자(10)가 풀 컬러 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및/또는 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중 2 이상의 물질이 층구분 없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.
- [0197] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트, 형광 도펀트, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0198] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은, 호스트 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부일 수 있다.
- [0199] 또는, 상기 발광층은 양자점을 포함할 수 있다.
- [0200] 한편, 상기 발광층은 지연 형광 물질을 포함할 수 있다. 상기 지연 형광 물질은 발광층 중 호스트 또는 도펀트의 역할을 할 수 있다.
- [0201] 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.
- [0202] [호스트]
- [0203] 상기 호스트는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 화합물, 하기 화학식 301로 표시되는 화합물 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:
- [0204] <화학식 301>
- [0205] $[Ar_{301}]_{xb11}-[(L_{301})_{xb1}-R_{301}]_{xb21}$
- [0206] 상기 화학식 301 중,
- [0207] Ar_{301} 및 L_{301} 은 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0208] $xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0209] $xb1$ 은 0 내지 5의 정수 중 하나이고,
- [0210] R_{301} 은, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$, $-N(Q_{301})(Q_{302})$, $-B(Q_{301})(Q_{302})$, $-C(=O)(Q_{301})$, $-S(=O)_2(Q_{301})$, 또는 $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$ 이고,
- [0211] $xb21$ 은 1 내지 5의 정수 중 하나이고,
- [0212] Q_{301} 내지 Q_{303} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 Q_1 에 대한 설명을 참조한다.
- [0213] 예를 들어, 상기 화학식 301 중 $xb11$ 이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{301} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0214] 다른 예로서, 상기 호스트는, 하기 화학식 301-1로 표시된 화합물, 하기 화학식 301-2로 표시된 화합물, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:

[0215] <화학식 301-1>



[0216]

[0217] <화학식 301-2>



[0218]

[0219] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중,

[0220] 고리 A301 내지 고리 A304는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R10a로 치환 또는 비치환된 C3-C60카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R10a로 치환 또는 비치환된 C1-C60헤테로시클릭 그룹이고,

[0221] X301은 O, S, N-[(L304)xb4-R304], C(R304)(R305), 또는 Si(R304)(R305)이고,

[0222] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0223] L301, xb1 및 R301에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

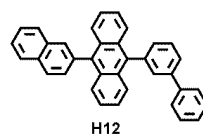
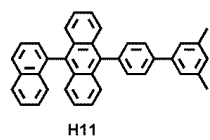
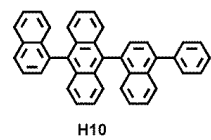
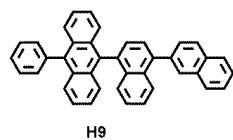
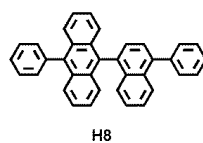
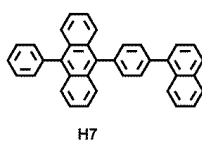
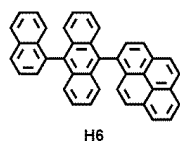
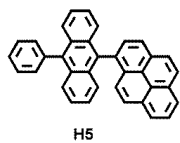
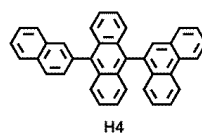
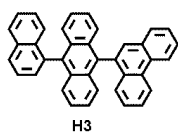
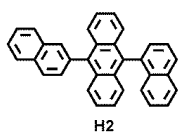
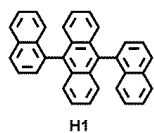
[0224] L302 내지 L304에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L301에 대한 설명을 참조하고,

[0225] xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,

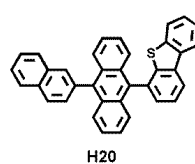
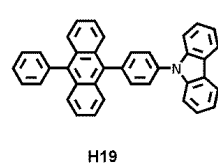
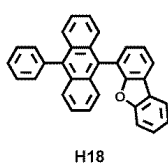
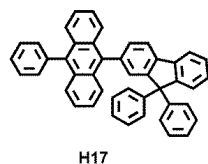
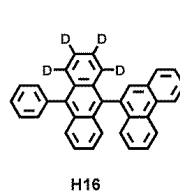
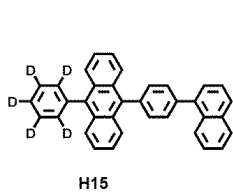
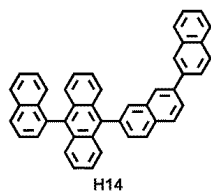
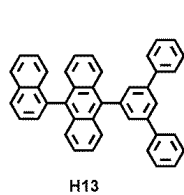
[0226] R302 내지 R305 및 R311 내지 R314에 대한 설명은 각각 상기 R301에 대한 설명을 참조한다.

[0227] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 알칼리토 금속 착체, 전이후 금속 착체, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 Be 착체(예를 들면, 하기 화합물 H55), Mg 착체, Zn 착체, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

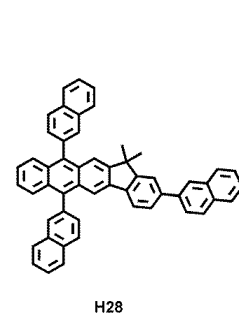
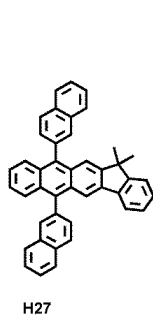
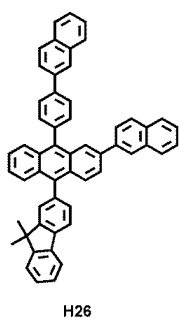
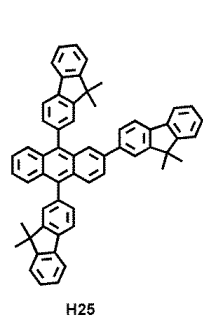
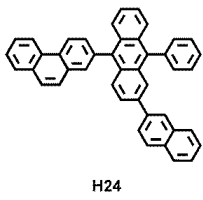
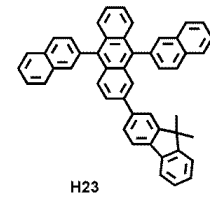
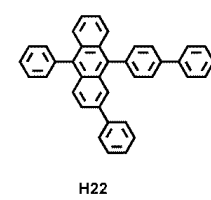
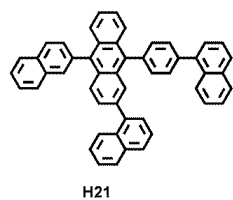
[0228] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 하기 화합물 H1 내지 H124 중 하나, ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene), 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:



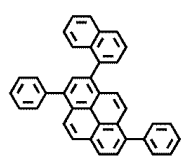
[0229]



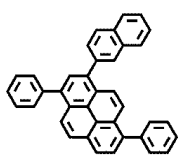
[0230]



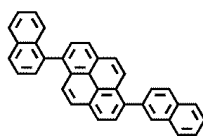
[0231]



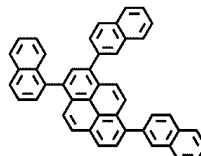
H29



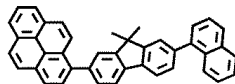
H30



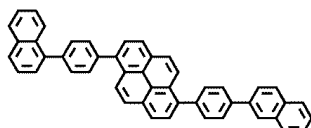
H31



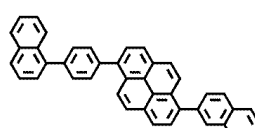
H32



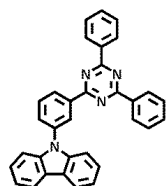
H33



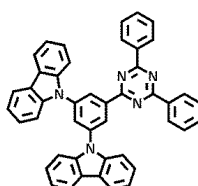
H34



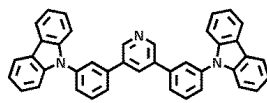
H35



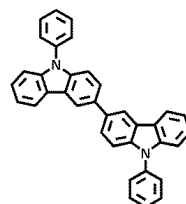
H36



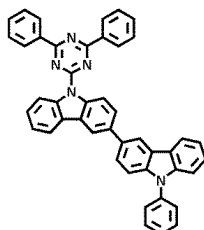
H37



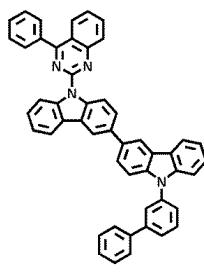
H38



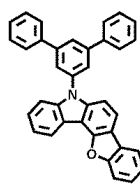
H39



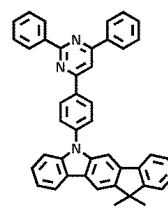
H40



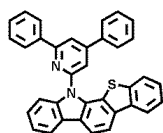
H41



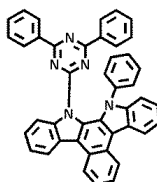
H42



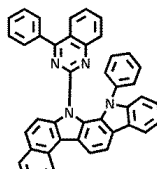
H43



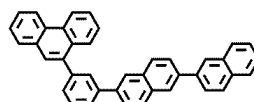
H44



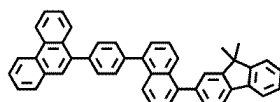
H45



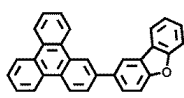
H46



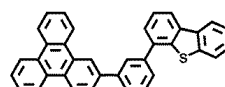
H47



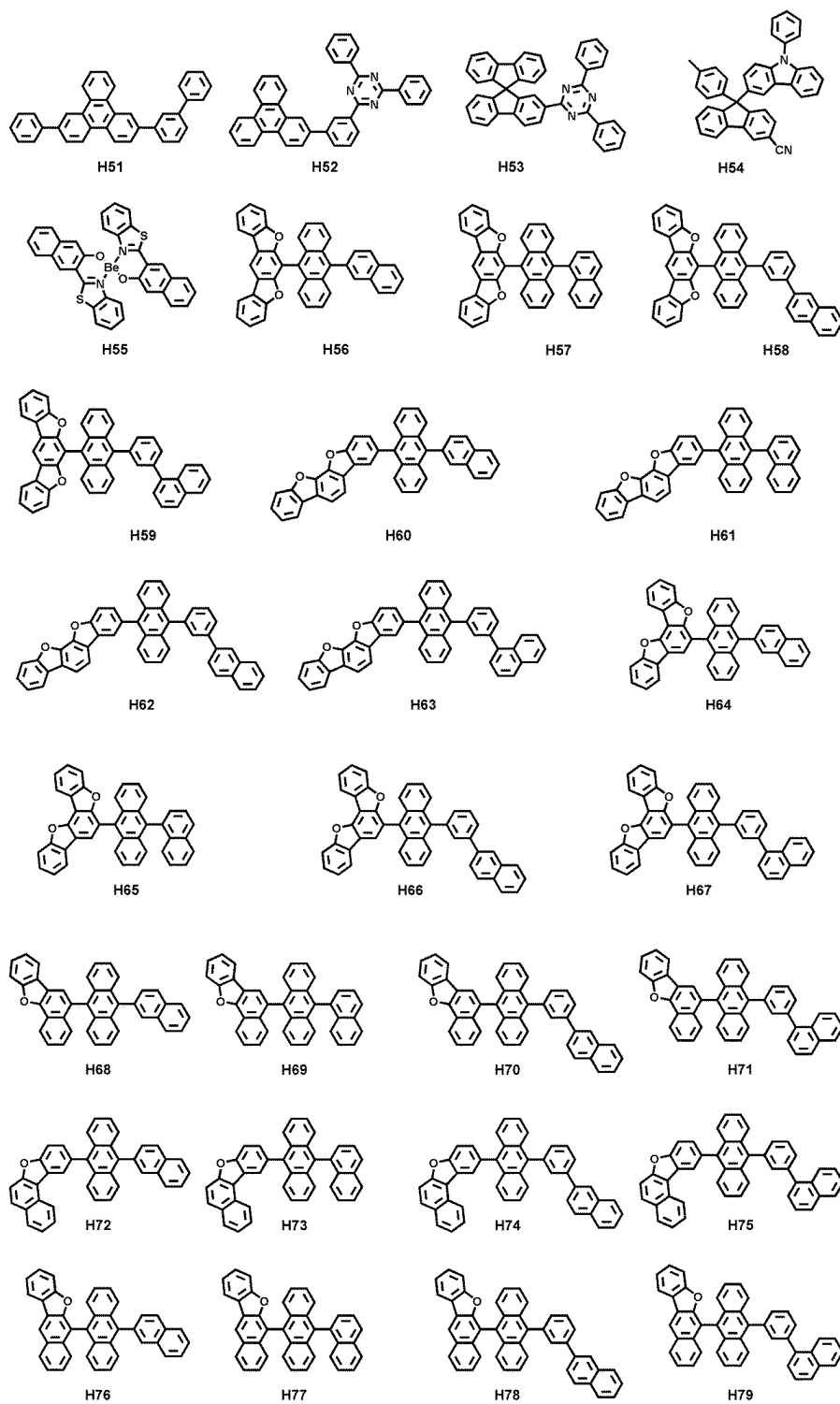
H48

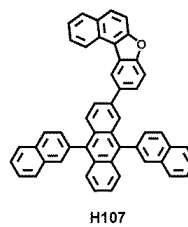
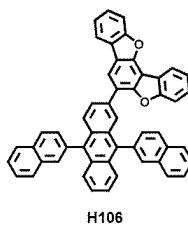
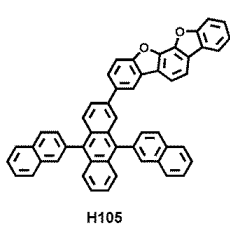
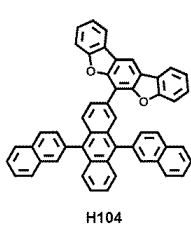
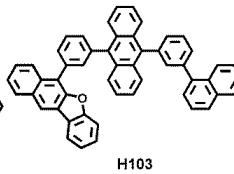
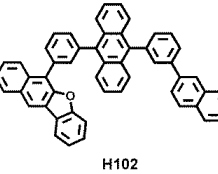
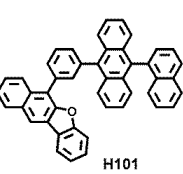
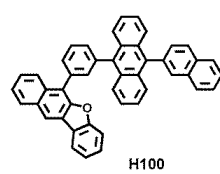
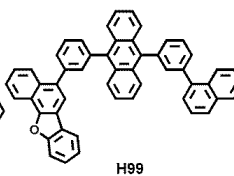
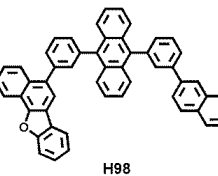
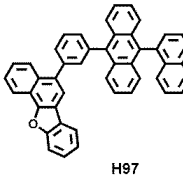
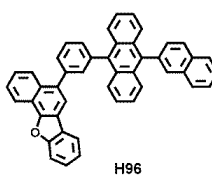
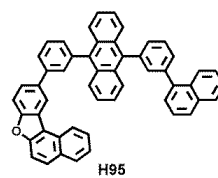
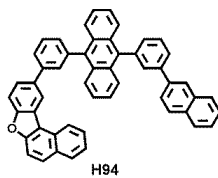
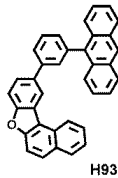
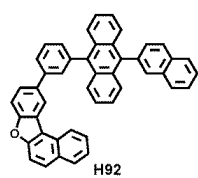
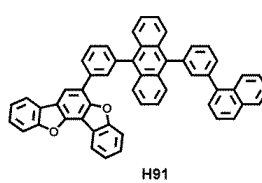
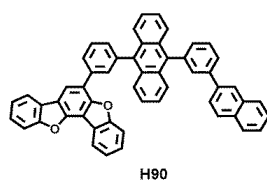
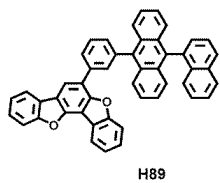
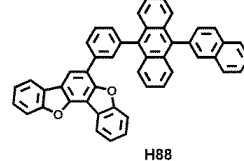
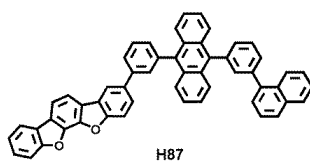
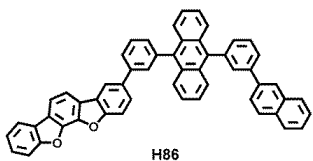
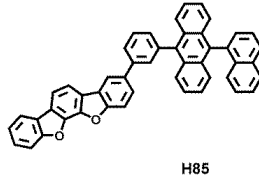
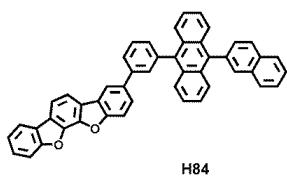
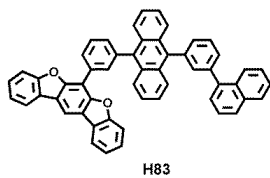
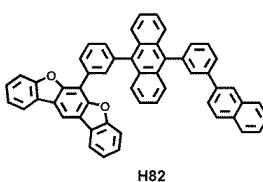
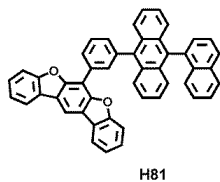
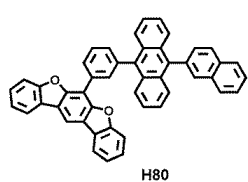


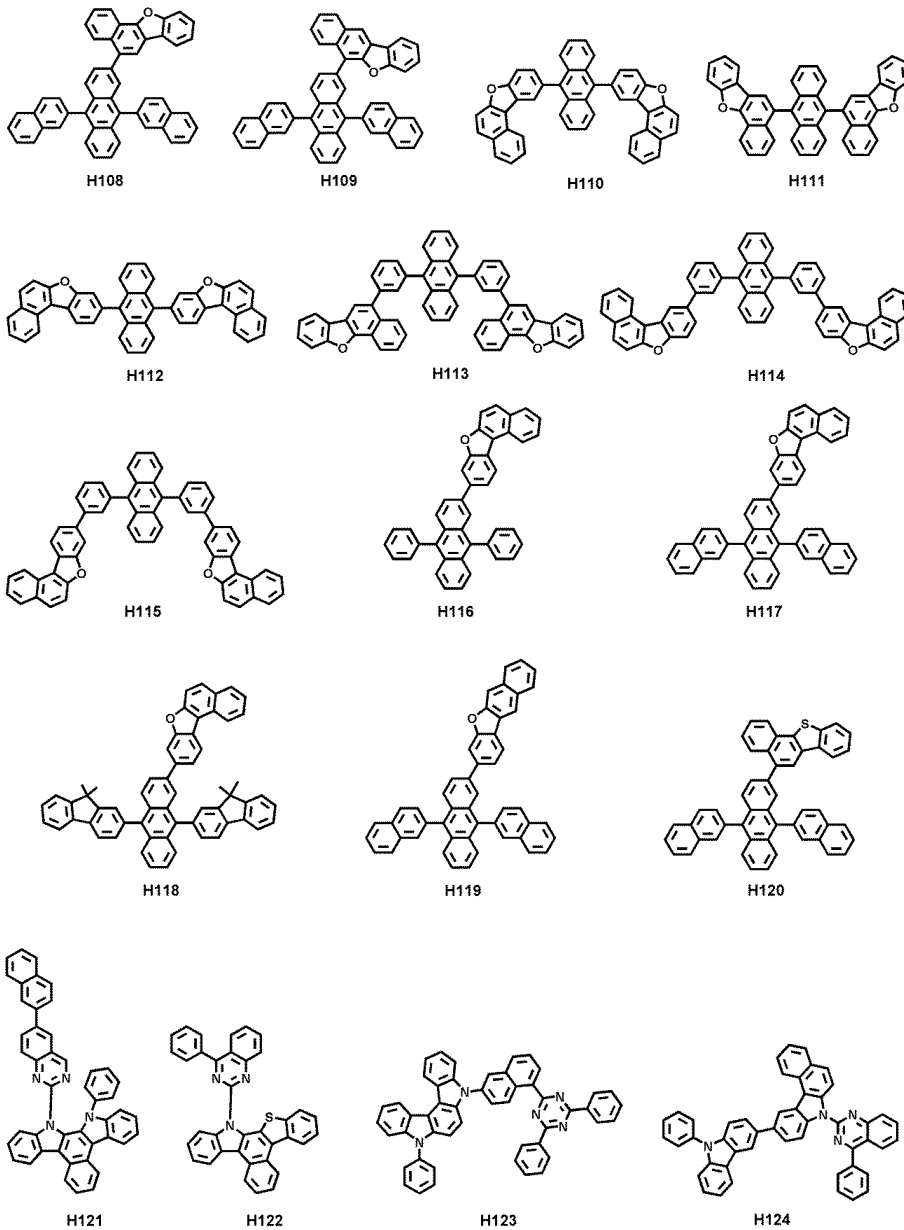
H49



H50







[인광 도펀트]

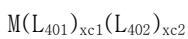
상기 인광 도펀트는 중심 금속으로서, 적어도 하나의 전이 금속을 포함할 수 있다.

상기 인광 도펀트는 1자리(monodenate) 리간드, 2자리 리간드, 3자리 리간드, 4자리 리간드, 5자리 리간드, 6자리 리간드, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

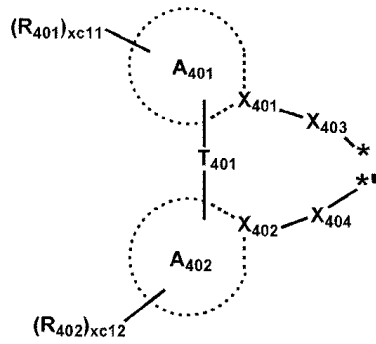
상기 인광 도펀트는, 전기적으로 중성(neutral)일 수 있다.

예를 들어, 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다:

<화학식 401>



[0250] <화학식 402>



[0251]

[0252] 상기 화학식 401 및 402 중,

[0253] M은 전이 금속(예를 들면, 이리듐(Ir), 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 금(Au), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 로듐(Rh), 레늄(Re) 또는 툴륨(Tm))이고,

[0254] L401은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드이고, xc1은 1, 2 또는 3이고, xc1이 2 이상일 경우 2 이상의 L401은 서로 동일하거나 상이하고,

[0255] L402는 유기 리간드이고, xc2는 0, 1, 2, 3, 또는 4이고, xc2가 2 이상일 경우 2 이상의 L402는 서로 동일하거나 상이하고,

[0256] X401 및 X402는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

[0257] 고리 A401 및 고리 A402는 서로 독립적으로, C3-C60카보시클릭 그룹 또는 C1-C60헤테로시클릭 그룹이고,

[0258] T401은 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(=O)-*, *-N(Q411)-*, *-C(Q411)(Q412)-*, *-C(Q411)=C(Q412)-*, *-C(Q411)=* 또는 *=C(Q411)=*이고,

[0259] X403 및 X404는 서로 독립적으로, 화학 결합(예를 들면, 공유 결합 또는 배위 결합), O, S, N(Q413), B(Q413), P(Q413), C(Q413)(Q414) 또는 Si(Q413)(Q414)이고,

[0260] 상기 Q411 내지 Q414에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 Q1에 대한 설명을 참조하고,

[0261] R401 및 R402는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 적어도 하나의 R10a로 치환 또는 비치환된 C1-C20알킬기, 적어도 하나의 R10a로 치환 또는 비치환된 C1-C20알콕시기, 적어도 하나의 R10a로 치환 또는 비치환된 C3-C60카보시클릭 그룹, 적어도 하나의 R10a로 치환 또는 비치환된 C1-C60헤테로시클릭 그룹, -Si(Q401)(Q402)(Q403), -N(Q401)(Q402), -B(Q401)(Q402), -C(=O)(Q401), -S(=O)2(Q401) 또는 -P(=O)(Q401)(Q402)이고,

[0262] 상기 Q401 내지 Q403에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 Q1에 대한 설명을 참조하고,

[0263] xc11 및 xc12는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중 하나이고,

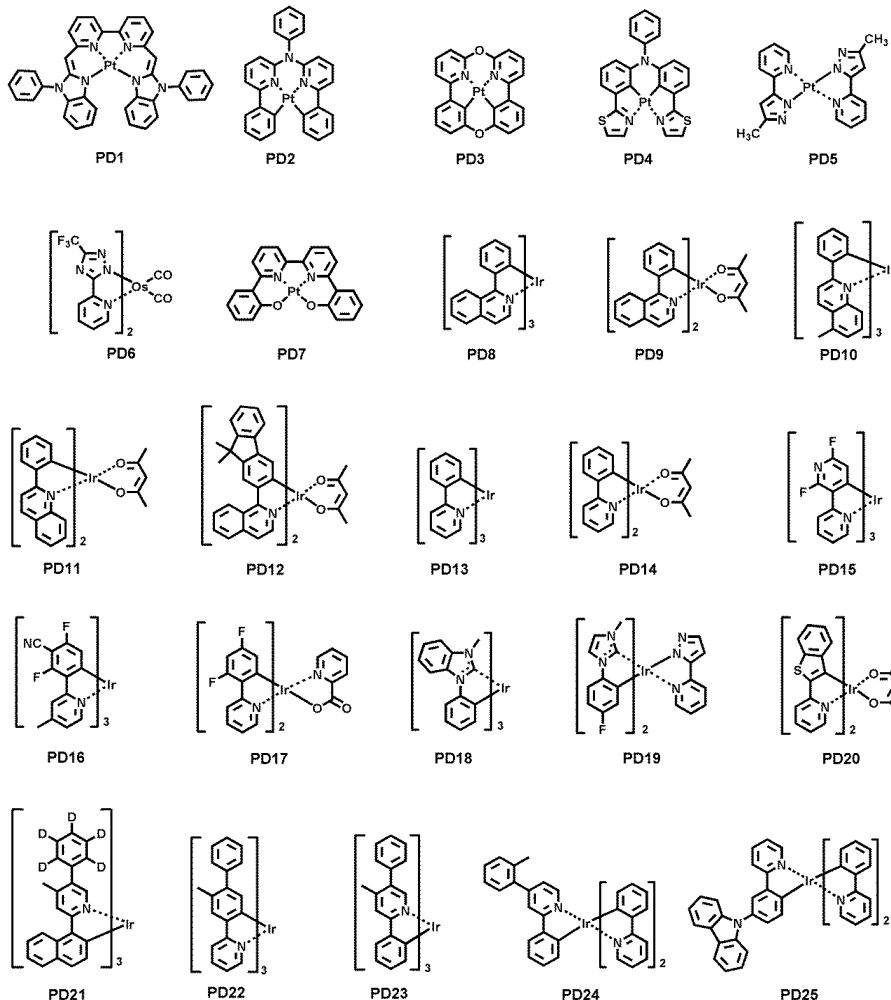
[0264] 상기 화학식 402 중 * 및 *'은 각각 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.

[0265] 예를 들어, 상기 화학식 402 중 i) X401은 질소이고, X402는 탄소이거나, 또는 ii) X401과 X402가 모두 질소일 수 있다.

[0266] 다른 예로서, 상기 화학식 402 중 xc1이 2 이상일 경우, 2 이상의 L401 중 2개의 고리 A401은 선택적으로 (optionally), 연결기인 T402를 통하여 서로 연결되거나, 2개의 고리 A402는 선택적으로, 연결기인 T403을 통하여 서로 연결될 수 있다 (하기 화합물 PD1 내지 PD4 및 PD7 참조). 상기 T402 및 T403에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 T401에 대한 설명을 참조한다.

[0267] 상기 화학식 401 중 L_{402} 는 임의의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기 L_{402} 는 할로젠 그룹, 디케톤 그룹 (예를 들면, 아세틸아세토네이트 그룹), 카르복실산 그룹 (예를 들면, 피콜리네이트 그룹), $-C(=O)$, 이소니트릴 그룹, $-CN$ 그룹, 포스포러스 그룹 (예를 들면, 포스핀(phosphine) 그룹, 포스파이트(phosphite) 그룹 등), 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0268] 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중 하나, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:

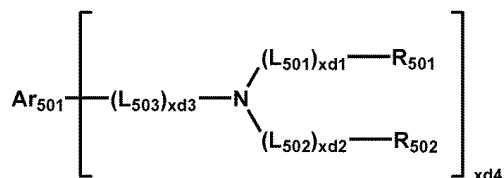


[0271] [형광 도펀트]

[0272] 상기 형광 도펀트는 아민 그룹-함유 화합물, 스티릴 그룹-함유 화합물, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0273] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화학식 501로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

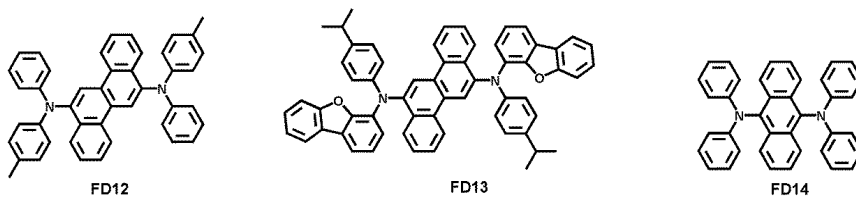
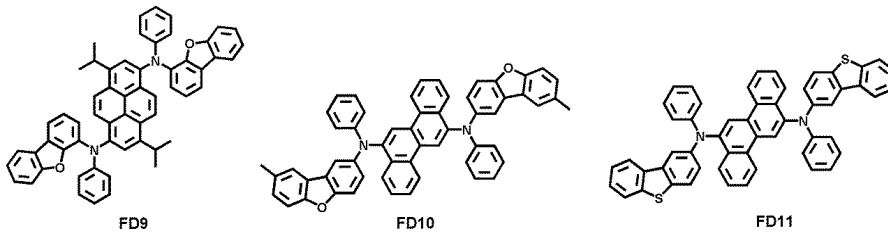
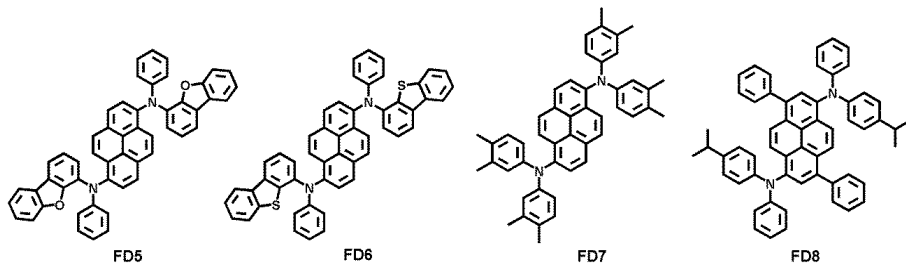
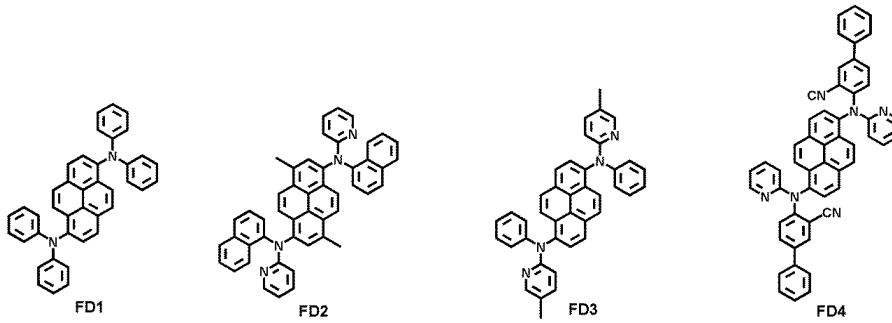
[0274] <화학식 501>



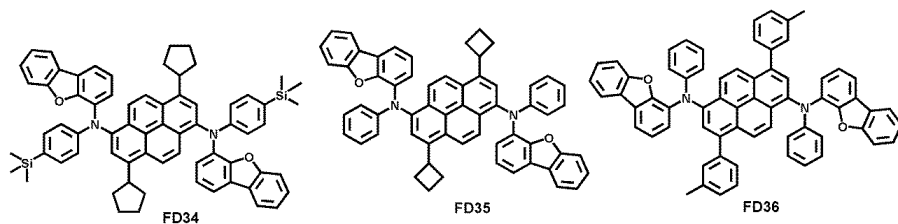
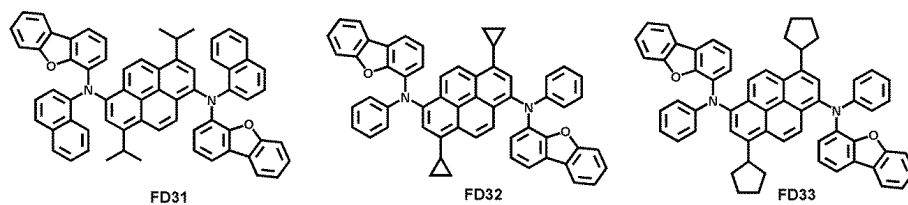
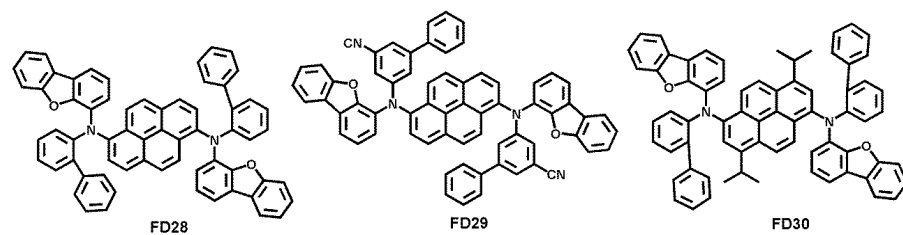
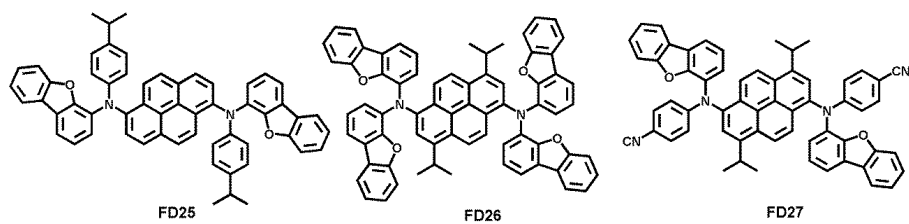
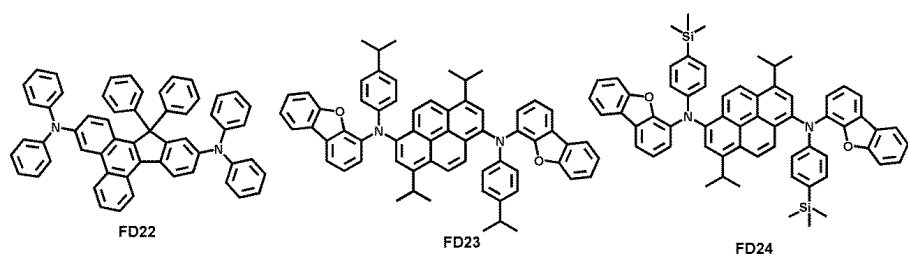
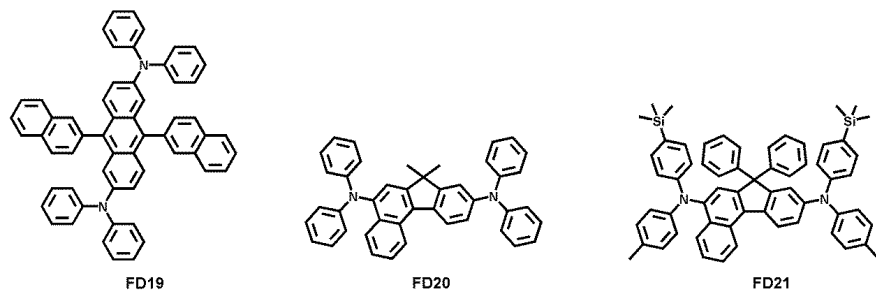
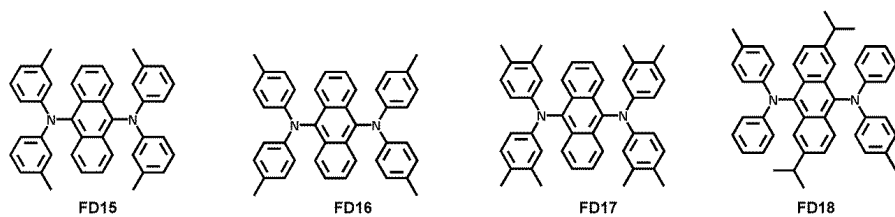
[0276] 상기 화학식 501 중,
[0277]

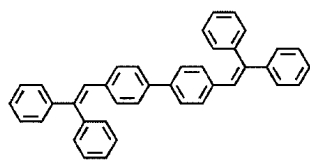
[0278] Ar_{501} , L_{501} 내지 L_{503} , R_{501} 및 R_{502} 은 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

- [0279] xd1 내지 xd3는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 또는 3이고,
- [0280] xd4는 1, 2, 3, 4, 5, 또는 6일 수 있다.
- [0281] 예를 들어, 상기 화학식 501 중 Ar₅₀₁은 3개 이상의 모노시클릭 그룹이 서로 축합된 축합환 그룹(예를 들면, 안트라센 그룹, 크라이센 그룹, 파이렌 그룹 등)을 포함할 수 있다.
- [0282] 다른 예로서, 상기 화학식 501 중 xd4는 2일 수 있다.
- [0283] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD36 중 하나, DPVBi, DPAVBi, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:

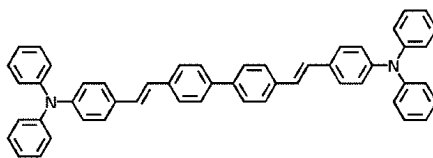


[0285]





DPVBi



DPAVBi

[0290]

[0291]

[지연 형광 물질]

[0292]

상기 발광층은 지연 형광 물질을 포함할 수 있다.

[0293]

본 명세서 중 지연 형광 물질은 상술한 바와 같은 헤테로고리 화합물 또는 지연 형광 방출 메커니즘에 의하여 지연 형광을 방출할 수 있는 임의의 화합물 중에서 선택될 수 있다.

[0294]

상기 발광층에 포함된 지연 형광 물질은, 상기 발광층에 포함된 다른 물질의 종류에 따라, 호스트 또는 도펀트의 역할을 할 수 있다.

[0295]

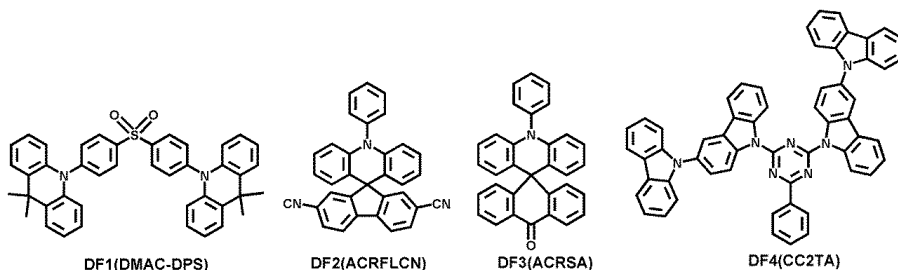
일 구현예에 따르면, 상기 지연 형광 물질의 삼중항 에너지 레벨(eV)과 상기 지연 형광 물질의 일중항 에너지 레벨(eV) 간의 차이는 0eV 이상 및 0.5eV 이하일 수 있다. 상기 지연 형광 물질의 삼중항 에너지 레벨(eV)과 상기 지연 형광 물질의 일중항 에너지 레벨(eV) 간의 차이가 상술한 바와 같은 범위를 만족함으로써, 상기 지연 형광 물질 중 삼중항 상태에서 일중항 상태로의 역에너지 이동(up-conversion)이 효과적으로 이루어져, 상기 발광 소자(10)의 발광 효율 등이 향상될 수 있다.

[0296]

예를 들어, 상기 지연 형광 물질은, i) 적어도 하나의 전자 도너(예를 들면, 카바졸 그룹과 같은 π 전자-과잉 C_3-C_{60} 시클릭 그룹(π electron-rich C_3-C_{60} cyclic group) 등) 및 적어도 하나의 전자 역셉터(예를 들면, 설포사이드 그룹, 시아노 그룹, π 전자-결핍성 함질소 C_1-C_{60} 시클릭 그룹(π electron-deficient nitrogen-containing C_1-C_{60} cyclic group) 등)를 포함한 물질, ii) 붕소(B)를 공유하면서 축합된 2 이상의 시클릭 그룹을 포함한 C_8-C_{60} 폴리시클릭 그룹을 포함한 물질 등을 포함할 수 있다.

[0297]

상기 지연 형광 물질의 예는, 하기 화합물 DF1 내지 DF9 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:

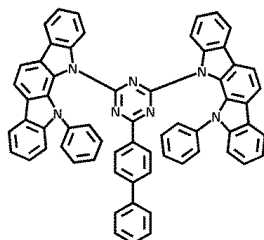


DF1(DMAC-DPS)

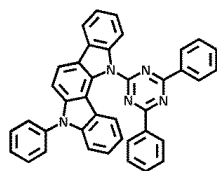
DF2(ACRFLCN)

DF3(ACRSA)

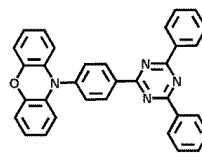
DF4(CC2TA)



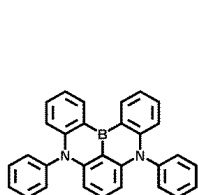
DF5(PIC-TRZ)



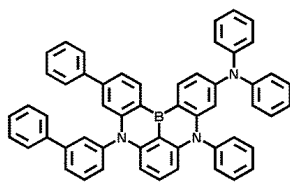
DF6(PIC-TRZ2)



DF7(PXZ-TRZ)



DF8(DABNA-1)



DF9(DABNA-2)

[0299]

- [0300] [양자점]
- [0301] 상기 발광층은 양자점을 포함할 수 있다.
- [0302] 본 명세서 중, 양자점은 반도체 화합물의 결정을 의미하며, 결정의 크기에 따라 다양한 발광 파장의 광을 방출할 수 있는 임의의 물질을 포함할 수 있다.
- [0303] 상기 양자점의 직경은, 예를 들어 약 1 nm 내지 10 nm일 수 있다.
- [0304] 상기 양자점은 습식 화학 공정, 유기 금속 화학 증착 공정, 분자선 에피택시 공정 또는 이와 유사한 공정 등에 의해 합성될 수 있다.
- [0305] 상기 습식 화학 공정은 유기 용매와 전구체 물질을 혼합한 후 양자점 입자 결정을 성장시키는 방법이다. 상기 결정이 성장할 때, 유기 용매가 자연스럽게 양자점 결정 표면에 배워진 분산제 역할을 하고, 상기 결정의 성장을 조절하기 때문에, 유기 금속 화학 증착(MOCVD, Metal Organic Chemical Vapor Deposition)이나 분자선 에피택시(MBE, Molecular Beam Epitaxy) 등의 기상 증착법보다 더 용이하고, 저비용의 공정을 통해, 양자점 입자의 성장을 제어할 수 있다.
- [0306] 상기 양자점은, II-VI족 반도체 화합물; III-V족 반도체 화합물; III-VI족 반도체 화합물; I-III-VI족 반도체 화합물; IV-VI족 반도체 화합물; IV족 원소 또는 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다.
- [0307] 상기 III-VI족 반도체 화합물의 예는 In_2S_3 와 같은 이원소 화합물; AgInS , AgInS_2 , CuInS , CuInS_2 등과 같은 삼원소 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다.
- [0308] 상기 II-VI족 반도체 화합물의 예는 CdS , CdSe , CdTe , ZnS , ZnSe , ZnTe , ZnO , HgS , HgSe , HgTe , MgSe , MgS 등과 같은 이원소 화합물; CdSeS , CdSeTe , CdSTe , ZnSeS , ZnSeTe , ZnSTe , HgSeS , HgSeTe , HgSTe , CdZnS , CdZnSe , CdZnTe , CdHgS , CdHgSe , CdHgTe , HgZnS , HgZnSe , HgZnTe , MgZnSe , MgZnS 등과 같은 삼원소 화합물; CdZnSeS , CdZnSeTe , CdZnSTe , CdHgSeS , CdHgSeTe , CdHgSTe , HgZnSeS , HgZnSeTe , HgZnSTe 등과 같은 사원소 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다.
- [0309] 상기 III-V족 반도체 화합물의 예는 GaN , GaP , GaAs , GaSb , AlN , AlP , AlAs , AlSb , InN , InP , InAs , InSb 등과 같은 이원소 화합물; GaNP , GaNAS , GaNSb , GaPAs , GaPSb , AlNP , AlNAS , AlNSb , AlPAs , AlPSb , InGaP , InNP , InAlP , InNAS , InNSb , InPAs , InPSb , GaAlNP 등과 같은 삼원소 화합물; GaAlNAS , GaAlNSb , GaAlPAs , GaAlPSb , GaInNP , GaInNAS , GaInNSb , GaInPAs , GaInPSb , InAlNP , InAlNAS , InAlNSb , InAlPAs , InAlPSb 등과 같은 사원소 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다. 한편, 상기 III-V족 반도체 화합물은 II족 원소를 더 포함할 수 있다. II족 원소를 더 포함한 III-V족 반도체 화합물의 예는, InZnP , InGaZnP , InAlZnP 등을 포함할 수 있다.
- [0310] 상기 III-VI족 반도체 화합물의 예는, GaS , GaSe , Ga_2Se_3 , GaTe , InS , InSe , In_2Se_3 , InTe 등과 같은 이원소 화합물; InGaS_3 , InGaSe_3 등과 같은 삼원소 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다.
- [0311] 상기 I-III-VI족 반도체 화합물의 예는, AgInS , AgInS_2 , CuInS , CuInS_2 , CuGaO_2 , AgGaO_2 , AgAlO_2 등과 같은 삼원소 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다.
- [0312] 상기 IV-VI족 반도체 화합물의 예는 SnS , SnSe , SnTe , PbS , PbSe , PbTe 등과 같은 이원소 화합물; SnSeS , SnSeTe , SnSTe , PbSeS , PbSeTe , PbSTe , SnPbS , SnPbSe , SnPbTe 등과 같은 삼원소 화합물; SnPbSSe , SnPbSeTe , SnPbSTe 등과 같은 사원소 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다.
- [0313] 상기 IV족 원소 또는 화합물은 Si , Ge 등과 같은 단일원소 화합물; SiC , SiGe 등과 같은 이원소 화합물; 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0314] 상기 이원소 화합물, 삼원소 화합물 및 사원소 화합물과 같은 다원소 화합물에 포함된 각각의 원소는 균일한 농도 또는 불균일한 농도로 입자 내에 존재할 수 있다.
- [0315] 한편, 상기 양자점은 해당 양자점에 포함된 각각의 원소의 농도가 균일한 단일 구조 또는 코어-셸의 이중 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 코어에 포함된 물질과 상기 셸에 포함된 물질은 서로 상이할 수 있다.
- [0316] 상기 양자점의 셸은 상기 코어의 화학적 변성을 방지하여 반도체 특성을 유지하기 위한 보호층 역할 및/또는 양자점에 전기 영동 특성을 부여하기 위한 차징층(charging layer)의 역할을 수행할 수 있다. 상기 셸은 단층 또

는 다중층일 수 있다. 코어와 셸의 계면은 셸에 존재하는 원소의 농도가 중심으로 갈수록 낮아지는 농도 구배 (gradient)를 가질 수 있다.

- [0317] 상기 양자점의 셸의 예로는 금속, 준금속 또는 비금속의 산화물, 반도체 화합물 또는 이들의 조합 등을 들 수 있다. 상기 금속, 준금속 또는 비금속의 산화물의 예는 SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2 , ZnO , MnO , Mn_2O_3 , Mn_3O_4 , CuO , FeO , Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , CoO , Co_3O_4 , NiO 등과 같은 이원소 화합물; MgAl_2O_4 , CoFe_2O_4 , NiFe_2O_4 , CoMn_2O_4 등과 같은 삼원소 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다. 상기 반도체 화합물의 예는, 본 명세서에 기재된 바와 같은, II-VI족 반도체 화합물; III-V족 반도체 화합물; III-VI족 반도체 화합물; I-III-VI족 반도체 화합물; IV-VI족 반도체 화합물; 또는 이의 임의의 조합;을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 반도체 화합물은 CdS , CdSe , CdTe , ZnS , ZnSe , ZnTe , ZnSeS , ZnTeS , GaAs , GaP , GaSb , HgS , HgSe , HgTe , InAs , InP , InGaP , InSb , AlAs , AlP , AlSb , 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0318] 양자점은 약 45nm 이하, 구체적으로 약 40nm 이하, 더욱 구체적으로 약 30nm 이하의 발광 파장 스펙트럼의 반치 폭(full width of half maximum, FWHM)을 가질 수 있으며, 이 범위에서 색순도나 색재현성을 향상시킬 수 있다. 또한 이러한 양자점을 통해 발광되는 광은 전 방향으로 방출되는바, 광 시야각이 향상될 수 있다.
- [0319] 또한, 양자점의 형태는 구체적으로 구형, 피라미드형, 다중 가지형(multi-arm), 또는 입방체(cubic)의 나노 입자, 나노 튜브, 나노와이어, 나노 섬유, 나노 판상 입자 등의 형태일 수 있다.
- [0320] 상기 양자점의 크기를 조절함으로써, 에너지 밴드 갭의 조절이 가능하므로, 양자점 발광층에서 다양한 파장대의 빛을 얻을 수 있다. 따라서 서로 다른 크기의 양자점을 사용함으로써, 여러 파장의 빛을 방출하는 발광 소자를 구현할 수 있다. 구체적으로, 상기 양자점의 크기는 적색, 녹색 및/또는 청색광이 방출되도록 선택될 수 있다. 또한, 상기 양자점의 크기는 다양한 색의 빛이 결합되어, 백색광을 방출하도록 구성될 수 있다.
- [0321] [중간층(130) 중 전자 수송 영역]
- [0322] 상기 전자 수송 영역은 i) 단일 물질로 이루어진(consist of) 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조, ii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 복수의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0323] 상기 전자 수송 영역은, 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층, 전자 수송층, 전자 주입층, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0324] 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 있다.
- [0325] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은, 적어도 하나의 π 전자-결핍성 함질소 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 시클릭 그룹(π electron-deficient nitrogen-containing $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ cyclic group)을 포함한 금속-비함유 (metal-free) 화합물을 포함할 수 있다.
- [0326] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 상술한 바와 같은 헤테로고리 화합물, 하기 화학식 601로 표시된 화합물 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0327] <화학식 601>
- [0328] $[\text{Ar}_{601}]_{\text{xe}11}-[(\text{L}_{601})_{\text{xe}1}-\text{R}_{601}]_{\text{xe}21}$
- [0329] 상기 화학식 601 중,
- [0330] Ar_{601} , 및 L_{601} 은 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0331] $\text{xe}11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0332] $\text{xe}1$ 은 0, 1, 2, 3, 4, 또는 5이고,
- [0333] R_{601} 은, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 카보시클릭 그룹, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환

된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, -Si(Q₆₀₁)(Q₆₀₂)(Q₆₀₃), -C(=O)(Q₆₀₁), -S(=O)₂(Q₆₀₁), 또는 -P(=O)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂)이고,

[0334] 상기 Q₆₀₁ 내지 Q₆₀₃에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 Q₁에 대한 설명을 참조하고,

[0335] xe21는 1, 2, 3, 4, 또는 5이고,

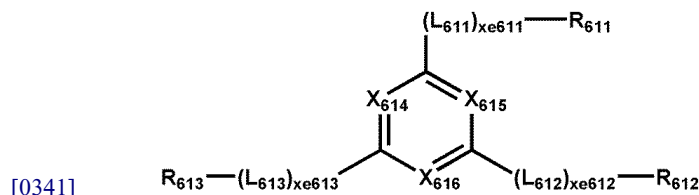
[0336] 상기 Ar₆₀₁, L₆₀₁ 및 R₆₀₁ 중 적어도 하나는 서로 독립적으로, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 π 전자-결핍성 합질소 C₁-C₆₀ 시클릭 그룹일 수 있다.

[0337] 예를 들어, 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0338] 다른 예로서, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 치환 또는 비치환된 안트라센 그룹일 수 있다.

[0339] 또 다른 예로서, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601-1로 표시된 화합물을 포함할 수 있다:

[0340] <화학식 601-1>



[0342] 상기 화학식 601-1 중,

[0343] 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,

[0344] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃에 대한 설명은 각각 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

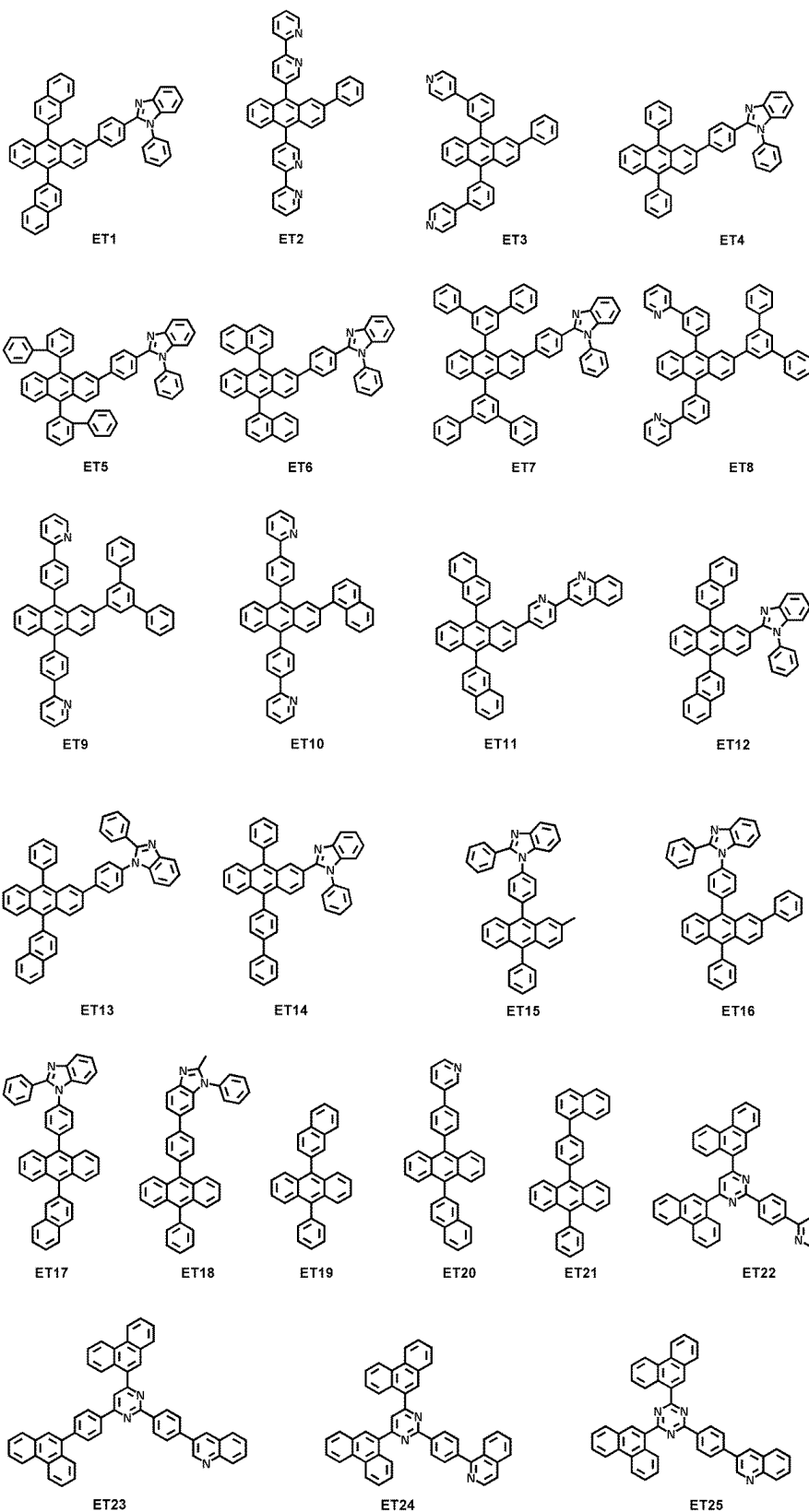
[0345] xe611 내지 xe613에 대한 설명은 각각 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

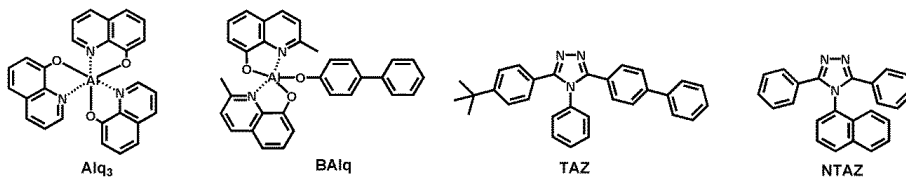
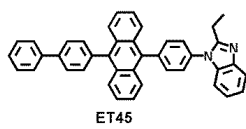
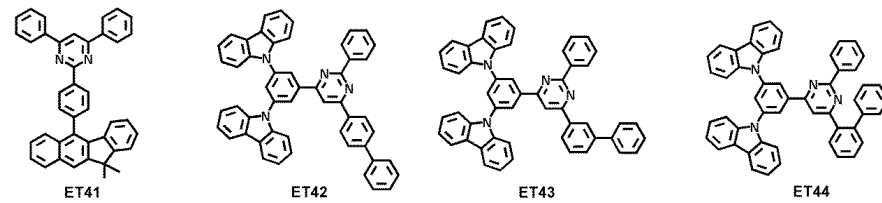
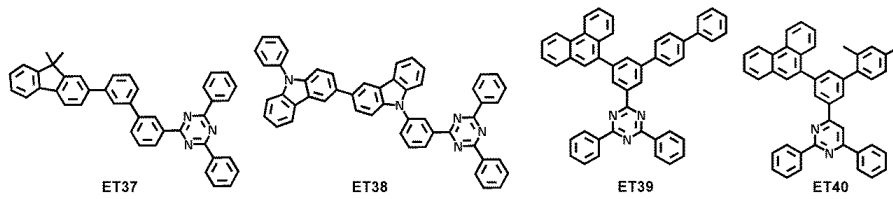
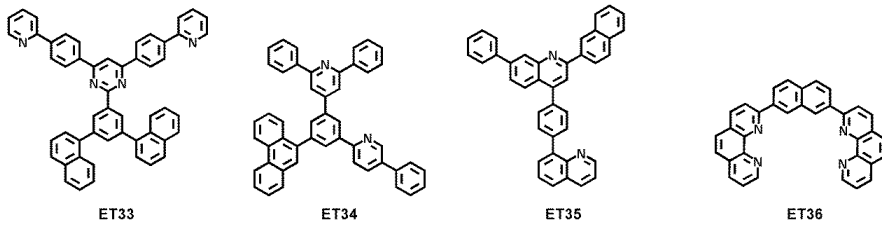
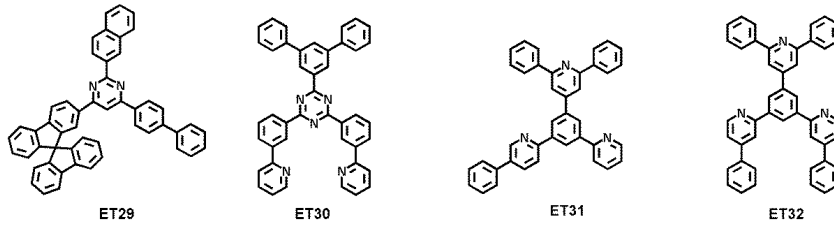
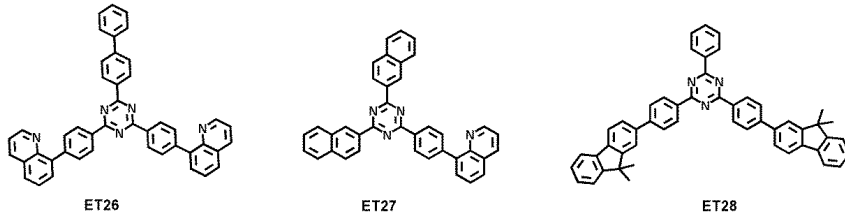
[0346] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃에 대한 설명은 각각 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0347] R₆₁₄ 내지 R₆₁₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

[0348] 예를 들어, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0349] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET45 중 하나, BCP(2,9-??Dimethyl-??4,7-??diphenyl-??1,10-??phenanthroline), Bphen(4,7-??Diphenyl-??1,10-??phenanthroline), Alq₃, BALq, TAZ, NTAZ, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다:



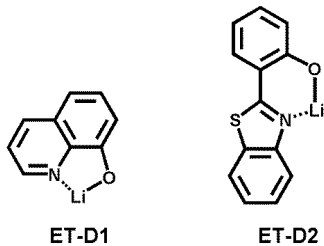


상기 전자 수송 영역의 두께는 약 160Å 내지 약 5000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 4000Å일 수 있다. 상기 전자 수송 영역이 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층, 전자 수송층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 경우, 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å이고, 상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층, 전자 수송층 및/또는 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0358] 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.

[0359] 상기 금속-함유 물질은 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체의 금속 이온은, Li 이온, Na 이온, K 이온, Rb 이온 또는 Cs 이온일 수 있고, 상기 알칼리 토금속 착체의 금속 이온은 Be 이온, Mg 이온, Ca 이온, Sr 이온 또는 Ba 이온일 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시페닐옥사디아졸, 히드록시페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린, 시클로펜타다이엔, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0360] 예를 들어, 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다:



[0361]

[0362] 상기 전자 수송 영역은, 제2전극(150)으로부터의 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층은 상기 제2전극(150)과 직접(directly) 접촉할 수 있다.

[0363] 상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진(consist of) 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조, ii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 단일층으로 이루어진(consist of) 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 상이한 물질을 포함한 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0364] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속-함유 화합물, 알칼리 토금속-함유 화합물, 희토류 금속-함유 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0365] 상기 알칼리 금속은, Li, Na, K, Rb, Cs, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, Ba, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb, Gd, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0366] 상기 알칼리 금속-함유 화합물, 알칼리 토금속-함유 화합물 및 상기 희토류 금속-함유 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속 각각의, 산화물, 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등), 텔루라이드, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0367] 상기 알칼리 금속-함유 화합물은, Li_2O , Cs_2O , K_2O 등과 같은 알칼리 금속 산화물, LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 알칼리 토금속-함유 화합물은, BaO , SrO , CaO , $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ (x 는 $0 < x < 1$ 를 만족하는 실수임), $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ (x 는 $0 < x < 1$ 를 만족하는 실수임) 등과 같은 알칼리 토금속 화합물을 포함할 수 있다. 상기 희토류 금속-함유 화합물은, YbF_3 , ScF_3 , Sc_2O_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , TbF_3 , YbI_3 , ScI_3 , TbI_3 , 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 또는, 상기 희토류 금속-함유 화합물은, 란타나이드 금속 텔루라이드를 포함할 수 있다. 상기 란타나이드 금속 텔루라이드의 예는, LaTe , CeTe , PrTe , NdTe , PmTe , SmTe , EuTe , GdTe , TbTe , DyTe , HoTe , ErTe , TmTe , YbTe , LuTe , La_2Te_3 , Ce_2Te_3 , Pr_2Te_3 , Nd_2Te_3 , Pm_2Te_3 , Sm_2Te_3 , Eu_2Te_3 , Gd_2Te_3 , Tb_2Te_3 , Dy_2Te_3 , Ho_2Te_3 , Er_2Te_3 , Tm_2Te_3 , Yb_2Te_3 , Lu_2Te_3 등을 포함할 수 있다.

[0368] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, i) 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온 중 하나 및 ii) 상기 금속 이온과 결합한 리간드로서, 예를 들면, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히

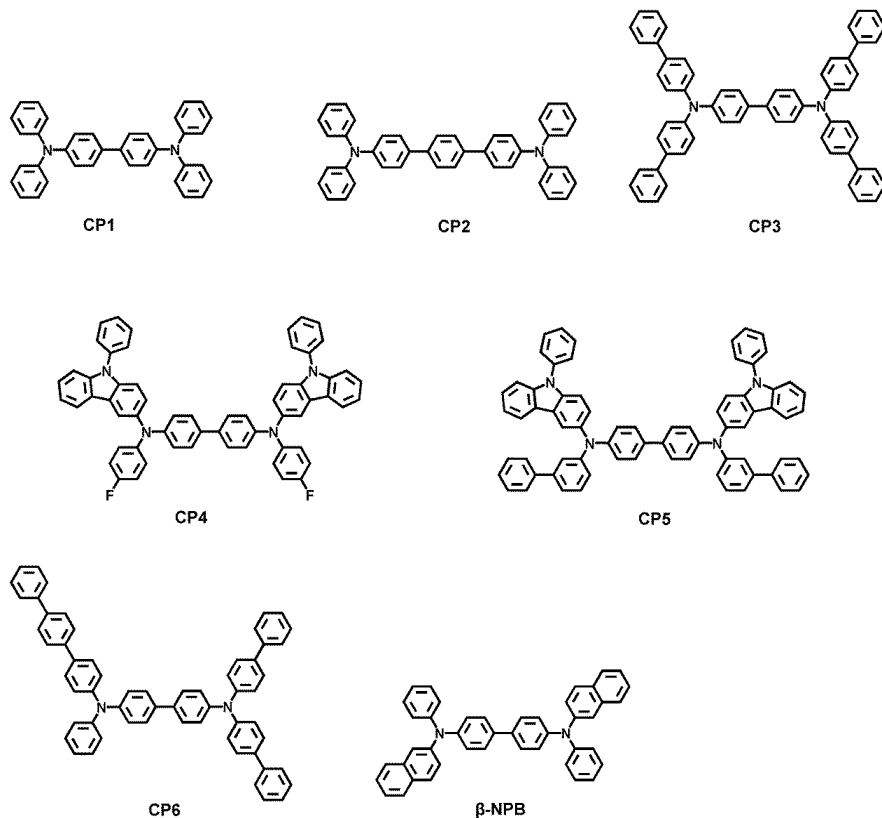
드록시페닐티아졸, 히드록시페닐옥사디아졸, 히드록시페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린, 시클로펜타다이엔, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

- [0369] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속-함유 화합물, 알칼리 토금속-함유 화합물, 희토류 금속-함유 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이의 임의의 조합만으로 이루어져 있거나, 유기물(예를 들면, 상기 화학식 601로 표시된 화합물)을 더 포함할 수 있다.
- [0370] 일 구현예에 따르면, 상기 전자 주입층은 i) 알칼리 금속-함유 화합물(예를 들면, 알칼리 금속 할로겐화물)로 이루어지거나(consist of), ii) a) 알칼리 금속-함유 화합물(예를 들면, 알칼리 금속 할로겐화물); 및 b) 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 또는 이의 임의의 조합;으로 이루어질 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 주입층은, KI:Yb 공증착층, RbI:Yb 공증착층 등일 수 있다.
- [0371] 상기 전자 주입층이 유기물을 더 포함할 경우, 상기 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속-함유 화합물, 알칼리 토금속-함유 화합물, 희토류 금속-함유 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이의 임의의 조합은 상기 유기물을 포함한 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.
- [0372] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 상술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0373] [제2전극(150)]
- [0374] 상술한 바와 같은 중간층(130) 상부에는 제2전극(150)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(150)은 전자 주입 전극인 캐소드(cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(150)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물, 또는 이의 임의의 조합을 사용할 수 있다.
- [0375] 상기 제2전극(150)은, 리튬(Li), 은(Ag), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), 이터븀(Yb), 은-이터븀(Ag-Yb), ITO, IZO, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 제2전극(150)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다.
- [0376] 상기 제2전극(150)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0377] [캐핑층]
- [0378] 제1전극(110)의 외측에는 제1캐핑층이 배치되거나, 및/또는 제2전극(150)의 외측에는 제2캐핑층이 배치될 수 있다. 구체적으로, 상기 발광 소자(10)는 제1캐핑층, 제1전극(110), 중간층(130) 및 제2전극(150)이 차례로 적층된 구조, 제1전극(110), 중간층(130), 제2전극(150) 및 제2캐핑층이 차례로 적층된 구조 또는 제1캐핑층, 제1전극(110), 중간층(130), 제2전극(150) 및 제2캐핑층이 차례로 적층된 구조를 가질 수 있다.
- [0379] 발광 소자(10)의 중간층(130) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제1전극(110) 및 제1캐핑층을 지나 외부로 추출될 수 있고, 발광 소자(10)의 중간층(130) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제2전극(150) 및 제2캐핑층을 지나 외부로 추출될 수 있다.
- [0380] 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다. 이로써, 상기 발광 소자(10)의 광추출 효율이 증가되어, 상기 발광 소자(10)의 발광 효율이 향상될 수 있다.
- [0381] 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 각각은, 1.6 이상의 굴절율(at 589nm)을 갖는 물질을 포함할 수 있다.
- [0382] 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층은 서로 독립적으로, 유기물을 포함한 유기 캐핑층, 무기물을 포함한 무기 캐핑층, 또는 유기물 및 무기물을 포함한 유-무기 복합 캐핑층일 수 있다.
- [0383] 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물, 아민 그룹-함유 화합물, 포르핀 유도체 (porphine derivatives), 프탈로시아닌 유도체 (phthalocyanine derivatives), 나프탈로시아닌 유도체 (naphthalocyanine derivatives), 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다. 상기 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물 및 아민 그룹-함유 화합물은, 선택적으로, O, N, S, Se, Si, F, Cl, Br, I, 또는 이의 임의의 조합을 포함한 치환기로 치환될

수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민 그룹-함유 화합물을 포함할 수 있다.

[0384] 예를 들어, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화학식 201로 표시된 화합물, 상기 화학식 202로 표시된 화합물, 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0385] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화합물 HT28 내지 HT33 중 하나, 상기 화합물 CP1 내지 CP6 중 하나, β -NPB 또는 이의 임의의 화합물을 포함할 수 있다:



[0387]

[0388] [전자 장치]

[0389] 상기 발광 소자는 각종 전자 장치에 포함될 수 있다. 예를 들어, 상기 발광 소자를 포함한 전자 장치는, 발광 장치, 인증 장치 등일 수 있다.

[0390] 상기 전자 장치(예를 들면, 발광 장치)는, 상기 발광 소자 외에, i) 컬러 필터, ii) 색변환층, 또는 iii) 컬러 필터 및 색변환층을 더 포함할 수 있다. 상기 컬러 필터 및/또는 색변환층은 발광 소자로부터 방출되는 광의 적어도 하나의 진행 방향 상에 배치될 수 있다. 예를 들어, 상기 발광 소자로부터 방출되는 광은 청색광 또는 백색광일 수 있다. 상기 발광 소자에 대한 설명은 상술한 바를 참조한다. 일 구현예에 따르면, 상기 색변환층은 양자점을 포함할 수 있다. 상기 양자점은 예를 들어, 본 명세서에 기재된 바와 같은 양자점일 수 있다.

[0391] 상기 전자 장치는 제1기판을 포함할 수 있다. 상기 제1기판은 복수의 부화소 영역을 포함하고, 상기 컬러 필터는 상기 복수의 부화소 영역 각각에 대응하는 복수의 컬러 필터 영역을 포함하고, 상기 색변환층은 상기 복수의 부화소 영역 각각에 대응하는 복수의 색변환 영역을 포함할 수 있다.

[0392] 상기 복수의 부화소 영역 사이에 화소 정의막이 배치되어 각각의 부화소 영역이 정의된다.

[0393] 상기 컬러 필터는 복수의 컬러 필터 영역 및 복수의 컬러 필터 영역 사이에 배치된 차광 패턴을 더 포함할 수 있고, 상기 색변환층은 복수의 색변환 영역 및 복수의 색변환 영역 사이에 배치된 차광 패턴을 더 포함할 수 있다.

[0394] 상기 복수의 컬러 필터 영역(또는, 복수의 색변환 영역)은, 제1색광을 방출하는 제1영역; 제2색광을 방출하는 제2영역; 및/또는 제3색광을 방출하는 제3영역을 포함하고, 상기 제1색광, 상기 제2색광 및/또는 상기 제3색광은 서로 상이한 최대 발광 파장을 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1색광은 적색광이고, 상기 제2색광은 녹색광이고, 상기 제3색광은 청색광일 수 있다. 예를 들어, 상기 복수의 컬러 필터 영역(또는, 복수의 색변환

영역)은 양자점을 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 제1영역은 적색 양자점을 포함하고, 상기 제2영역은 녹색 양자점을 포함하고, 상기 제3영역은 양자점을 포함하지 않을 수 있다. 양자점에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다. 상기 제1영역, 상기 제2영역 및/또는 상기 제3영역은 각각 산란체를 더 포함할 수 있다.

[0395] 예를 들어, 상기 발광 소자는 제1광을 방출하고, 상기 제1영역은 상기 제1광을 흡수하여, 제1-1색광을 방출하고, 상기 제2영역은 상기 제1광을 흡수하여, 제2-1색광을 방출하고, 상기 제3영역은 상기 제1광을 흡수하여, 제3-1색광을 방출할 수 있다. 이 때, 상기 제1-1색광, 상기 제2-1색광 및 상기 제3-1색광은 서로 상이한 최대 발광 파장을 가질 수 있다. 구체적으로, 상기 제1광은 청색광일 수 있고, 상기 제1-1색광은 적색광일 수 있고, 상기 제2-1색광은 녹색광일 수 있고, 상기 제3-1색광은 청색광일 수 있다.

[0396] 상기 전자 장치는, 상술한 바와 같은 발광 소자 외에 박막 트랜지스터를 더 포함할 수 있다. 상기 박막 트랜지스터는 소스 전극, 드레인 전극 및 활성층을 포함할 수 있고, 상기 소스 전극 및 드레인 전극 중 어느 하나와 상기 발광 소자의 제1전극 및 제2전극 중 어느 하나는 전기적으로 연결될 수 있다.

[0397] 상기 박막 트랜지스터는 게이트 전극, 게이트 절연막 등을 더 포함할 수 있다.

[0398] 상기 활성층은 결정질 실리콘, 비정질 실리콘, 유기 반도체, 산화물 반도체 등을 포함할 수 있다.

[0399] 상기 전자 장치는 발광 소자를 밀봉하는 밀봉부를 더 포함할 수 있다. 상기 밀봉부는 상기 컬러 필터 및/또는 색변환층과 상기 발광 소자 사이에 배치될 수 있다. 상기 밀봉부는 상기 발광 소자로부터의 광이 외부로 취출될 수 있도록 하면서, 동시에 상기 발광 소자로 외기 및 수분이 침투하는 것을 차단한다. 상기 밀봉부는 투명한 유리 기판 또는 플라스틱 기판을 포함하는 밀봉 기판일 수 있다. 상기 밀봉부는 유기층 및/또는 무기층을 1층 이상 포함하는 박막 봉지층일 수 있다. 상기 밀봉부가 박막 봉지층일 경우, 상기 전자 장치는 플렉시블할 수 있다.

[0400] 상기 밀봉부 상에는, 상기 컬러 필터 및/또는 색변환층 외에, 상기 전자 장치의 용도에 따라 다양한 기능층이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기능층의 예는, 터치스크린층, 편광층, 등을 포함할 수 있다. 상기 터치스크린층은, 감압식 터치스크린층, 정전식 터치스크린층 또는 적외선식 터치스크린층일 수 있다. 상기 인증 장치는, 예를 들면, 생체(예를 들어, 손가락 끝, 눈동자 등)의 생체 정보를 이용하여 개인을 인증하는 생체 인증 장치일 수 있다.

[0401] 상기 인증 장치는 상술한 바와 같은 발광 소자 외에 생체 정보 수집 수단을 더 포함할 수 있다.

[0402] 상기 전자 장치는 각종 디스플레이, 광원, 조명, 퍼스널 컴퓨터(예를 들면, 모바일형 퍼스널 컴퓨터), 휴대 전화, 디지털 사진기, 전자 수첩, 전자 사진, 전자 게임기, 의료 기기(예를 들면, 전자 체온계, 혈압계, 혈당계, 맥박 계측 장치, 맥파 계측 장치, 심전표시 장치, 초음파 진단 장치, 내시경용 표시 장치), 어군 탐지기, 각종 측정 기기, 계기류(예를 들면, 차량, 항공기, 선박의 계기류), 프로젝터 등으로 응용될 수 있다.

[0403] [도 2 및 3에 대한 설명]

[0404] 도 2는 본 발명의 일 구현예를 따르는 발광 장치의 단면도이다.

[0405] 도 2의 발광 장치는 기판(100), 박막 트랜지스터(TFT), 발광 소자 및 발광 소자를 밀봉하는 봉지부(300)를 포함한다.

[0406] 상기 기판(100)은 가요성 기판, 유리 기판, 또는 금속 기판일 수 있다. 상기 기판(100) 상에는 버퍼층(210)이 배치될 수 있다. 상기 버퍼층(210)은 기판(100)을 통한 불순물의 침투를 방지하며 기판(100) 상부에 평탄한 면을 제공하는 역할을 할 수 있다.

[0407] 상기 버퍼층(210) 상에는 박막 트랜지스터(TFT)가 배치될 수 있다. 상기 박막 트랜지스터(TFT)는 활성층(220), 게이트 전극(240), 소스 전극(260) 및 드레인 전극(270)을 포함할 수 있다.

[0408] 상기 활성층(220)은 실리콘 또는 폴리 실리콘과 같은 무기 반도체, 유기 반도체 또는 산화물 반도체를 포함할 수 있으며, 소스 영역, 드레인 영역 및 채널 영역을 포함한다.

[0409] 상기 활성층(220)의 상부에는 활성층(220)과 게이트 전극(240)을 절연하기 위한 게이트 절연막(230)이 배치될 수 있고, 게이트 절연막(230) 상부에는 게이트 전극(240)이 배치될 수 있다.

[0410] 상기 게이트 전극(240)의 상부에는 층간 절연막(250)이 배치될 수 있다. 상기 층간 절연막(250)은 게이트 전극(240)과 소스 전극(260) 사이 및 게이트 전극(240)과 드레인 전극(270) 사이에 배치되어 이들을 절연하는 역할

을 한다.

- [0411] 상기 층간 절연막(250) 상에는 소스 전극(260) 및 드레인 전극(270)이 배치될 수 있다. 층간 절연막(250) 및 게이트 절연막(230)은 활성층(220)의 소스 영역 및 드레인 영역이 노출하도록 형성될 수 있고, 이러한 활성층(220)의 노출된 소스 영역 및 드레인 영역과 접하도록 소스 전극(260) 및 드레인 전극(270)이 배치될 수 있다.
- [0412] 이와 같은 박막 트랜지스터(TFT)는 발광 소자에 전기적으로 연결되어 발광 소자를 구동시킬 수 있으며, 패시베이션층(280)으로 덮여 보호된다. 패시베이션층(280)은 무기 절연막, 유기 절연막, 또는 이의 조합을 포함할 수 있다. 패시베이션층(280) 상에는 발광 소자가 구비된다. 상기 발광 소자는 제1전극(110), 중간층(130) 및 제2전극(150)을 포함한다.
- [0413] 상기 제1전극(110)은 패시베이션층(280) 상에 배치될 수 있다. 패시베이션층(280)은 드레인 전극(270)의 전체를 덮지 않고 소정의 영역을 노출하도록 배치될 수 있고, 노출된 드레인 전극(270)과 연결되도록 제1전극(110)이 배치될 수 있다.
- [0414] 상기 제1전극(110) 상에 절연물을 포함한 화소 정의막(290)이 배치될 수 있다. 화소 정의막(290)은 제1전극(110)의 소정 영역을 노출하며, 노출된 영역에 중간층(130)이 형성될 수 있다. 화소 정의막(290)은 폴리이미드 또는 폴리아크릴 계열의 유기막일 수 있다. 도 2에 미도시되어 있으나, 중간층(130) 중 일부 이상의 층은 화소 정의막(290) 상부에까지 연장되어 공통층의 형태로 배치될 수 있다.
- [0415] 상기 중간층(130) 상에는 제2전극(150)이 배치되고, 제2전극(150) 상에는 캡핑층(170)이 추가로 형성될 수 있다. 캡핑층(170)은 제2전극(150)을 덮도록 형성될 수 있다.
- [0416] 상기 캡핑층(170) 상에는 봉지부(300)가 배치될 수 있다. 봉지부(300)는 발광 소자 상에 배치되어 수분이나 산소로부터 발광 소자를 보호하는 역할을 할 수 있다. 봉지부(300)는 실리콘 질화물(SiNx), 실리콘 산화물(SiOx), 인듐주석산화물, 인듐아연산화물, 또는 이의 임의의 조합을 포함한 무기막, 폴리에틸렌테레프탈레이트, 폴리에틸렌나프탈레이트, 폴리카보네이트, 폴리이미드, 폴리에틸렌셀로폰에이트, 폴리옥시메틸렌, 폴리아릴레이트, 헥사메틸디실록산, 아크릴계 수지(예를 들면, 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리아크릴산 등), 에폭시계 수지(예를 들면, AGE(aliphatic glycidyl ether) 등) 또는 이의 임의의 조합을 포함한 유기막, 또는 무기막과 유기막의 조합을 포함할 수 있다.
- [0417] 도 3은 본 발명의 다른 구현예를 따르는 발광 장치의 단면도이다.
- [0418] 도 3의 발광 장치는, 봉지부(300) 상부에 차광 패턴(500) 및 기능성 영역(400)이 추가로 배치되어 있다는 점을 제외하고는, 도 2의 발광 장치와 동일한 발광 장치이다. 상기 기능성 영역(400)은, i) 컬러 필터 영역, ii) 색변환 영역, 또는 iii) 컬러 필터 영역과 색변환 영역의 조합일 수 있다. 일 구현예에 따르면, 도 3의 발광 장치에 포함된 발광 소자는 탠덤 발광 소자일 수 있다.
- [0419] [제조 방법]
- [0420] 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.
- [0421] 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.
- [0422] [용어의 정의]
- [0423] 본 명세서 중 $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 카보시클릭 그룹은 고리-형성 원자로서 탄소로만 이루어진 탄소수 3 내지 60의 시클릭 그룹을 의미하고, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로시클릭 그룹은, 탄소 외에, 고리-형성 원자로서 헤테로 원자를 더 포함한 탄소수 1 내지 60의 시클릭 그룹을 의미한다. 상기 $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 카보시클릭 그룹 및 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로시클릭 그룹 각각은, 1개의 고리로 이루어진 모노시클릭 그룹 또는 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 예를 들어, 상기 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로시클릭 그룹의 고리-형성 원자수는 3 내지 61개일 수 있다.

- [0424] 본 명세서 중 시클릭 그룹은 상기 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 모두를 포함한다.
- [0425] 본 명세서 중 π 전자-과잉 C_3 - C_{60} 시클릭 그룹(π electron-rich C_3 - C_{60} cyclic group)은 고리 형성 모이어티로서 $*-N=*'$ 를 비포함한 탄소수 3 내지 60의 시클릭 그룹을 의미하고, π 전자-결핍성 함질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹(π electron-deficient nitrogen-containing C_1 - C_{60} cyclic group)은 고리 형성 모이어티로서 $*-N=*'$ 를 포함한 탄소수 1 내지 60의 헤테로시클릭 그룹을 의미한다.
- [0426] 예를 들어,
- [0427] 상기 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹은, i) 그룹 T1 또는 ii) 2 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹 (예를 들면, 시클로펜타디엔 그룹, 아다만탄 그룹, 노르보르난 그룹, 벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프틸렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타헨 그룹, 헵탈렌 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 헥사센 그룹, 펜타센 그룹, 루비센 그룹, 코로넨 그룹, 오발렌 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 인데노페난트렌 그룹, 또는 인데노안트라센 그룹)일 수 있고,
- [0428] 상기 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹은 i) 그룹 T2, ii) 2 이상의 그룹 T2가 서로 축합된 축합환 그룹 또는 iii) 1 이상의 그룹 T2와 1 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹 (예를 들면, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조인돌 그룹, 나프토인돌 그룹, 이소인돌 그룹, 벤조이소인돌 그룹, 나프토이소인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 인데노카바졸 그룹, 인돌로카바졸 그룹, 벤조퓨로카바졸 그룹, 벤조티에노카바졸 그룹, 벤조실롤로카바졸 그룹, 벤조인돌로카바졸 그룹, 벤조카바졸 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹, 벤조나프토실롤 그룹, 벤조퓨로디벤조퓨란 그룹, 벤조퓨로디벤조티오펜 그룹, 벤조티에노디벤조티오펜 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조이속사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조이소티아졸 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 시놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 이미다조트리아진 그룹, 이미다조피라진 그룹, 이미다조피리다진 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹 등)일 수 있고,
- [0429] 상기 π 전자-과잉 C_3 - C_{60} 시클릭 그룹은 i) 그룹 T1, ii) 2 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹, iii) 그룹 T3, iv) 2 이상의 그룹 T3가 서로 축합된 축합환 그룹 또는 v) 1 이상의 그룹 T3와 1 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹 (예를 들면, 상기 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 1H-피롤 그룹, 실롤 그룹, 보롤(borole) 그룹, 2H-피롤 그룹, 3H-피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조인돌 그룹, 나프토인돌 그룹, 이소인돌 그룹, 벤조이소인돌 그룹, 나프토이소인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 인데노카바졸 그룹, 인돌로카바졸 그룹, 벤조퓨로카바졸 그룹, 벤조티에노카바졸 그룹, 벤조실롤로카바졸 그룹, 벤조인돌로카바졸 그룹, 벤조카바졸 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹, 벤조나프토실롤 그룹, 벤조퓨로디벤조퓨란 그룹, 벤조퓨로디벤조티오펜 그룹, 벤조티에노디벤조티오펜 그룹 등)일 수 있고,
- [0430] 상기 π 전자-결핍성 함질소 C_1 - C_{60} 시클릭 그룹은 i) 그룹 T4, ii) 2 이상의 그룹 T4가 서로 축합된 축합환 그룹, iii) 1 이상의 그룹 T4와 1 이상의 그룹 T1이 서로 축합된 축합환 그룹, iv) 1 이상의 그룹 T4와 1 이상의 그룹 T3가 서로 축합된 축합환 그룹 또는 v) 1 이상의 그룹 T4, 1 이상의 그룹 T1 및 1 이상의 그룹 T3가 서로 축합된 축합환 그룹 (예를 들면, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조이속사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조이소티아졸 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 시놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 이미다조트리아진 그룹, 이미다조피라진 그룹, 이미다조피리다진 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조티

오픈 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹 등)일 수 있고,

- [0431] 상기 그룹 T1은, 시클로프로판 그룹, 시클로부탄 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헥탄 그룹, 시클로옥탄 그룹, 시클로부텐 그룹, 시클로펜텐 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 시클로헥센 그룹, 시클로헥사디엔 그룹, 시클로헥텐 그룹, 아다만탄(adamantane) 그룹, 노르보르난(norbornane) (또는, 비시클로[2.2.1]헵탄(bicyclo[2.2.1]heptane)) 그룹, 노르보르넨(norbornene) 그룹, 비시클로[1.1.1]펜탄(bicyclo[1.1.1]pentane) 그룹, 비시클로[2.1.1]헥산(bicyclo[2.1.1]hexane) 그룹, 비시클로[2.2.2]옥탄 그룹, 또는 벤젠 그룹이고,
- [0432] 상기 그룹 T2는, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 1H-피롤 그룹, 실롤 그룹, 보롤(borole) 그룹, 2H-피롤 그룹, 3H-피롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸(isoxazole) 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 아자실롤 그룹, 아자보롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 테트라진 그룹, 피롤리딘 그룹, 이미다졸리딘 그룹, 디히드로피롤 그룹, 피페리딘 그룹, 테트라히드로피리딘 그룹, 디히드로피리딘 그룹, 헥사히드로피리미딘 그룹, 테트라히드로피리미딘 그룹, 디히드로피리미딘 그룹, 피페라진 그룹, 테트라히드로피라진 그룹, 디히드로피라진 그룹, 테트라히드로피리다진 그룹, 또는 디히드로피리다진 그룹이고,
- [0433] 상기 그룹 T3는, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 1H-피롤 그룹, 실롤 그룹, 또는 보롤(borole) 그룹이고,
- [0434] 상기 그룹 T4는, 2H-피롤 그룹, 3H-피롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸(isoxazole) 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 아자실롤 그룹, 아자보롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹 또는 테트라진 그룹일 수 있다.
- [0435] 본 명세서 중 시클릭 그룹, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, π 전자-과잉 C₃-C₆₀ 시클릭 그룹 또는 π 전자-결핍성 합질소 C₁-C₆₀ 시클릭 그룹이란 용어는, 당해 용어가 사용된 화학식의 구조에 따라, 임의의 시클릭 그룹에 축합되어 있는 그룹, 1가 그룹 또는 다가 그룹(예를 들면, 2가 그룹, 3가 그룹, 4가 그룹 등)일 수 있다. 예를 들어, "벤젠 그룹"은 벤조 그룹, 페닐기, 페닐렌기 등일 수 있는데, 이는 "벤젠 그룹"이 포함된 화학식의 구조에 따라, 당업자가 용이하게 이해할 수 있는 것이다.
- [0436] 예를 들어, 1가 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 및 1가 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹의 예는, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹을 포함할 수 있고, 2가 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 및 2가 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹의 예는, C₃-C₁₀시클로알킬렌기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, C₆-C₆₀아릴렌기, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹을 포함할 수 있다.
- [0437] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는, 메틸기, 에틸기, *n*-프로필기, 이소프로필기, *n*-부틸기, *sec*-부틸기, 이소부틸기, *tert*-부틸기, *n*-펜틸기, *tert*-펜틸기, 네오펜틸기, 이소펜틸기, *sec*-펜틸기, 3-펜틸기, *sec*-이소펜틸기, *n*-헥실기, 이소헥실기, *sec*-헥실기, *tert*-헥실기, *n*-헵틸기, 이소헵틸기, *sec*-헵틸기, *tert*-헵틸기, *n*-옥틸기, 이소옥틸기, *sec*-옥틸기, *tert*-옥틸기, *n*-노닐기, 이소노닐기, *sec*-노닐기, *tert*-노닐기, *n*-데실기, 이소데실기, *sec*-데실기, *tert*-데실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0438] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는, C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 1가 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0439] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는, C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 1가 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는, 에티닐기, 프로피닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0440] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는, -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하

며, 이의 구체예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.

[0441] 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl)(또는, 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]heptyl)), 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]pentyl), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexyl), 비시클로[2.2.2]옥틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기는 상기 C_3 - C_{10} 시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0442] 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기는, 탄소 원자 외에, 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 더 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리아졸리디닐기(1,2,3,4-oxatriazolidinyl), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬렌기는 상기 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0443] 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 탄소-탄소 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.

[0444] 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기는 탄소 원자 외에, 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 더 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 시클릭 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-디히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0445] 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, 펜탈레닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헵탈레닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기 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.

[0446] 본 명세서 중 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기는 탄소 원자 외에, 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 더 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C_1 - C_{60} 헤테로아릴렌기는 탄소 원자 외에, 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 더 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, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트롤리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기 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.

[0447] 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, 인데닐기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 인데노페난트레닐기, 인데노안트라세닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0448] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상

의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 원자 외에 적어도 하나의 헤테로 원자를 더 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 구체예에는, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 인돌일기, 벤조인돌일기, 나프토인돌일기, 이소인돌일기, 벤조이소인돌일기, 나프토이소인돌일기, 벤조실롤일기, 벤조티오펜일기, 벤조퓨라닐기, 카바졸일기, 디벤조실롤일기, 디벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 아자카바졸일기, 아자플루오레닐기, 아자디벤조실롤일기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조퓨라닐기, 피라졸일기, 이미다졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사디아졸일기, 티아디아졸일기, 벤조피라졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조티아졸일기, 벤조옥사디아졸일기, 벤조티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 이미다조트리아지닐기, 이미다조피라지닐기, 이미다조피리다지닐기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, 벤조퓨로카바졸일기, 벤조티에노카바졸일기, 벤조실롤로카바졸일기, 벤조인돌로카바졸일기, 벤조카바졸일기, 벤조나프토피라닐기, 벤조나프토티오펜일기, 벤조나프토실롤일기, 벤조퓨로디벤조퓨라닐기, 벤조퓨로디벤조티오펜일기, 벤조티에노디벤조티오펜일기, 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0449] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.

[0450] 본 명세서 중 C₇-C₆₀아릴알킬기는 -A₁₀₄A₁₀₅(여기서, A₁₀₄는 C₁-C₅₄알킬렌기이고, A₁₀₅는 C₆-C₅₉아릴기임)를 가리키고, 본 명세서 중 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기는 -A₁₀₆A₁₀₇(여기서, A₁₀₆은 C₁-C₅₉알킬렌기이고, A₁₀₇은 C₁-C₅₉헤테로아릴기임)를 가리킨다. 본 명세서 중 "R_{10a}"는,

[0451] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 또는 니트로기;

[0452] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁), -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂), 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, 또는 C₁-C₆₀알콕시기;

[0453] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기, C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁), -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂), 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₇-C₆₀아릴알킬기 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기; 또는

[0454] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁), 또는 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0455] 일 수 있다.

[0456] 본 명세서 중 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; -F; -Cl; -Br; -I; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₆₀알킬기; C₂-C₆₀알케닐기; C₂-C₆₀알키닐기; C₁-C₆₀알콕시기; 또는 중수소, -F, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, C₇-C₆₀아릴알킬기 또는 C₂-C₆₀헤테로아릴알킬기;일 수 있다.

[0457] 본 명세서 중 헤테로 원자는, 탄소 원자를 제외한 임의의 원자를 의미한다. 상기 헤테로 원자의 예는, O, S, N, P, Si, B, Ge, Se, 또는 이의 임의의 조합을 포함한다.

[0458] 본 명세서 중 제3열 전이 금속(third-row transition metal)은 하프늄(Hf), 탄탈럼(Ta), 텅스텐(W), 레늄(Re), 오스뮴(Os), 이리듐(Ir), 백금(Pt) 및 금(Au) 등을 포함한다.

[0459] 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.

[0460] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

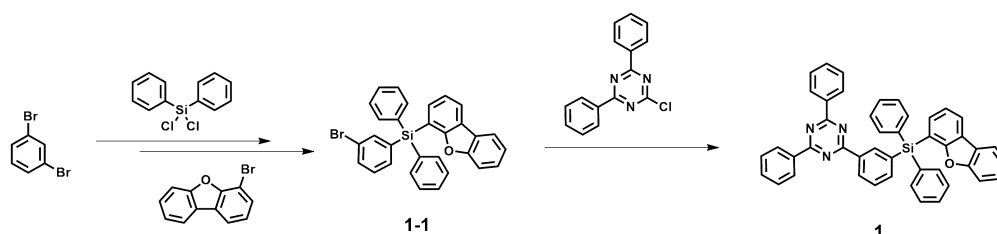
[0461] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0462] 본 명세서 중 * 및 *'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 또는 모이어티 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0463] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성에 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.

[0464] [실시예]

[0465] 합성예 1: 화합물 1의 합성



[0466]

[0467] 1) 중간체 1-1의 합성

[0468] 상기 반응을 연속적으로 진행하기 위하여 반응기 총 3개를 동시 준비하여, 하기 순서에 따라 반응을 진행하였다.

[0469] [반응기 1-1] 상기 1,3-Dibromobenzene 20g을 Tetrahydrofuran (THF) 40mL 용매에 -78°C에서 교반하면서 2.5M n-BuLi 33.9mL를 천천히 적가하였다. 적가 후 1시간 동안 -78°C에서 추가 교반하여, 반응액 1-1을 얻었다.

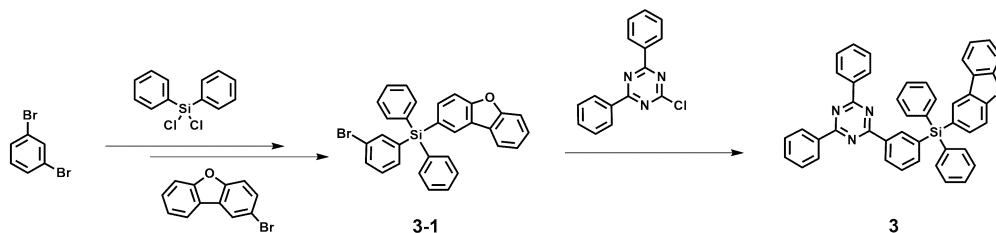
[0470] [반응기 1-2] Dichlorodiphenylsilane 21.5g을 THF 80mL에 용해시켜 -78°C에서 30분 교반하여 반응액 2를 얻었다. 상기 반응액 2에 반응액 1을 -78°C에서 케놀러를 이용하여 적가하였다. 하기 반응액 3이 준비될 때까지 -78°C에서 반응액 1-1 및 반응액 1-2를 교반하였다.

[0471] [반응기 1-3] 4-Bromodibenzo[b,d]furan 20.9g을 THF 40mL에 용해시켜 -78°C에서 교반하며 2.5M n-BuLi 33.9mL를 천천히 적가하였다. 적가 후 1시간 동안 -78°C에서 교반하여, 반응액 1-3을 얻었다. 상기 반응액 1-1 및 1-2의 혼합물에 반응액 3을 -78°C에서 케놀러를 이용하여 적가하였다. 이후 상기 반응액 1-1 내지 1-3의 혼합물을 상온에서 12시간 동안 교반하여 반응물을 얻었다. 상기 반응물에서 유기층을 추출하여 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후, 중간체 1-1을 30g (수율 70%) 얻었다. 상기 중간체 1-1을 LC-MS로 확인하였다. (C₃₀H₂₁BrOSi : M+1 505.49)

[0472] 2) 화합물 1의 합성

[0473] 상기 중간체 1-1 2g, 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (CAS=3842-55-5) 1.06g, 및 Pd(PPh₃)₄ 0.22g을 2M K₂CO₃ 수용액 4mL과 THF 20mL 용매에 녹인 후, 90°C에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응이 완결된 후, 반응 용액을 추출하고 얻어진 유기층을 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후 재결정 및 승화정제하여 고순도 화합물 1을 2.2g (수율 85%) 얻었다. 상기 화합물 1을 LC-MS 및 ¹H-NMR로 확인하였다.

합성예 2: 화합물 3의 합성



1) 중간체 3-1의 합성

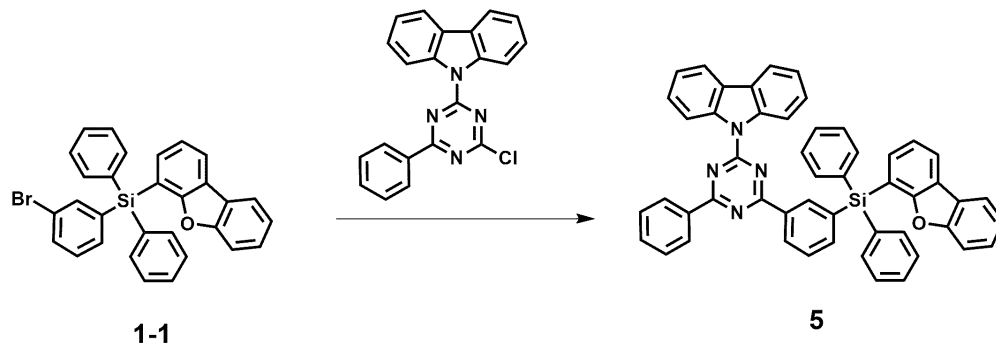
상기 반응을 연속적으로 진행하기 위하여 반응기 총 3개를 동시 준비하여, 하기 순서에 따라 반응을 진행하였다.

[반응기 3-3] 2-Bromodibenzo[b,d]furan 20.9g을 THF 40mL에 용해시켜 -78°C 에서 교반하며 2.5M n-BuLi 33.9mL를 천천히 적가하였다. 적가 후 1시간 동안 -78°C 에서 교반하여, 반응액 2-3을 얻었다. 상기 반응액 1-1 및 1-2의 혼합물에 반응액 2-3을 -78°C 에서 케놀러를 이용하여 적가하였다. 이후 상기 반응액 1-1, 1-2 및 2-3의 혼합물을 상온에서 12시간 동안 교반하여 반응물을 얻었다. 상기 반응물에서 유기층을 추출하여 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후, 중간체 3-1을 30g (수율 70%) 얻었다. 상기 중간체 3-1을 LC-MS로 확인하였다. ($\text{C}_{30}\text{H}_{21}\text{BrOSi}$: M+1 505.49)

2) 화합물 3의 합성

상기 중간체 3-1 2g, 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (CAS=3842-55-5) 1.06g, 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 0.22g을 2M K_2CO_3 수용액 4mL과 THF 20mL 용매에 녹인 후, 90°C 에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응이 완결된 후, 반응 용액을 추출하고 얻어진 유기층을 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후 재결정 및 승화정제하여 고순도 화합물 3을 2.4g (수율 92%) 얻었다. 상기 화합물 3을 LC-MS 및 $^1\text{H-NMR}$ 로 확인하였다.

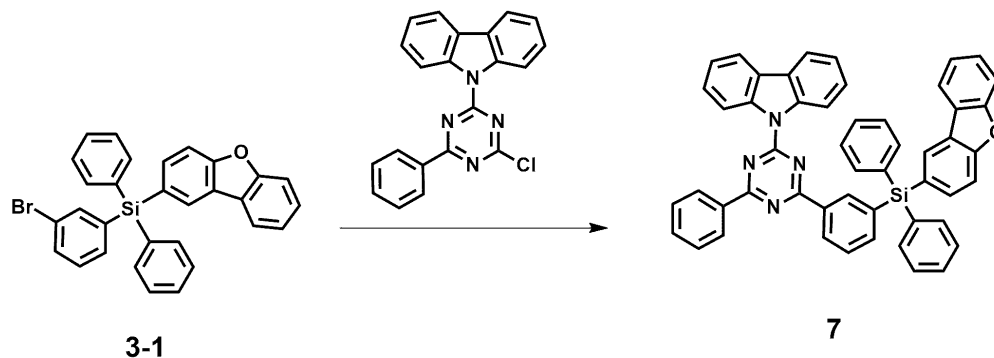
합성예 3: 화합물 5의 합성



1) 화합물 5의 합성

상기 중간체 1-1 2g, 9-(4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole (CAS= 1268244-56-9) 1.41g, 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 0.22g을 2M K_2CO_3 수용액 4mL과 THF 20mL 용매에 녹인 후, 90°C 에서 12시간 동안 교반하여 반응물을 얻었다. 상기 반응물에서 유기층을 추출하여 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후 재결정 및 승화정제하여 고순도 화합물 5를 2.5g (수율 85%) 얻었다. 상기 화합물 5를 LC-MS 및 $^1\text{H-NMR}$ 로 확인하였다.

[0485] **합성예 4: 화합물 7의 합성**

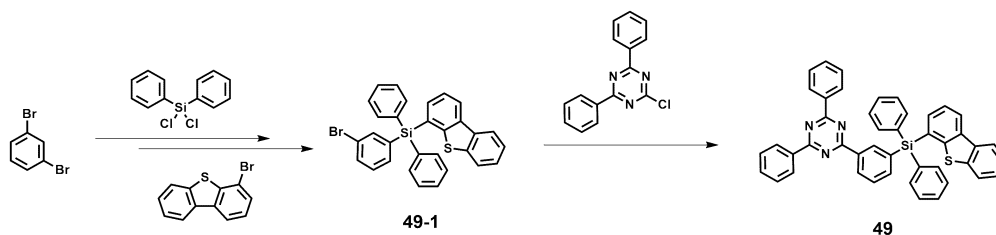


[0486]

[0487] **1) 화합물 7의 합성**

[0488] 상기 중간체 3-1 2g, 9-(4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole (CAS= 1268244-56-9) 1.41g, 및 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 0.22g을 2M K_2CO_3 수용액 4mL과 THF 20mL 용매에 녹인 후, 90°C 에서 12시간 동안 교반하여 반응물을 얻었다. 상기 반응물에서 유기층을 추출하여 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후 재결정 및 승화정제하여 고순도 화합물 7를 2.4g (수율 81%) 얻었다. 상기 화합물 7을 LC-MS 및 $^1\text{H-NMR}$ 로 확인하였다.

[0489] **합성예 5: 화합물 49의 합성**



[0490]

[0491] **1) 중간체 49-1의 합성**

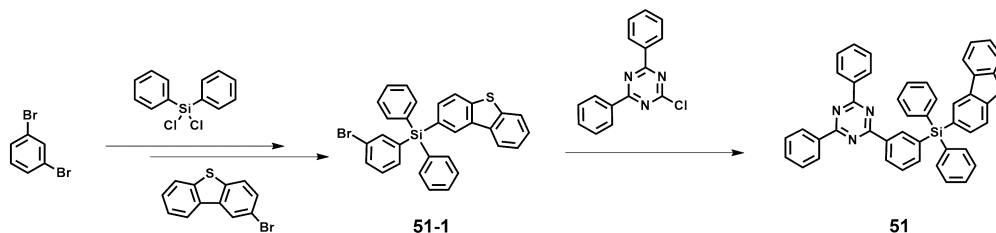
[0492] 상기 반응을 연속적으로 진행하기 위하여 반응기 총 3개를 동시 준비하며, 하기 순서에 따라 반응을 진행하였다.

[0493] [반응기 49-3] 4-Bromodibenzo[b,d]thiophene 22.3g을 THF 100mL에 용해시켜 -60°C 에서 교반하며 2.5M n-BuLi 33.9mL를 천천히 적가하였다. 적가 후 1시간 동안 -60°C 에서 교반하여, 반응액 49-3을 얻었다. 상기 반응액 49-3을 -60°C 에서 케놀러를 이용하여 상기 반응액 1-1 및 1-2의 혼합물에 적가하였다. 이후 상기 반응액 1-1, 1-2 및 49-3의 혼합물을 상온에서 12시간 동안 교반하여 반응물을 얻었다. 상기 반응물에서 유기층을 추출하여 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후, 중간체 49-1을 24g (수율 54%) 얻었다. 상기 중간체 49-1을 LC-MS로 확인하였다. ($\text{C}_{30}\text{H}_{21}\text{BrSSi}$: $\text{M}+1$ 521.55)

[0494] **2) 화합물 49의 합성**

[0495] 상기 중간체 49-1 2g, 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (CAS=3842-55-5) 1.02g, 및 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 0.22g을 2M K_2CO_3 수용액 3.8mL과 THF 20mL 용매에 녹인 후, 90°C 에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응이 완결된 후, 반응 용액을 추출하고 얻어진 유기층을 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후 재결정 및 승화정제하여 고순도 화합물 49를 2.2g (수율 85%) 얻었다. 상기 화합물 49를 LC-MS 및 $^1\text{H-NMR}$ 로 확인 하였다.

합성예 6: 화합물 51의 합성



1) 중간체 51-1의 합성

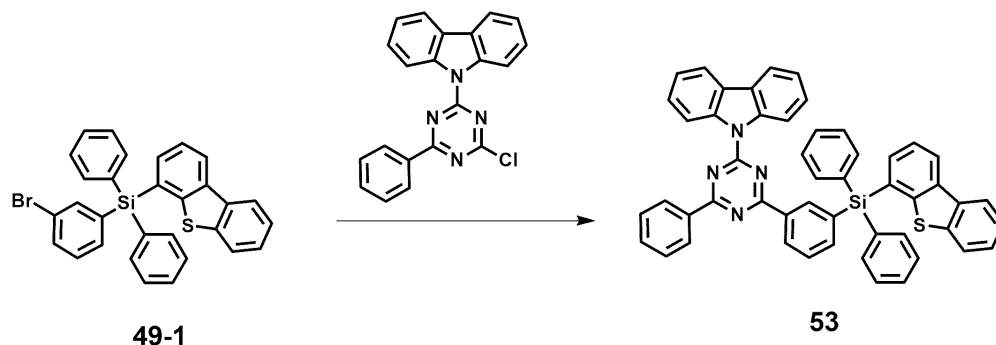
상기 반응을 연속적으로 진행하기 위하여 반응기를 총 3개 동시 준비하며, 하기 순서에 따라 반응을 진행한다.

[반응기 51-3] 2-Bromodibenzo[b,d]thiophene 22.3g을 THF 100mL에 용해시켜 -60°C 에서 교반하며 2.5M n-BuLi 33.9mL를 천천히 적가하였다. 적가 후 1시간 동안 -60°C 에서 교반하여 반응액 51-3을 얻었다. 상기 반응액 1-1 및 1-2의 혼합물에 상기 반응액 51-3을 -60°C 에서 케놀러를 이용하여 적가하였다. 이후 상기 반응액 1-1, 1-2 및 51-3의 혼합물을 상온에서 12시간 동안 교반하여 반응물을 얻었다. 상기 반응물에서 유기층을 추출하여 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후, 중간체 51-1을 25g (수율 57%) 얻었다. 상기 중간체 51-1을 LC-MS로 확인하였다. ($\text{C}_{30}\text{H}_{21}\text{BrSi}$: M+1 521.55)

2) 화합물 51의 합성

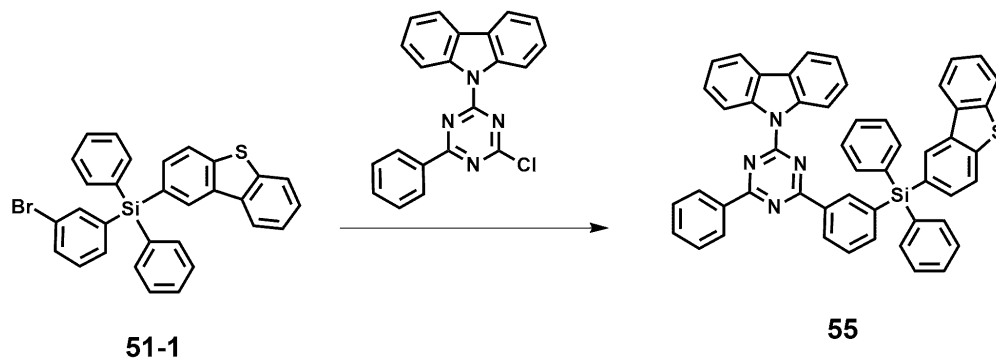
상기 중간체 51-1 2g, 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (CAS=3842-55-5) 1.02g, 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 0.22g을 2M K_2CO_3 수용액 3.8mL과 THF 20mL 용매에 녹인 후, 90°C 에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응이 완결된 후, 반응 용액을 추출하고 얻어진 유기층을 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후 재결정 및 승화정제하여 고순도 화합물 51을 2.1g (수율 81%) 얻었다. 상기 화합물 51을 LC-MS 및 $^1\text{H-NMR}$ 로 확인 하였다.

합성예 7: 화합물 53의 합성



1) 화합물 53의 합성

상기 중간체 49-1 2g, 9-(4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole (CAS= 1268244-56-9) 1.37g, 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 0.22g을 2M K_2CO_3 수용액 3.8mL과 THF 20mL 용매에 녹인 후, 90°C 에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응이 완결된 후, 반응 용액을 추출하고 얻어진 유기층을 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후 재결정 및 승화정제하여 고순도 화합물 53을 2.5g (수율 85%) 얻었다. 상기 화합물 53을 LC-MS 및 $^1\text{H-NMR}$ 로 확인하였다.

[0507] **합성예 8: 화합물 55의 합성**

[0508]

[0509] **1) 화합물 55의 합성**

[0510] 상기 중간체 51-1 2g, 9-(4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole (CAS= 1268244-56-9) 1.37g, 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 0.22g을 2M K_2CO_3 수용액 3.8mL과 THF 20mL 용매에 녹인 후, 90°C 에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응이 완결된 후, 반응 용액을 추출하고 얻어진 유기층을 건조하였다. 상기 혼합 유기물을 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 후 재결정 및 승화정제하여 고순도 화합물 55을 2.7g (수율 92%) 얻었다. 상기 화합물 55를 LC-MS 및 $^1\text{H-NMR}$ 로 확인하였다.

[0511] 상기 합성예 1 내지 8에서 합성된 화합물들의 ^1H NMR 및 MS/FAB을 하기 표 1에 나타내었다. 표 1에 나타난 화합물 이외의 다른 화합물들도 위의 합성 경로 및 원료 물질을 참조하여 기술 분야에 숙련된 이들이 그 합성 방법을 용이하게 인식할 수 있다.

표 1

[0512]

화합물	H NMR (δ)	MS/FAB	
		Calc	Found
1	8.36(m, 5H), 8.08(d, 1H), 7.98(d, 1H), 7.88(s, 1H), 7.31-7.50(m, 23H)	657.22	657.85
3	8.36(m, 5H), 7.98(d, 1H), 7.88(s, 1H), 7.46(s, 2H), 7.31-7.70(m, 22H)	657.22	657.85
5	8.55(d, 1H), 8.36-8.38(m, 3H), 8.19(d, 1H), 8.08(d, 1H), 7.88-7.98(m, 3H), 7.31-7.50(m, 25H)	746.25	746.95
7	8.55(d, 1H), 8.36-8.38(m, 3H), 8.19(d, 1H), 7.88-7.98(m, 3H), 7.77(s, 1H), 7.16-7.64(m, 25H)	746.25	746.95
49	8.55(d, 1H), 8.36-8.45(d, 6H), 7.88-7.93(m, 2H), 7.38-7.64(m, 22H)	673.20	673.91
51	8.36-8.45(d, 6H), 8.06(d, 2H), 7.88-7.93(m, 2H), 7.38-7.64(m, 21H)	673.20	673.91
53	8.55(d, 2H), 8.36-8.45(m, 4H), 8.19(d, 1H), 7.88-7.94(m, 3H), 7.16-7.64(m, 24H)	762.23	763.01
55	8.55(d, 1H), 8.36-8.45(m, 4H), 8.19(d, 1H), 7.46-8.06(m, 2H), 7.88-7.94(m, 3H), 7.16-7.64(m, 23H)	762.23	763.01

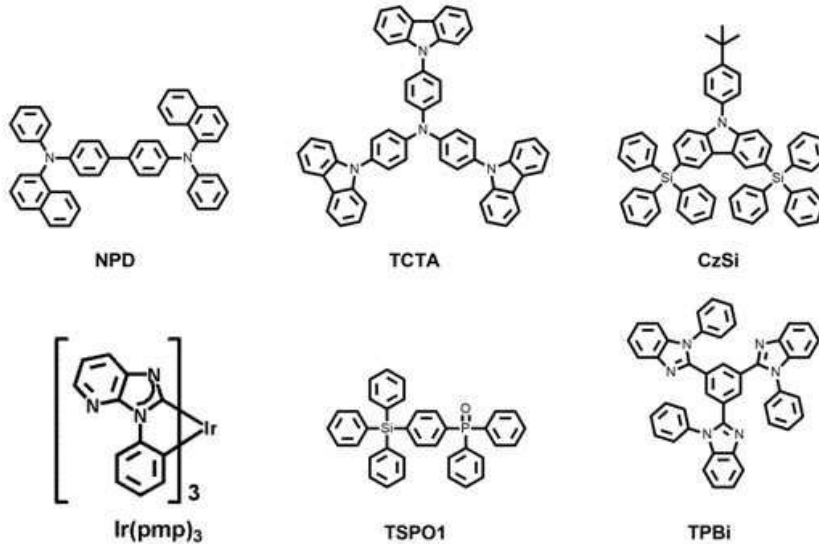
[0513] **실시예 1**

[0514] 애노드로서 코닝(corning) $15\Omega/\text{cm}^2$ (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고, 진공증착장치에 상기 유리기판을 설치하였다.

[0515] 상기 유리기판에 형성된 ITO 애노드 상부에 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(NPD)을 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 주입층을 형성하였다.

[0516] 상기 정공 주입층 상부에 TCTA를 진공 증착하여 200Å의 두께의 제1정공 수송층을 형성한 후, 상기 제1정공 수송층 상부에 CsSi를 진공 증착 하여 100Å 두께의 제2정공 수송층을 형성하였다.

- [0517] 상기 제2정공 수송층 상부에 화합물 1(호스트) 및 $\text{Ir}(\text{pmp})_3$ (도펀트)를 중량비 92:8로 동시 증착하여 200Å 두께의 발광층을 형성하였다.
- [0518] 이어서 상기 발광층 상부에 TSP01를 증착하여 200Å 두께의 전자 수송층을 형성한 후, 상기 전자 수송층 상부에 버퍼 전자 수송성 화합물 TPBi를 증착하여 300Å 두께의 버퍼층을 형성하였다.
- [0519] 상기 버퍼층 상부에 할로겐화 알칼리금속인 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al를 진공 증착하여 3000Å 두께의 LiF/Al 전극을 형성함으로써 발광 소자를 제조하였다.



- [0520]
- [0521] 실시예 2 내지 8 및 비교예 1 내지 3

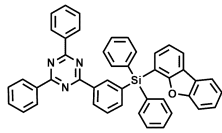
- [0522] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 하기 표 2에 기재된 화합물을 이용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 발광 소자를 제작하였다.

[0523] **평가예 1**

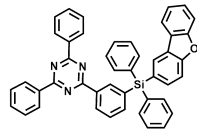
- [0524] 실시예 1 내지 8 및 비교예 1 내지 3에서 제작된 발광 소자의 특성을 평가하기 위하여 전류 밀도 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 에서의 구동 전압, 발광 효율 및 최대 외부 양자 효율(EQE)을 측정하였다. 유기 발광 소자의 구동 전압은 소스 미터(Keithley Instrument사, 2400 series)를 이용하여 측정하였으며, 최대 외부 양자 효율은 하마마츠 포토닉스사의 외부 양자 효율 측정 장치 C9920-2-12를 사용하여 측정하였다. 최대 외부 양자 효율 평가에 있어서 파장 감도의 교정을 한 휘도계를 이용하여 휘도/전류 밀도를 측정하고, 완전확산 반사면을 상정한 각도 휘도 분포(Lambertian)를 가정하여 최대 외부 양자 효율을 환산하였다. 유기 발광 소자의 특성 평가 결과는 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

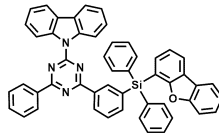
	발광층 중 호스트	구동전압 (V)	발광 효율 (Cd/A)	최대 외부 양자 효율(%)	발광색
실시예 1	화합물 1	4.2	22.5	22.1	청색
실시예 2	화합물 3	4.1	22.4	21.6	청색
실시예 3	화합물 5	4.2	21.1	20.8	청색
실시예 4	화합물 7	4.3	22.7	21.7	청색
실시예 5	화합물 49	4.1	22.4	21.8	청색
실시예 6	화합물 51	4.0	22.3	21.3	청색
실시예 7	화합물 53	4.2	22.0	21.8	청색
실시예 8	화합물 55	4.1	22.1	22.0	청색
비교예 1	mCP	4.8	16.3	15.2	청색
비교예 2	화합물 A	4.9	17.8	16.9	청색
비교예 3	화합물 B	4.8	17.5	17.1	청색



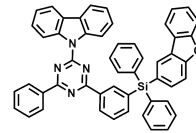
1



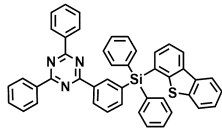
3



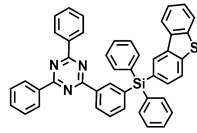
5



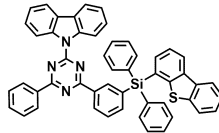
7



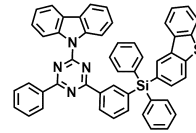
49



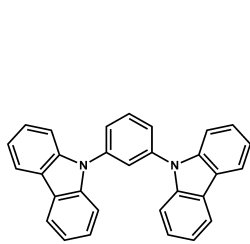
51



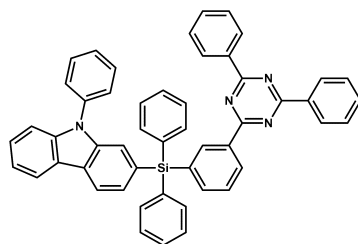
53



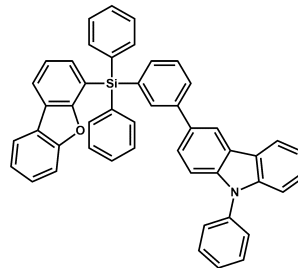
55



mCP



A



B

[0526]

[0527]

상기 표 2로부터, 실시예 1 내지 8의 발광 소자는 비교예 1 내지 3의 발광 소자에 비하여 구동 전압이 감소하고, 발광 효율 및 최대 양자 효율이 증가하는 효과가 있음을 확인할 수 있다.

[0528]

본 발명에 대해 상기 합성에 및 실시예를 참고하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

부호의 설명

[0529]

10: 발광 소자

100: 기판

110: 제1전극

130: 중간층

150: 제2전극

170: 캡핑층

210: 버퍼층

220: 활성층

230: 게이트 절연막

240: 게이트 전극

250: 층간 절연막

260: 소스 전극

270: 드레인 전극

280: 패시베이션층

290: 화소 정의막

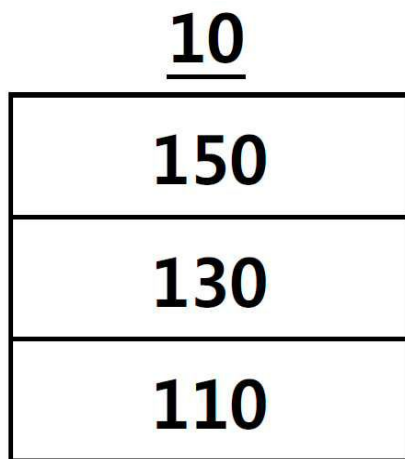
300: 봉지부

400: 기능성 영역

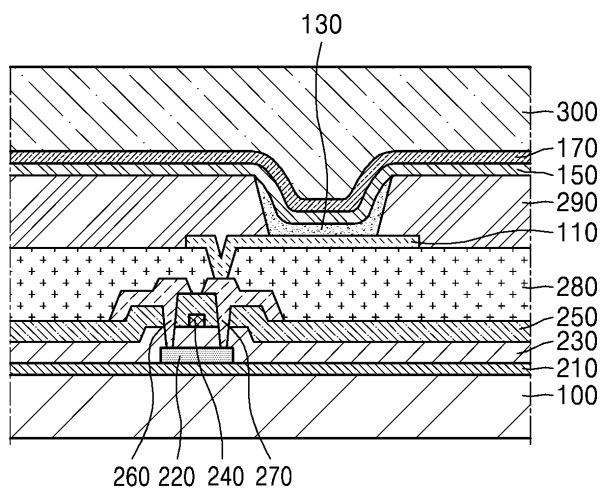
500: 차광 패턴

도면

도면1



도면2



도면3

