



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0141052
(43) 공개일자 2019년12월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/008 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0067527

(22) 출원일자 2018년06월12일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

김세훈

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

유재진

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(74) 대리인

리엔텍특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자

(57) 요약

축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1

10

190

150

110

(52) CPC특허분류

H01L 51/0094 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

C09K 2211/1096 (2013.01)

C09K 2211/181 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

제1전극;

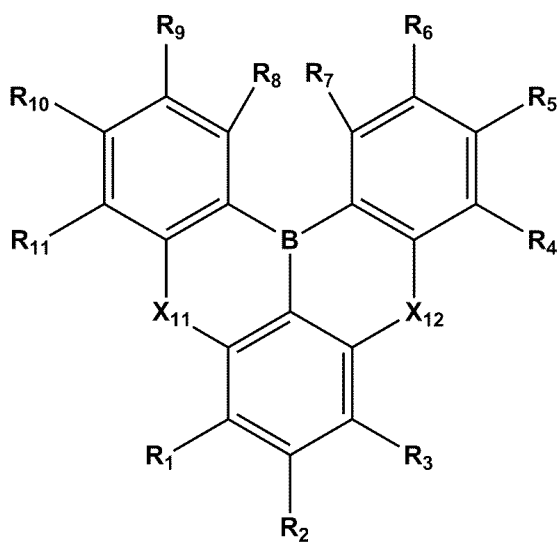
상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;

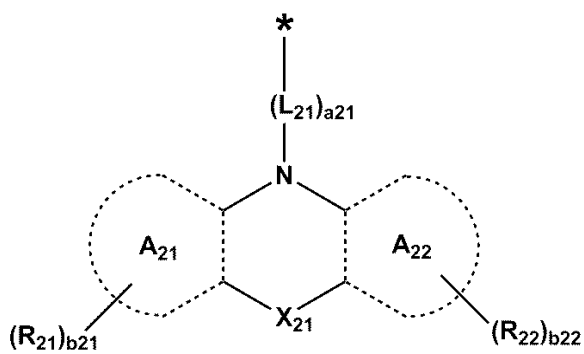
을 포함하고,

상기 유기층은 하기 화학식 1로 표시된 축합환 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자:

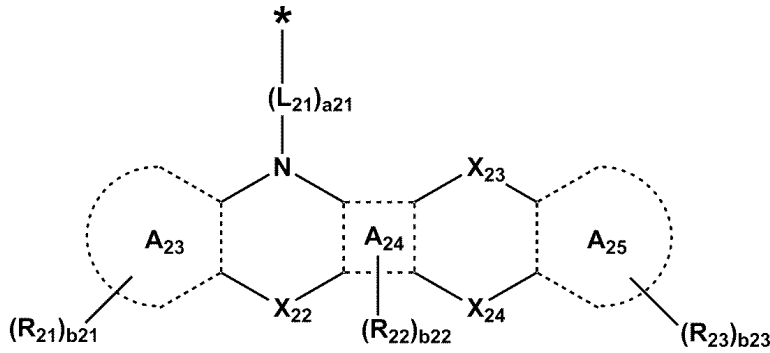
<화학식 1>



<화학식 2A>



<화학식 2B>



상기 화학식 1, 화학식 2A 및 화학식 2B 중,

X_{11} 은 $C(R_{12})(R_{13})$, $Si(R_{12})(R_{13})$, O 및 S 중에서 선택되고, X_{12} 는 $C(R_{14})(R_{15})$, $Si(R_{14})(R_{15})$, O 및 S 중에서 선택되
 되,

X_{11} 가 O 또는 S인 경우 X_{12} 는 $C(R_{14})(R_{15})$ 및 $Si(R_{14})(R_{15})$ 중에서 선택되고,

X_{12} 가 O 또는 S인 경우 X_{11} 은 $C(R_{12})(R_{13})$ 및 $Si(R_{12})(R_{13})$ 중에서 선택되고,

X_{21} 및 X_{22} 는 서로 독립적으로, 단일결합, $C(R_{24})(R_{25})$, $Si(R_{24})(R_{25})$, $N(R_{24})$, O 및 S 중에서 선택되고,

X_{23} 는 단일결합, $C(R_{26})(R_{27})$, $Si(R_{26})(R_{27})$, $N(R_{26})$, O 및 S 중에서 선택되고, X_{24} 는 단일결합, $C(R_{28})(R_{29})$,
 $Si(R_{28})(R_{29})$, $N(R_{28})$, O 및 S 중에서 선택되되, X_{23} 및 X_{24} 이 모두 단일결합인 경우는 제외하고,

A_{21} 내지 A_{25} 는 서로 독립적으로, C_5 - C_{30} 가보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

L_{21} 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 가보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 중
 서 선택되고,

a_{21} 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

R_1 내지 R_3 은 서로 독립적으로, 화학식 2A로 표시되는 그룹, 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F,
 -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된
 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 -
 C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는
 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴
 기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테
 로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는
 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,
 - $Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, - $N(Q_1)(Q_2)$, - $B(Q_1)(Q_2)$, - $C(=O)(Q_1)$, - $S(=O)_2(Q_1)$ 및 - $P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 중에서 선택되되, R_1
 내지 R_3 중 적어도 하나는 화학식 2A로 표시되는 그룹 및 화학식 2B로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

R_4 내지 R_{15} 및 R_{21} 내지 R_{29} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트
 로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알
 케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클
 로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는
 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기,
 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로
 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치

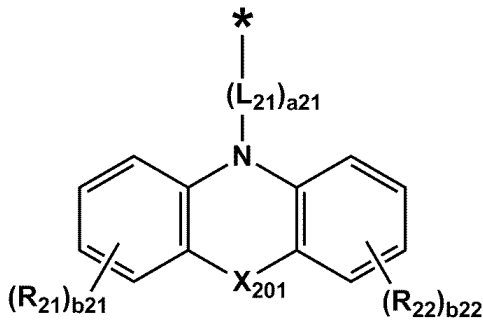
환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-\text{Si}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)(\text{Q}_3)$, $-\text{N}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, $-\text{B}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_1)$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_1)$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$ 및 중에서 선택되고,

R_1 내지 R_{15} 중 인접하는 2개의 기 및/또는 R_{21} 내지 R_{29} 중 인접하는 2개의 기는 선택적으로(optionally) 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,

b_{21} 내지 b_{23} 은 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

단, i) 화학식 1 중 X_{11} 이 $\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$ 이고, X_{12} 가 $\text{C}(\text{R}_{14})(\text{R}_{15})$, O 또는 S이고, R_{12} 와 R_{13} 및/또는 R_{14} 와 R_{15} 가 서로 연결되지 않는 경우, 또는 ii) X_{11} 이 $\text{C}(\text{R}_{12})(\text{R}_{13})$, O 또는 S이고, X_{12} 가 $\text{C}(\text{R}_{14})(\text{R}_{15})$ 이고, R_{12} 와 R_{13} 및/또는 R_{14} 와 R_{15} 가 서로 연결되지 않는 경우, 상기 R_1 내지 R_3 는 하기 화학식 2A-a로 표시되는 그룹을 포함하지 않고,

<화학식 2A-a>



상기 화학식 2A-a 중, X_{201} 은 단일결합, $\text{C}(\text{R}_{24})(\text{R}_{25})$, $\text{N}(\text{R}_{24})$, O 또는 S이고, R_{24} 와 R_{25} 는 서로 연결되지 않고,

상기 치환된 $\text{C}_5\text{-C}_{60}$ 카보시클릭 그룹, 치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로시클릭 그룹, 치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기, 치환된 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알케닐기, 치환된 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알키닐기, 치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기, 치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알킬기, 치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알케닐기, 치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, 치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴옥시기, 치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴티오기, 치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴옥시기, 치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기, $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알케닐기, $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알키닐기 및 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기;

중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알킬기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알케닐기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴옥시기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴티오기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-\text{Si}(\text{Q}_{11})(\text{Q}_{12})(\text{Q}_{13})$, $-\text{N}(\text{Q}_{11})(\text{Q}_{12})$, $-\text{B}(\text{Q}_{11})(\text{Q}_{12})$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{11})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{11})$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{11})(\text{Q}_{12})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기, $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알케닐기, $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알키닐기 및 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기;

$\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알킬기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알케닐기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴옥시기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴티오기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기, $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알케닐기, $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알키닐기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알킬기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알케닐기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴옥시기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴티오기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-\text{Si}(\text{Q}_{21})(\text{Q}_{22})(\text{Q}_{23})$, $-\text{N}(\text{Q}_{21})(\text{Q}_{22})$,

-B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

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

중에서 선택되고,

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

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

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

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

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

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 발광층이 상기 축합환 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 발광층이 상기 축합환 화합물로 이루어지거나(consist of); 또는

상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층 100중량부 당 상기 축합환 화합물의 함량이 0.1중량부 내지 50중량부인, 유기 발광 소자.

청구항 5

제3항에 있어서,

상기 발광층에 포함된 상기 축합환 화합물은 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고,

상기 발광층이 지연 형광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 6

제3항에 있어서,

상기 발광층은 최대 발광 파장이 420nm 이상 470nm 이하인 청색광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 7

제2항에 있어서,

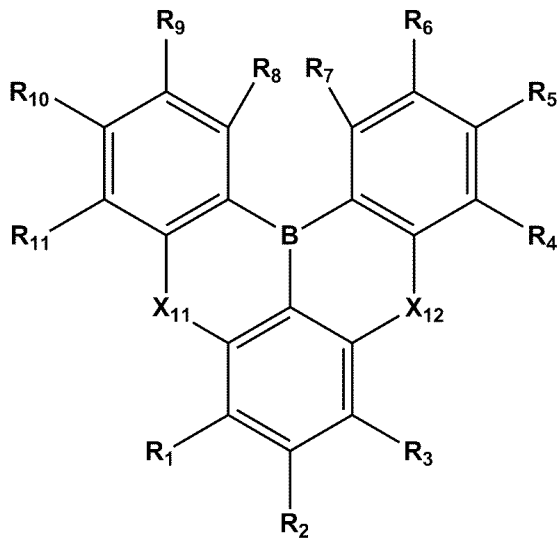
상기 정공 수송 영역이 p-도펀트를 포함하고,

상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하인, 유기 발광 소자.

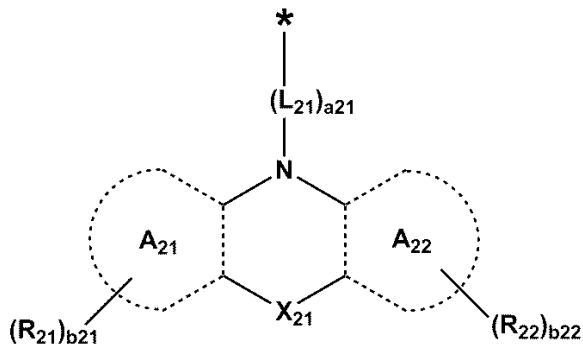
청구항 8

하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물:

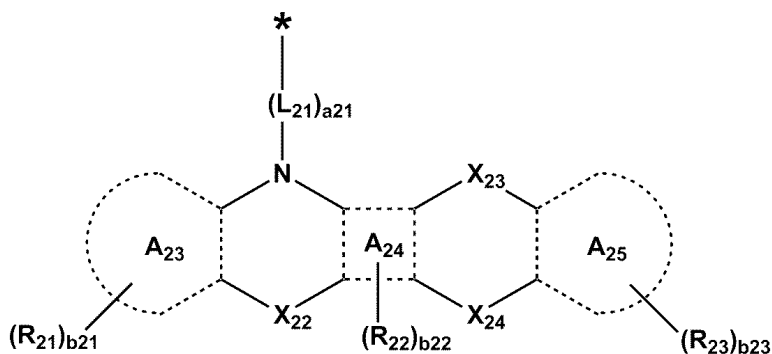
<화학식 1>



<화학식 2A>



<화학식 2B>



상기 화학식 1, 화학식 2A 및 화학식 2B 중,

X_{11} 은 $C(R_{12})(R_{13})$, $Si(R_{12})(R_{13})$, O 및 S 중에서 선택되고, X_{12} 는 $C(R_{14})(R_{15})$, $Si(R_{14})(R_{15})$, O 및 S 중에서 선택되
 되,

X_{11} 가 O 또는 S인 경우 X_{12} 는 $C(R_{14})(R_{15})$ 및 $Si(R_{14})(R_{15})$ 중에서 선택되고,

X_{12} 가 O 또는 S인 경우 X_{11} 은 $C(R_{12})(R_{13})$ 및 $Si(R_{12})(R_{13})$ 중에서 선택되고,

X_{21} 및 X_{22} 는 서로 독립적으로, 단일결합, $C(R_{24})(R_{25})$, $Si(R_{24})(R_{25})$, $N(R_{24})$, O 및 S 중에서 선택되고,

X_{23} 는 단일결합, $C(R_{26})(R_{27})$, $Si(R_{26})(R_{27})$, $N(R_{26})$, O 및 S 중에서 선택되고, X_{24} 는 단일결합, $C(R_{28})(R_{29})$,
 $Si(R_{28})(R_{29})$, $N(R_{28})$, O 및 S 중에서 선택되되, X_{23} 및 X_{24} 이 모두 단일결합인 경우는 제외하고,

A_{21} 내지 A_{25} 는 서로 독립적으로, C_5 - C_{30} 카보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

L_{21} 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 중
 에서 선택되고,

a_{21} 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

R_1 내지 R_3 은 서로 독립적으로, 화학식 2A로 표시되는 그룹, 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F,
 -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된
 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 -
 C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는
 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴
 기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테
 로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는
 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,
 -Si(Q_1)(Q_2)(Q_3), -N(Q_1)(Q_2), -B(Q_1)(Q_2), -C(=O)(Q_1), -S(=O)₂(Q_1) 및 -P(=O)(Q_1)(Q_2) 및
 중에서 선택되되, R_1
 내지 R_3 중 적어도 하나는 화학식 2A로 표시되는 그룹 및 화학식 2B로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

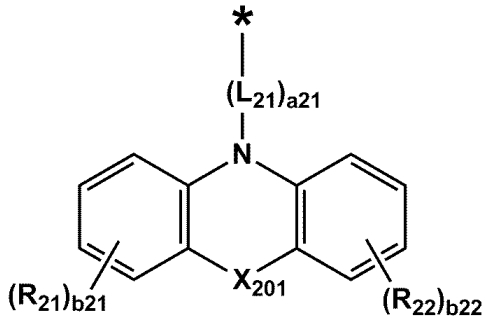
R_4 내지 R_{15} 및 R_{21} 내지 R_{29} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트
 로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알
 케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클
 로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는
 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기,
 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로
 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치
 환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q_1)(Q_2)(Q_3), -N(Q_1)(Q_2), -B(Q_1)(Q_2), -C(=O)(Q_1),
 -S(=O)₂(Q_1) 및 -P(=O)(Q_1)(Q_2) 및
 중에서 선택되고,

R_1 내지 R_{15} 중 인접하는 2개의 기 및/또는 R_{21} 내지 R_{29} 중 인접하는 2개의 기는 선택적으로(optionally) 서로
 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,

b_{21} 내지 b_{23} 은 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

단, i) 화학식 1 중 X_{11} 이 $C(R_{12})(R_{13})$ 이고, X_{12} 가 $C(R_{14})(R_{15})$, O 또는 S이고, R_{12} 와 R_{13} 및/또는 R_{14} 와 R_{15} 가 서로
 연결되지 않는 경우, 또는 ii) X_{11} 이 $C(R_{12})(R_{13})$, O 또는 S이고, X_{12} 가 $C(R_{14})(R_{15})$ 이고, R_{12} 와 R_{13} 및/또는 R_{14} 와
 R_{15} 가 서로 연결되지 않는 경우, 상기 R_1 내지 R_3 는 하기 화학식 2A-a로 표시되는 그룹을 포함하지 않고,

<화학식 2A-a>



상기 화학식 2A-a 중, X₂₀₁은 단일결합, C(R₂₄)(R₂₅), N(R₂₄), O 또는 S이고, R₂₄와 R₂₅는 서로 연결되지 않고,

상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

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

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

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

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

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

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기,

C₂-C₆₀알킬닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 9

제8항에 있어서,

X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 C(R₁₄)(R₁₅)이거나;

X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 Si(R₁₄)(R₁₅)이거나;

X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 O이거나;

X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 S이거나;

X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 Si(R₁₄)(R₁₅)이거나;

X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 O이거나; 또는

X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 S인, 축합환 화합물.

청구항 10

제8항에 있어서,

상기 화학식 2A 중, X₂₁은 단일결합, C(R₂₄)(R₂₅) 및 Si(R₂₄)(R₂₅) 중에서 선택되고,

상기 화학식 2B 중, X₂₂는 단일결합, C(R₂₄)(R₂₅) 및 Si(R₂₄)(R₂₅) 중에서 선택되고, X₂₃는 단일결합, C(R₂₆)(R₂₇), Si(R₂₆)(R₂₇), N(R₂₆), O 및 S 중에서 선택되고, X₂₄는 단일결합, C(R₂₈)(R₂₉), Si(R₂₈)(R₂₉), N(R₂₈) 중에서 선택된, 축합환 화합물.

청구항 11

제8항에 있어서,

i) X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 Si(R₁₄)(R₁₅)이고, R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이거나;

ii) X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃), Si(R₁₂)(R₁₃), O 및 S 중에서 선택되고, X₁₂는 C(R₁₄)(R₁₅), O 및 S 중에서 선택되고, R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이거나;

iii) X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃), O 및 S 중에서 선택되고, X₁₂는 C(R₁₄)(R₁₅), Si(R₁₄)(R₁₅), O 및 S 중에서 선택되고, R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이거나;

iv) X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 Si(R₁₄)(R₁₅)이고, R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이거나;

v) X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고, R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이거나; 또는

vi) X₁₂은 Si(R₁₄)(R₁₅)이고, R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이거나; 또는

vii) X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃), O 및 S 중에서 선택되고, X₁₂는 C(R₁₄)(R₁₅), O 및 S 중에서 선택되고, R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이고, R₂₄와 R₂₅가 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성하는, 축합환 화합물.

청구항 12

제8항에 있어서,

상기 화학식 2A 중, A₂₁ 및 A₂₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 2,6-나프티리딘 그룹, 1,8-나프티리딘 그룹, 1,5-나프티리딘 그룹, 1,6-나프티리딘 그룹, 1,7-나프티리딘 그룹, 2,7-나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹 및 페난트롤린 그룹 중에서 선택된, 축합환 화합물.

청구항 13

제8항에 있어서,

상기 화학식 2B 중, A₂₃ 내지 A₂₅는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 2,6-나프티리딘 그룹, 1,8-나프티리딘 그룹, 1,5-나프티리딘 그룹, 1,6-나프티리딘 그룹, 1,7-나프티리딘 그룹, 2,7-나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 인덴 그룹, 인돌 그룹, 퓨로피리딘 그룹, 티에노피리딘 그룹, 시클로펜타피리딘 그룹, 피롤로피리딘 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 플루오렌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디나프토피란 그룹, 디나프토티오펜 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 디벤조카바졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 나프토피란, 나프토티오펜, 스파이로-바이플루오렌 그룹 및 스파이로-플루오렌-인덴 그룹 중에서 선택된, 축합환 화합물.

청구항 14

제8항에 있어서,

L₂₁은 단일결합, 벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타페닐렌 그룹, 헥사센 그룹, 피롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 인다졸 그룹, 퓨린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 카바졸 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조카바졸 그룹 및 디벤조카바졸 그룹; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기, C₁-C₂₀헤테로아릴기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁) 및 -S(=O)₂(Q₃₁) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타페닐렌 그룹, 헥사센 그룹, 피롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 인다졸 그룹, 퓨린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 카바졸 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조카바졸 그룹 및 디벤조카바졸 그룹;

중에서 선택되고,

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

청구항 15

제8항에 있어서,

R₁ 내지 R₃은 서로 독립적으로, 화학식 2A로 표시되는 그룹, 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 -N(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

R₄ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 -N(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

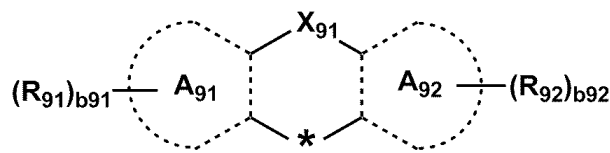
R₁₂와 R₁₃, R₁₄와 R₁₅, R₂₄와 R₂₅, R₂₆와 R₂₇, 및/또는 R₂₈과 R₂₉는 선택적으로 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있는, 축합환 화합물.

청구항 16

제8항에 있어서,

R₁₂와 R₁₃, R₁₄와 R₁₅, R₂₄와 R₂₅, R₂₆와 R₂₇, 및/또는 R₂₈과 R₂₉가 서로 연결되어 하기 화학식 9-1로 표시되는 기를 형성하는, 축합환 화합물:

<화학식 9-1>



상기 화학식 9-1 중,

X₉₁은 단일 결합, O, S, Se, C(R₉₃)(R₉₄), Si(R₉₃)(R₉₄) 및 Ge(R₉₃)(R₉₄) 중에서 선택되고,

A₉₁ 및 A₉₂는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

R₉₁ 및 R₉₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환

된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고;

b91 및 b92는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

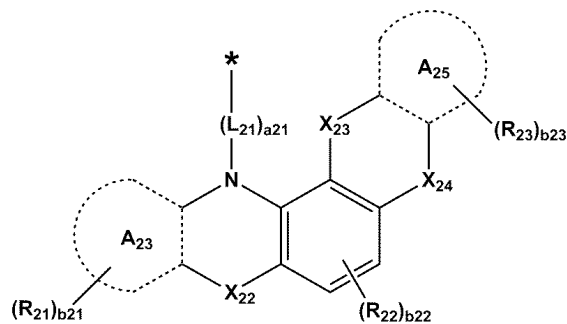
*는 상기 화학식 1, 화학식 2A 및 화학식 2B 중의 탄소 원자이다.

청구항 17

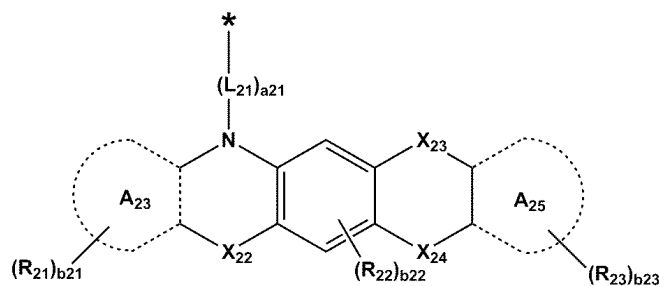
제8항에 있어서,

상기 화학식 2B로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2B-1 내지 2B-5 중 어느 하나로 표시되는, 축합환 화합물:

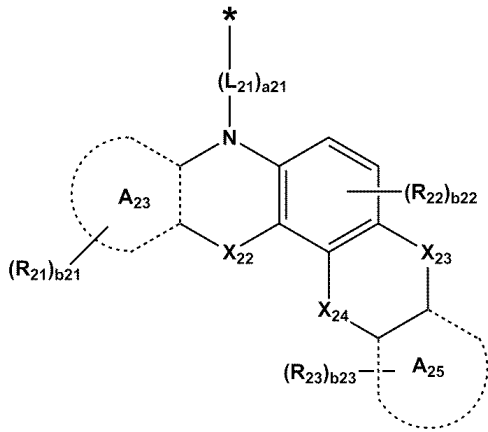
<화학식 2B-1>



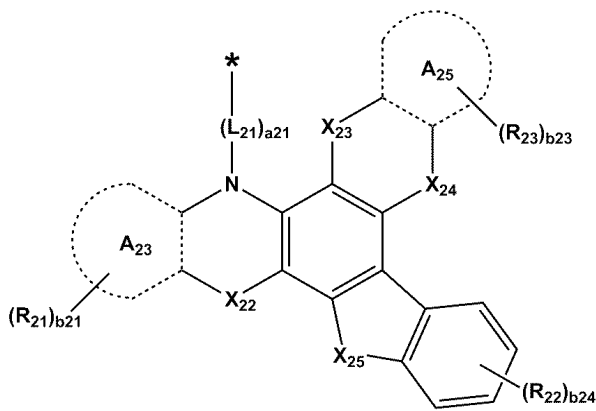
<화학식 2B-2>



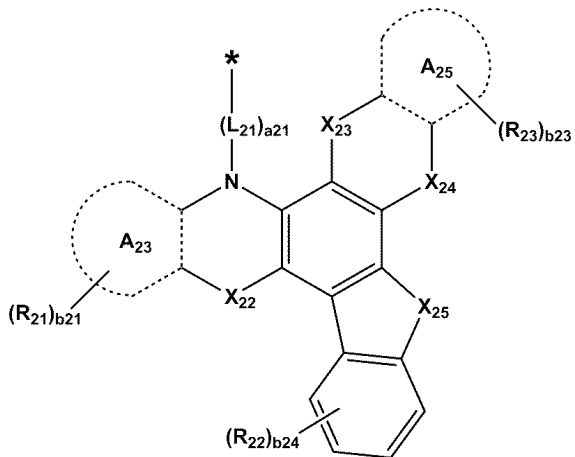
<화학식 2B-3>



<화학식 2B-4>



<화학식 2B-5>



상기 화학식 2B-1 내지 2B-5 중,

b22는 1 또는 2이고, b24는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

X25는 C(R30)(R31), Si(R30)(R31), N(R30), O 및 S 중에서 선택되고,

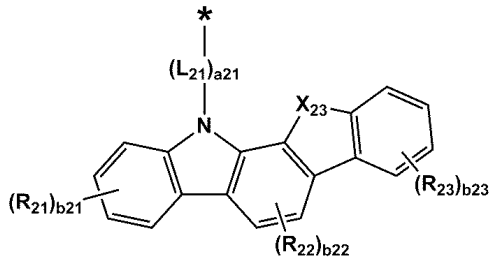
R30 및 R31의 정의는 각각 상기 화학식 1 중 R1에 대한 설명을 참조하고,

A23, A25, X22 내지 X24, L21, a21, R21 내지 R23, b21 및 b23에 대한 정의는 각각 화학식 2B에서 정의한 바와 동일하다.

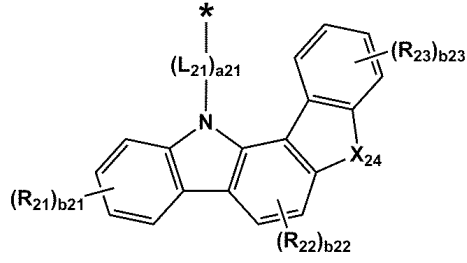
청구항 18

제8항에 있어서,

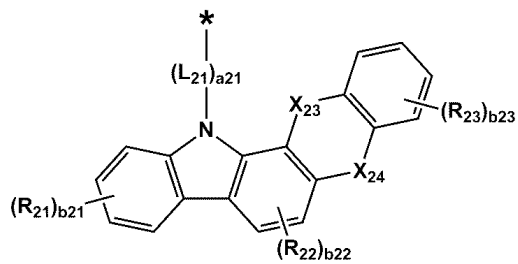
상기 화학식 2B로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2B-1(1) 내지 2B-5(2) 중 어느 하나로 표시되는, 축합환 화합물:



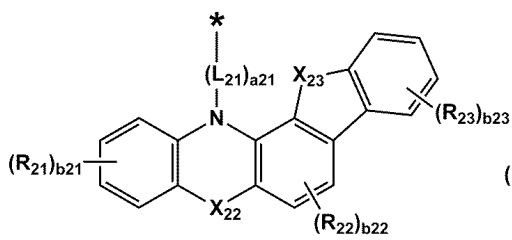
2B-1(1)



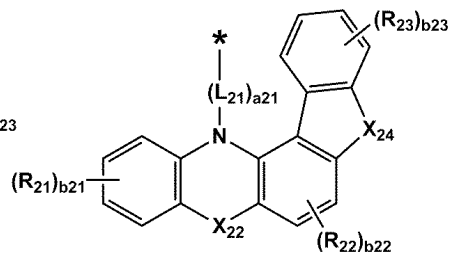
2B-1(2)



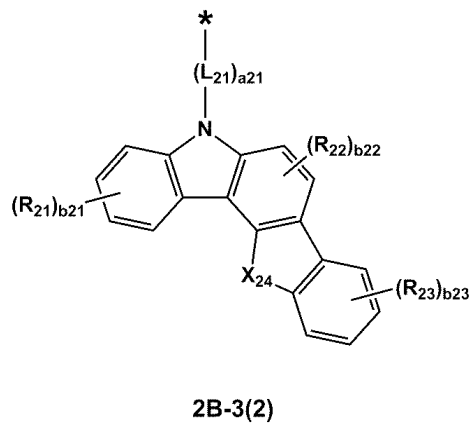
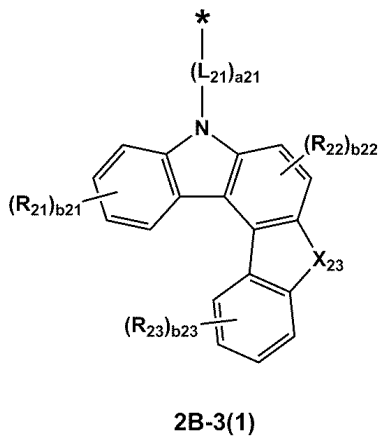
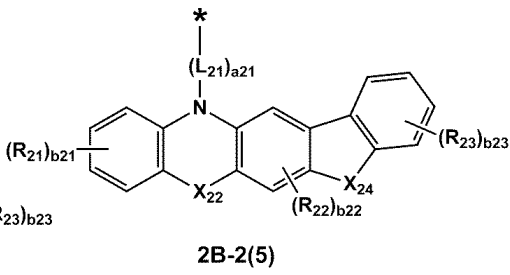
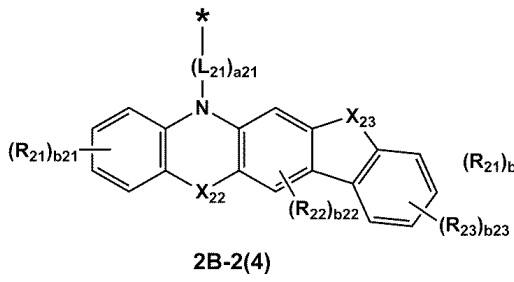
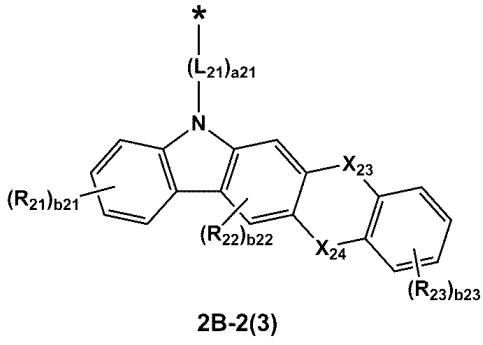
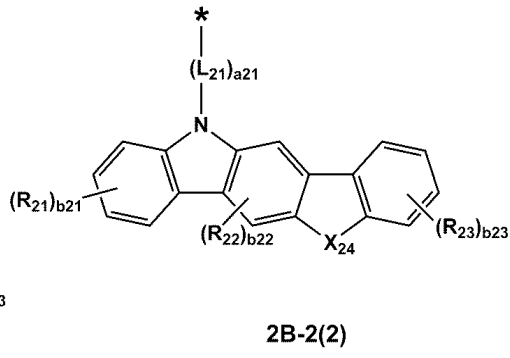
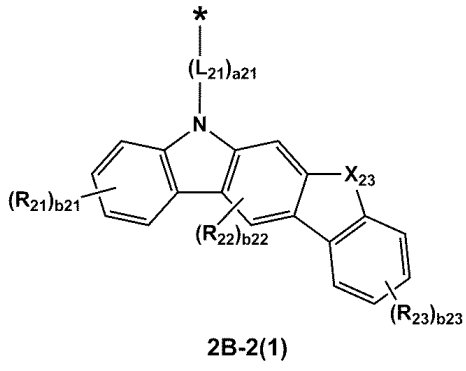
2B-1(3)

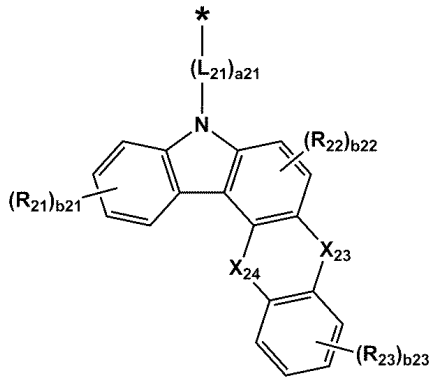


2B-1(4)

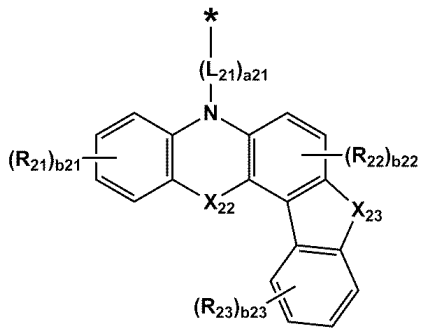


2B-1(5)

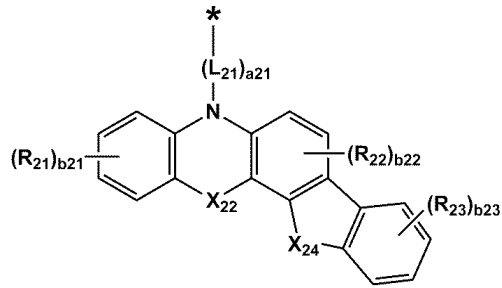




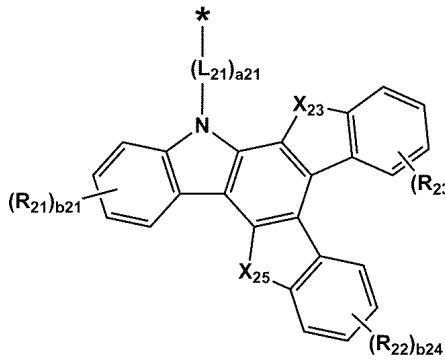
2B-3(3)



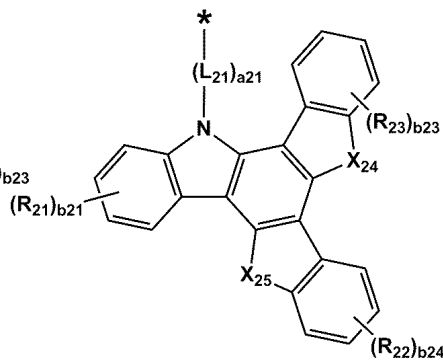
2B-3(4)



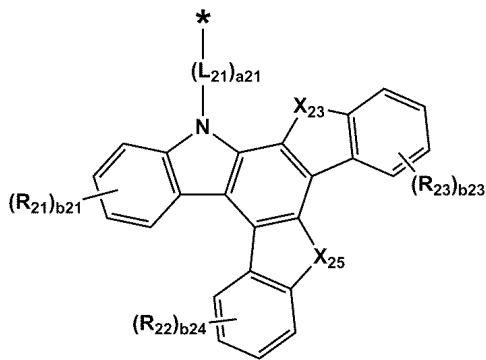
2B-3(5)



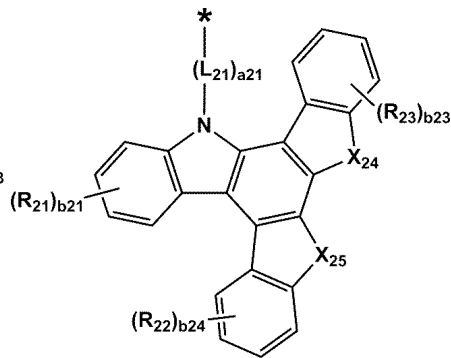
2B-4(1)



2B-4(2)



2B-5(1)



2B-5(2)

상기 화학식 2B-1(1) 내지 2B-5(2) 중,

X₂₂는 C(R₂₄)(R₂₅), Si(R₂₄)(R₂₅), N(R₂₄), O 및 S 중에서 선택되고,

X₂₃는 C(R₂₆)(R₂₇), Si(R₂₆)(R₂₇), N(R₂₆), O 및 S 중에서 선택되고,

X₂₄는 C(R₂₈)(R₂₉), Si(R₂₈)(R₂₉), N(R₂₈), O 및 S 중에서 선택되고,

X₂₅는 C(R₃₀)(R₃₁), Si(R₃₀)(R₃₁), N(R₃₀), O 및 S 중에서 선택되고,

R₃₀ 내지 R₃₁의 정의는 각각 상기 화학식 1 중 R₁에 대한 설명을 참조하고,

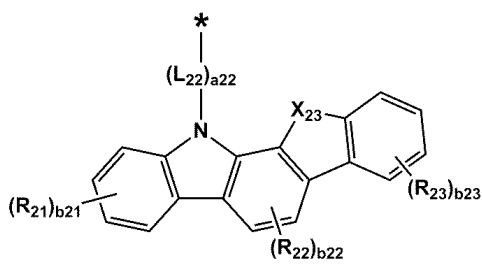
b₂₁, b₂₃ 및 b₂₄는 서로 독립적으로, 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, b₂₂는 1 또는 2이고,

L₂₁, a₂₁ 및 R₂₁ 내지 R₂₉에 대한 정의는 화학식 2B에서 정의한 바와 동일하다.

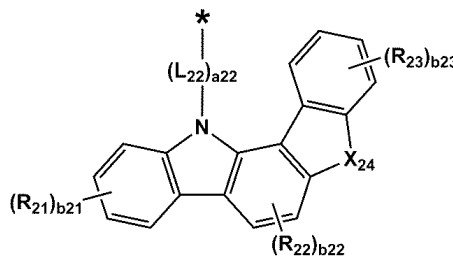
청구항 19

제8항에 있어서,

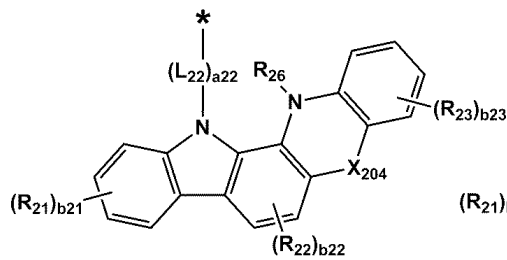
상기 화학식 2B로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2B-1-a 내지 2B-5-b 중 어느 하나로 표시되는, 축합환 화합물:



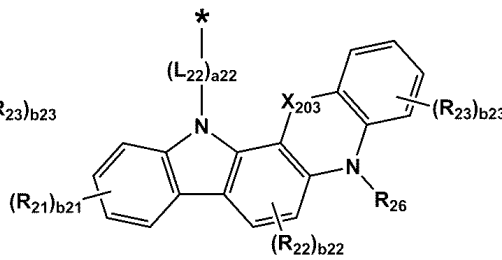
2B-1-a



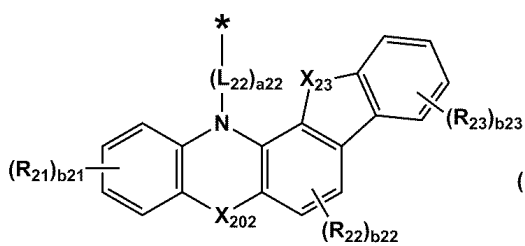
2B-1-b



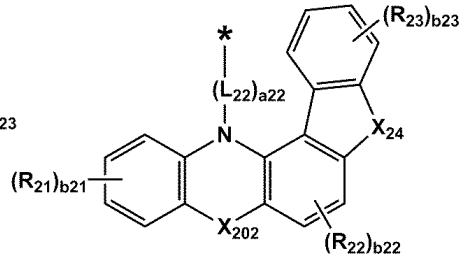
2B-1-c



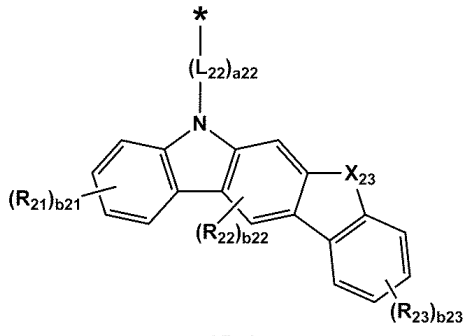
2B-1-d



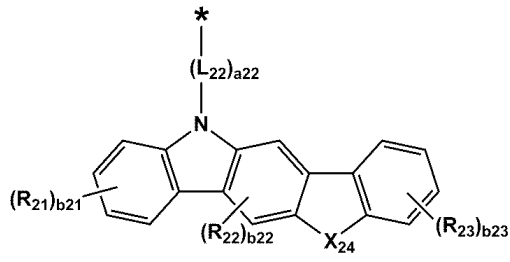
2B-1-e



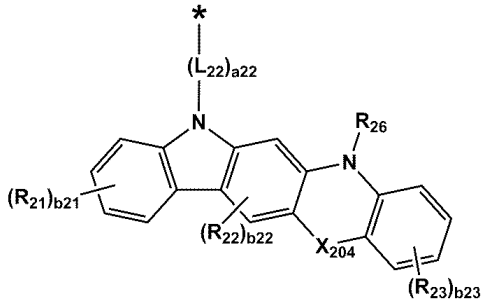
2B-1-f



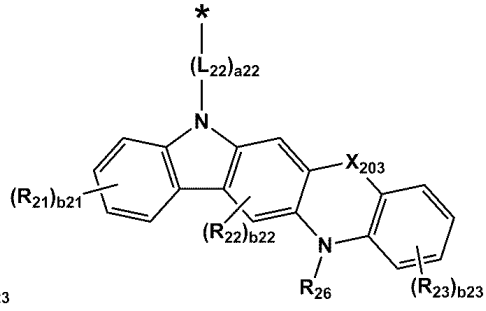
2B-2-a



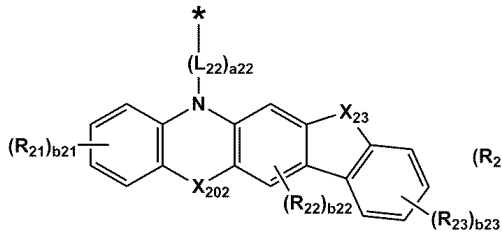
2B-2-b



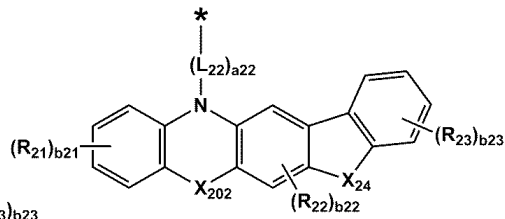
2B-2-c



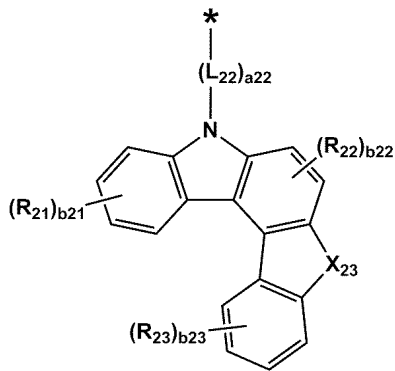
2B-2-d



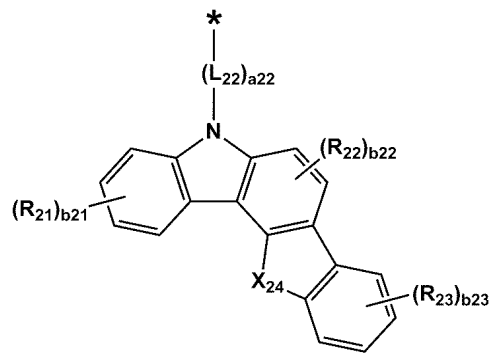
2B-2-e



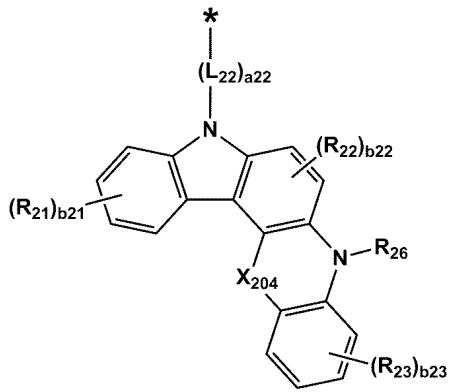
2B-2-f



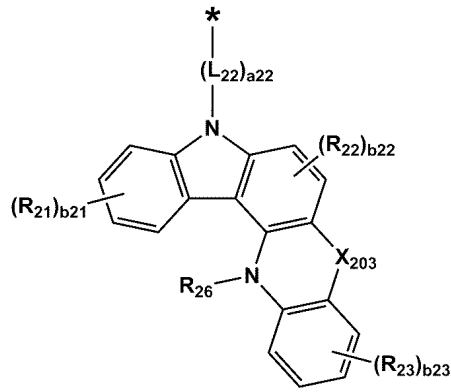
2B-3-a



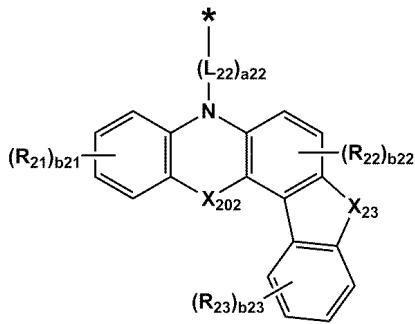
2B-3-b



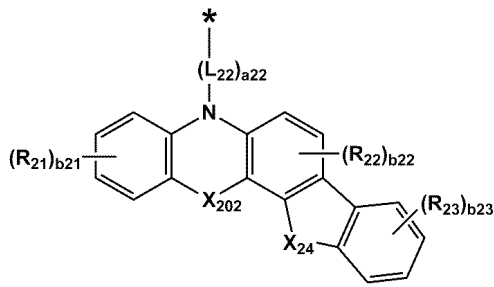
2B-3-c



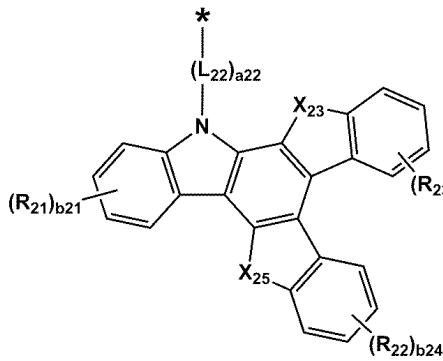
2B-3-d



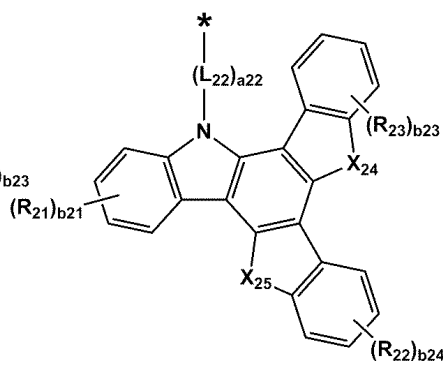
2B-3-e



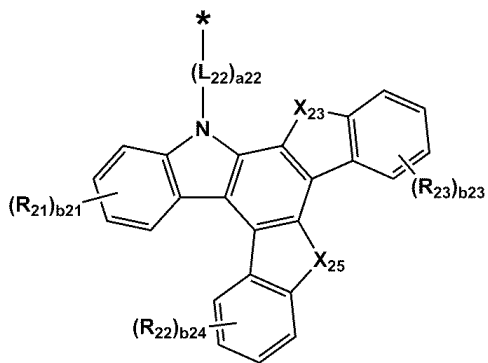
2B-3-f



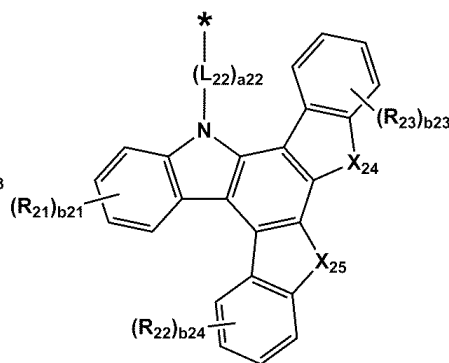
2B-4-a



2B-4-b



2B-5-a



2B-5-b

상기 화학식 2B-1-a 내지 2B-5-b 중,

X₂₃는 C(R₂₆)(R₂₇), Si(R₂₆)(R₂₇), N(R₂₆), O 및 S 중에서 선택되고,

X_{24} 는 $C(R_{28})(R_{29})$, $Si(R_{28})(R_{29})$, $N(R_{28})$, O 및 S 중에서 선택되고,

X_{25} 는 $C(R_{30})(R_{31})$, $Si(R_{30})(R_{31})$, $N(R_{30})$, O 및 S 중에서 선택되고,

X_{202} 내지 X_{204} 는 서로 독립적으로, $C(R_{32})(R_{33})$ 및 $Si(R_{32})(R_{33})$ 중에서 선택되고,

R_{30} 내지 R_{33} 의 정의는 각각 상기 화학식 1 중 R_1 에 대한 설명을 참조하고,

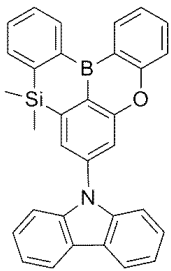
b21, b23 및 b24는 서로 독립적으로, 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, b22는 1 또는 2이고,

L_{21} , a21 및 R_{21} 내지 R_{29} 에 대한 정의는 각각 화학식 2B에서 정의한 바와 동일하다.

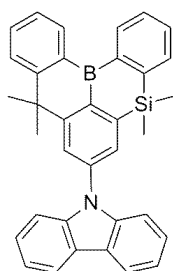
청구항 20

제8항에 있어서,

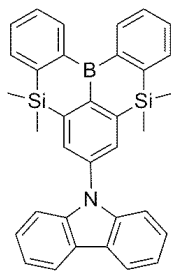
하기 화합물 1 내지 23 중에서 선택된, 축합환 화합물:



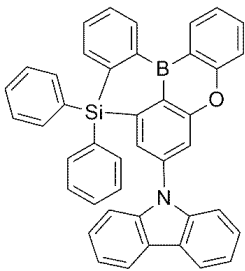
1



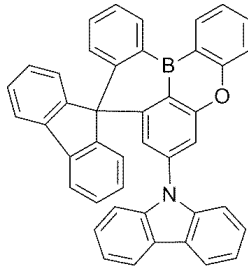
2



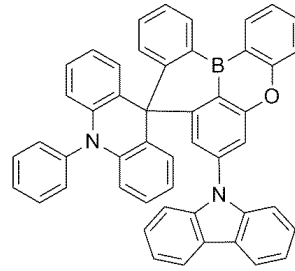
3



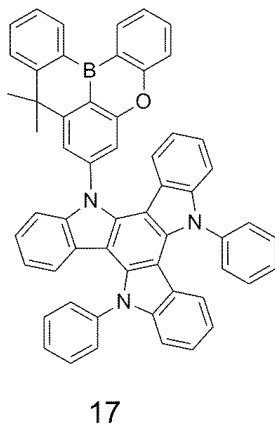
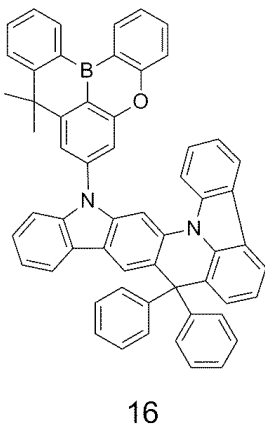
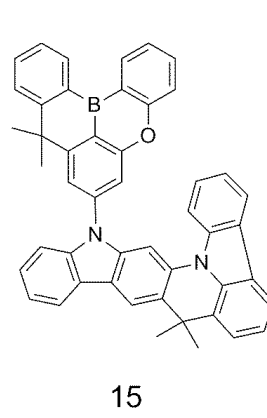
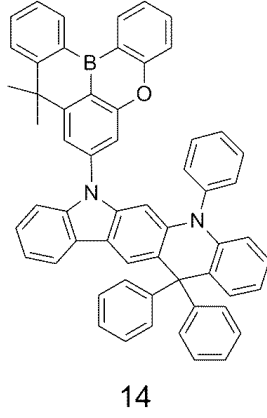
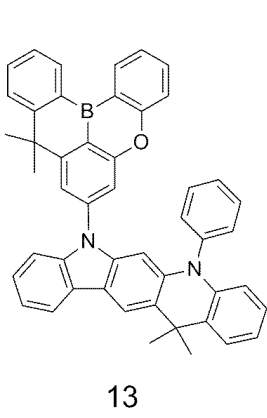
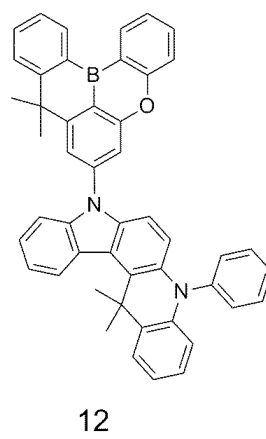
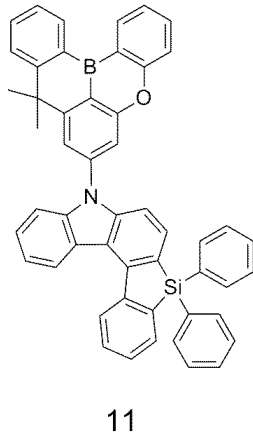
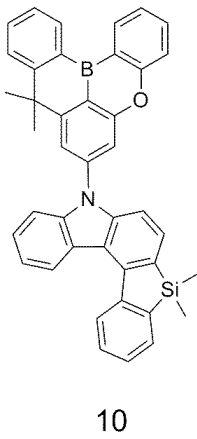
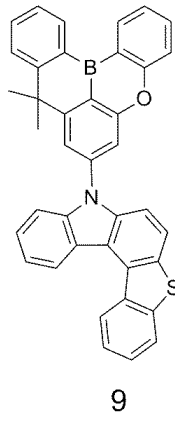
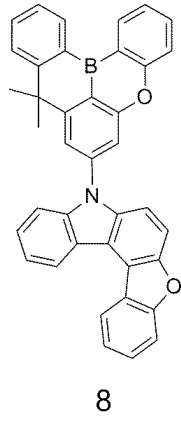
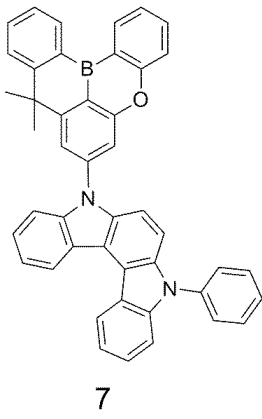
4

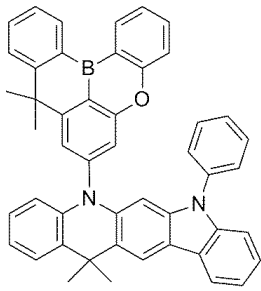


5

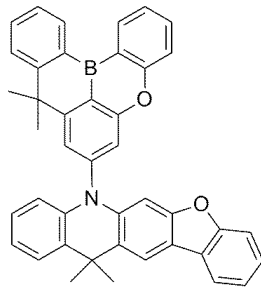


6

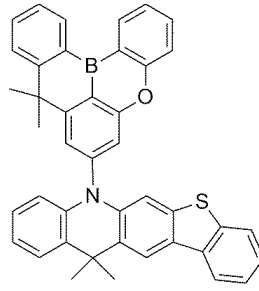




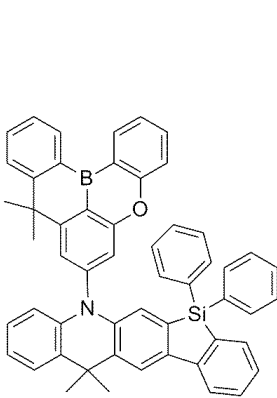
18



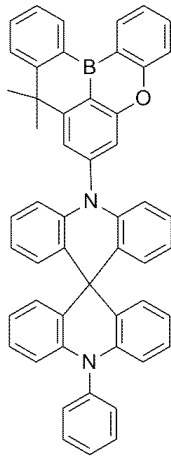
19



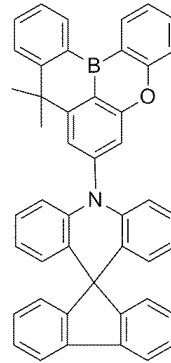
20



21



22



23

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

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

[0003] 상기 유기 발광 소자는 기관 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

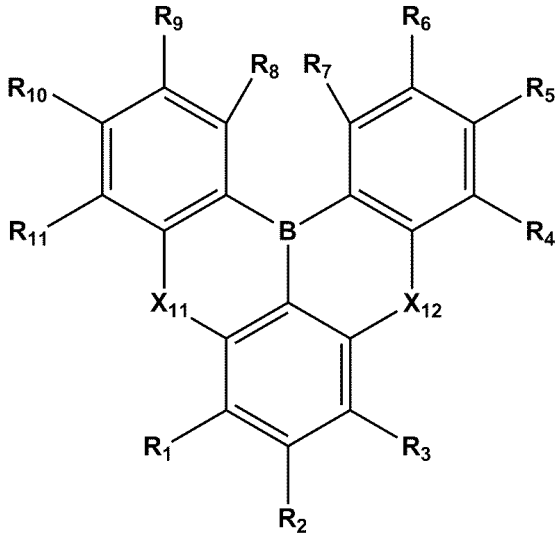
해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

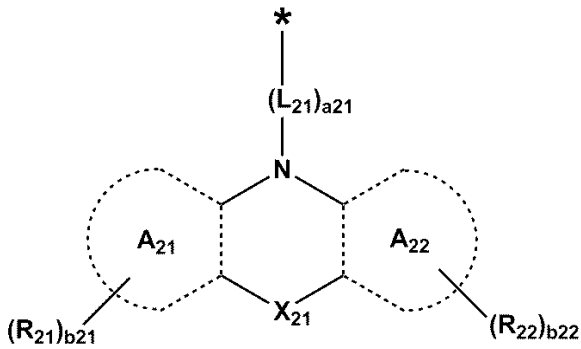
[0005] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0006] <화학식 1>



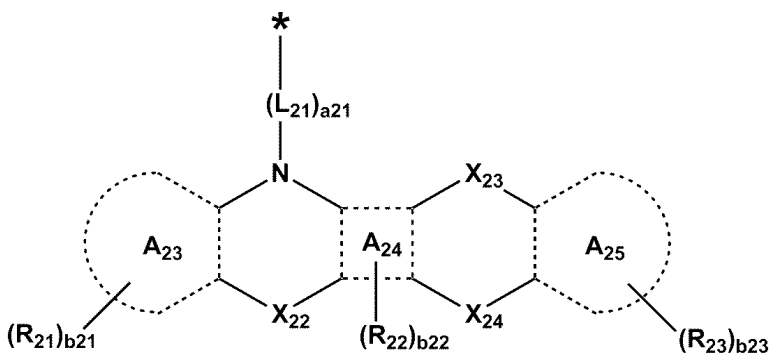
[0007]

[0008] <화학식 2A>



[0009]

[0010] <화학식 2B>



[0011]

[0012] 상기 화학식 1, 화학식 2A 및 화학식 2B 중,

[0013] X_{11} 은 C(R_{12})(R_{13}), Si(R_{12})(R_{13}), O 및 S 중에서 선택되고, X_{12} 는 C(R_{14})(R_{15}), Si(R_{14})(R_{15}), O 및 S 중에서 선택되
 되,

[0014] X_{11} 가 O 또는 S인 경우 X_{12} 는 C(R_{14})(R_{15}) 및 Si(R_{14})(R_{15}) 중에서 선택되고,

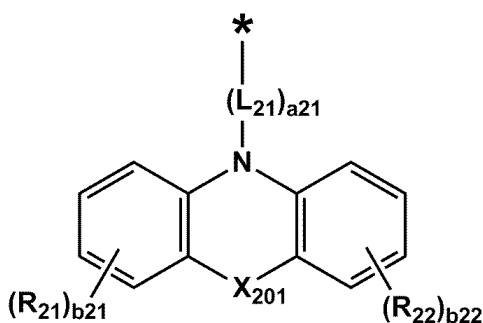
[0015] X_{12} 가 O 또는 S인 경우 X_{11} 은 C(R_{12})(R_{13}) 및 Si(R_{12})(R_{13}) 중에서 선택되고,

[0016] X_{21} 및 X_{22} 는 서로 독립적으로, 단일결합, C(R_{24})(R_{25}), Si(R_{24})(R_{25}), N(R_{24}), O 및 S 중에서 선택되고,

[0017] X_{23} 는 단일결합, C(R_{26})(R_{27}), Si(R_{26})(R_{27}), N(R_{26}), O 및 S 중에서 선택되고, X_{24} 는 단일결합, C(R_{28})(R_{29}),

Si(R₂₈)(R₂₉), N(R₂₈), O 및 S 중에서 선택되며, X₂₃ 및 X₂₄이 모두 단일결합인 경우는 제외하고,

- [0018] A₂₁ 내지 A₂₅는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,
- [0019] L₂₁은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,
- [0020] a₂₁은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0021] R₁ 내지 R₃은 서로 독립적으로, 화학식 2A로 표시되는 그룹, 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 중에서 선택되며, R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나는 화학식 2A로 표시되는 그룹 및 화학식 2B로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,
- [0022] R₄ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₉은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 중에서 선택되고,
- [0023] R₁ 내지 R₁₅ 중 인접하는 2개의 기 및/또는 R₂₁ 내지 R₂₉ 중 인접하는 2개의 기는 선택적으로(optionally) 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,
- [0024] b₂₁ 내지 b₂₃은 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,
- [0025] 단, i) 화학식 1 중 X₁₁이 C(R₁₂)(R₁₃)이고, X₁₂가 C(R₁₄)(R₁₅), O 또는 S이고, R₁₂와 R₁₃ 및/또는 R₁₄와 R₁₅가 서로 연결되지 않는 경우, 또는 ii) X₁₁이 C(R₁₂)(R₁₃), O 또는 S이고, X₁₂가 C(R₁₄)(R₁₅)이고, R₁₂와 R₁₃ 및/또는 R₁₄와 R₁₅가 서로 연결되지 않는 경우, 상기 R₁ 내지 R₃는 하기 화학식 2A-a로 표시되는 그룹을 포함하지 않고,
- [0026] <화학식 2A-a>



[0027]

- [0028] 상기 화학식 2A-a 중, X_{201} 은 단일결합, $C(R_{24})(R_{25})$, $N(R_{24})$, O 또는 S이고, R_{24} 와 R_{25} 는 서로 연결되지 않고,
- [0029] 상기 치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0030] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기;
- [0031] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, $-B(Q_{11})(Q_{12})$, $-C(=O)(Q_{11})$, $-S(=O)_2(Q_{11})$ 및 $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기;
- [0032] C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0033] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$ 및 $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0034] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$;
- [0035] 중에서 선택되고,
- [0036] 상기 Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,
- [0037] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0038] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시된 축합환 화합물을 1종 이상 포함하는, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

- [0039] 상기 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율 및 장수명을 가질 수 있다.

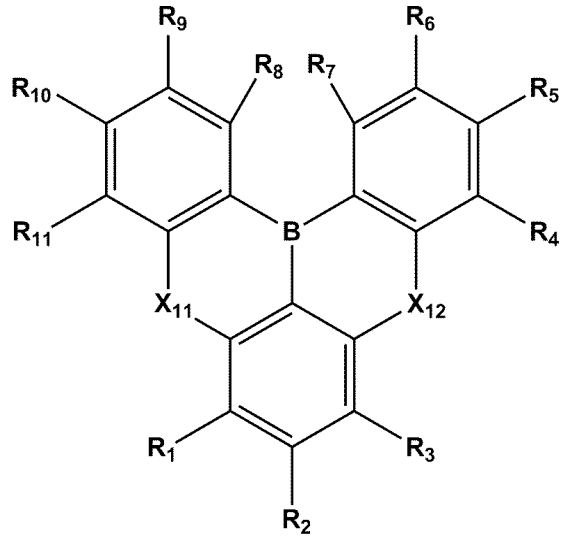
도면의 간단한 설명

[0040] 도 1 내지 도 4는 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0041] 상기 축합환 화합물은, 하기 화학식 1로 표시된다:

[0042] <화학식 1>



[0043]

[0044] 상기 화학식 1 중, X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃), Si(R₁₂)(R₁₃), O 및 S 중에서 선택되고, X₁₂는 C(R₁₄)(R₁₅), Si(R₁₄)(R₁₅), O 및 S 중에서 선택되되,

[0045] X₁₁가 O 또는 S인 경우 X₁₂는 C(R₁₄)(R₁₅) 및 Si(R₁₄)(R₁₅) 중에서 선택되고,

[0046] X₁₂가 O 또는 S인 경우 X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃) 및 Si(R₁₂)(R₁₃) 중에서 선택될 수 있다.

[0047] 일 구현예에 따르면, X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 C(R₁₄)(R₁₅)이거나;

[0048] X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 Si(R₁₄)(R₁₅)이거나;

[0049] X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 O이거나;

[0050] X₁₁은 C(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 S이거나;

[0051] X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 Si(R₁₄)(R₁₅)이거나;

[0052] X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 O이거나; 또는

[0053] X₁₁은 Si(R₁₂)(R₁₃)이고 X₁₂는 S일 수 있다.

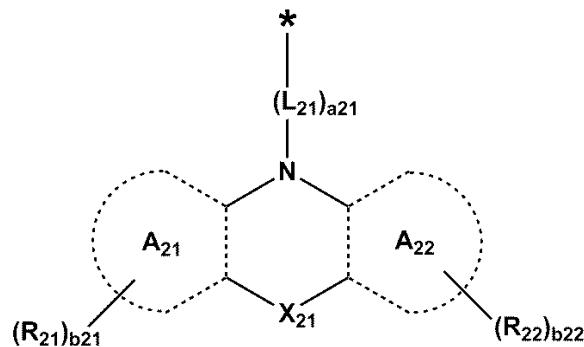
[0054] 상기 화학식 1 중 R₁ 내지 R₃은 서로 독립적으로, 화학식 2A로 표시되는 그룹, 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환

그룹, $-\text{Si}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)(\text{Q}_3)$, $-\text{N}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, $-\text{B}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_1)$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_1)$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$ 및 중에서 선택되며, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나는 화학식 2A로 표시되는 그룹 및 화학식 2B로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0055] 상기 화학식 1 중 R_4 내지 R_{15} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-\text{Si}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)(\text{Q}_3)$, $-\text{N}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, $-\text{B}(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_1)$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_1)$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_1)(\text{Q}_2)$ 및 중에서 선택되고,

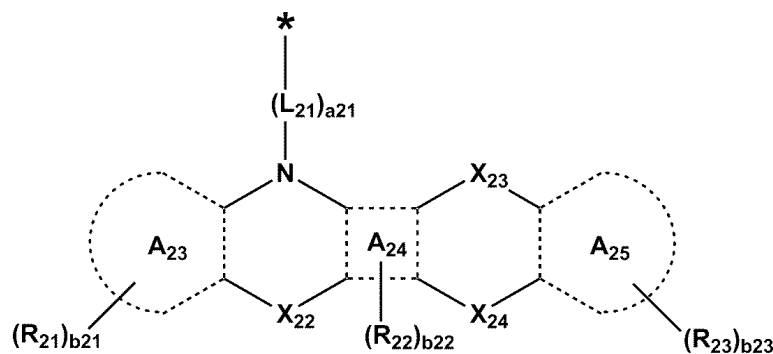
[0056] R_1 내지 R_{15} 중 인접하는 2개의 기는 선택적으로(optionally) 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0057] <화학식 2A>



[0058]

[0059] <화학식 2B>



[0060]

[0061] 상기 화학식 2A 및 화학식 2B 중, X_{21} 및 X_{22} 는 서로 독립적으로, 단일결합, $\text{C}(\text{R}_{24})(\text{R}_{25})$, $\text{Si}(\text{R}_{24})(\text{R}_{25})$, $\text{N}(\text{R}_{24})$, O 및 S 중에서 선택될 수 있다.

[0062] 상기 화학식 2B 중, X_{23} 는 단일결합, $\text{C}(\text{R}_{26})(\text{R}_{27})$, $\text{Si}(\text{R}_{26})(\text{R}_{27})$, $\text{N}(\text{R}_{26})$, O 및 S 중에서 선택되고, X_{24} 는 단일결합, $\text{C}(\text{R}_{28})(\text{R}_{29})$, $\text{Si}(\text{R}_{28})(\text{R}_{29})$, $\text{N}(\text{R}_{28})$, O 및 S 중에서 선택될 수 있다. 단, X_{23} 및 X_{24} 이 모두 단일결합인 경우는 제외된다.

[0063] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 중 X_{21} 은 단일결합, $\text{C}(\text{R}_{24})(\text{R}_{25})$ 및 $\text{Si}(\text{R}_{24})(\text{R}_{25})$ 중에서 선택될 수 있다.

[0064] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중 X_{22} 는 단일결합, $\text{C}(\text{R}_{24})(\text{R}_{25})$ 및 $\text{Si}(\text{R}_{24})(\text{R}_{25})$ 중에서 선택되고, X_{23} 는 단

일결합, C(R₂₆)(R₂₇), Si(R₂₆)(R₂₇), N(R₂₆), O 및 S 중에서 선택되고, X₂₄는 단일결합, C(R₂₈)(R₂₉), Si(R₂₈)(R₂₉), N(R₂₈) 중에서 선택될 수 있다. 단, X₂₃ 및 X₂₄이 모두 단일결합인 경우는 제외된다.

- [0065] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중 X₂₂는 단일결합, C(R₂₄)(R₂₅) 및 Si(R₂₄)(R₂₅) 중에서 선택되고, X₂₃는 단일결합, Si(R₂₆)(R₂₇), N(R₂₆), O 및 S 중에서 선택되고, X₂₄는 단일결합, C(R₂₈)(R₂₉), N(R₂₈) 중에서 선택될 수 있다. 단, X₂₃ 및 X₂₄이 모두 단일결합인 경우는 제외된다.
- [0066] 상기 화학식 2A 및 2B 중, A₂₁ 내지 A₂₅는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0067] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 중, A₂₁ 및 A₂₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 2,6-나프티리딘 그룹, 1,8-나프티리딘 그룹, 1,5-나프티리딘 그룹, 1,6-나프티리딘 그룹, 1,7-나프티리딘 그룹, 2,7-나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹 및 페난트롤린 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0068] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 중, A₂₁ 및 A₂₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹 및 페난트롤린 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0069] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 중, A₂₁ 및 A₂₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹 및 피리미딘 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0070] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중, A₂₃ 내지 A₂₅는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 2,6-나프티리딘 그룹, 1,8-나프티리딘 그룹, 1,5-나프티리딘 그룹, 1,6-나프티리딘 그룹, 1,7-나프티리딘 그룹, 2,7-나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 인덴 그룹, 인돌 그룹, 퓨로피리딘 그룹, 티에노피리딘 그룹, 시클로헥타피리딘 그룹, 피롤로피리딘 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 플루오렌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디나프토피란 그룹, 디나프토티오펜 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 디벤조카바졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 나프토피란, 나프토티오펜, 스파이로-바이플루오렌 그룹 및 스파이로-플루오렌-인덴 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0071] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중, A₂₃ 내지 A₂₅는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 플루오렌 그룹 및 카바졸 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0072] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중, A₂₃ 내지 A₂₅는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 플루오렌 그룹 및 카바졸 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0073] 상기 화학식 2A 및 2B 중, L₂₁은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0074] 일 구현예에 따르면, L₂₁은 단일결합, 벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타페닐렌 그룹, 헥사센 그룹, 피롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 인다졸 그룹, 퓨린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹,

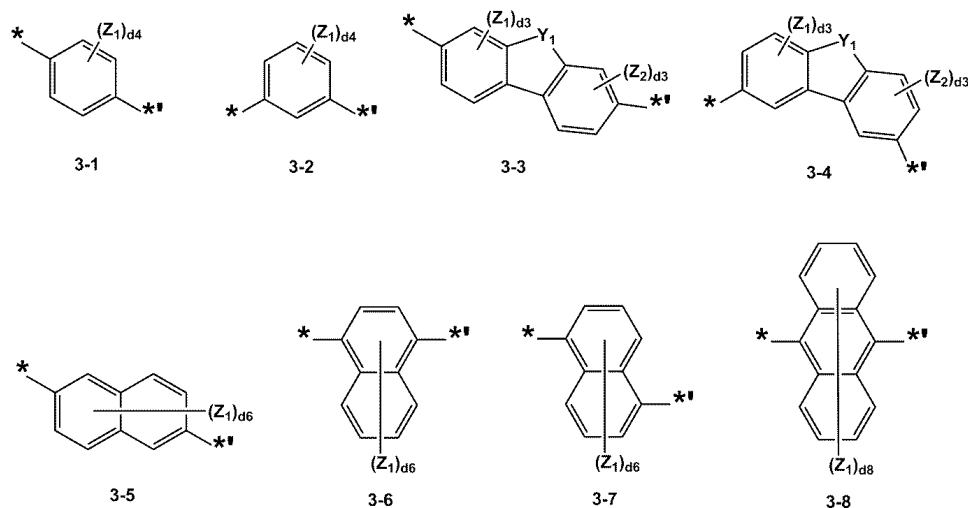
퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 카바졸 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조카바졸 그룹 및 디벤조카바졸 그룹; 및

[0075] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기, C₁-C₂₀헤테로아릴기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁) 및 -S(=O)₂(Q₃₁) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타페닐렌 그룹, 헥사센 그룹, 피롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 인다졸 그룹, 퓨린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 카바졸 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조카바졸 그룹 및 디벤조카바졸 그룹;

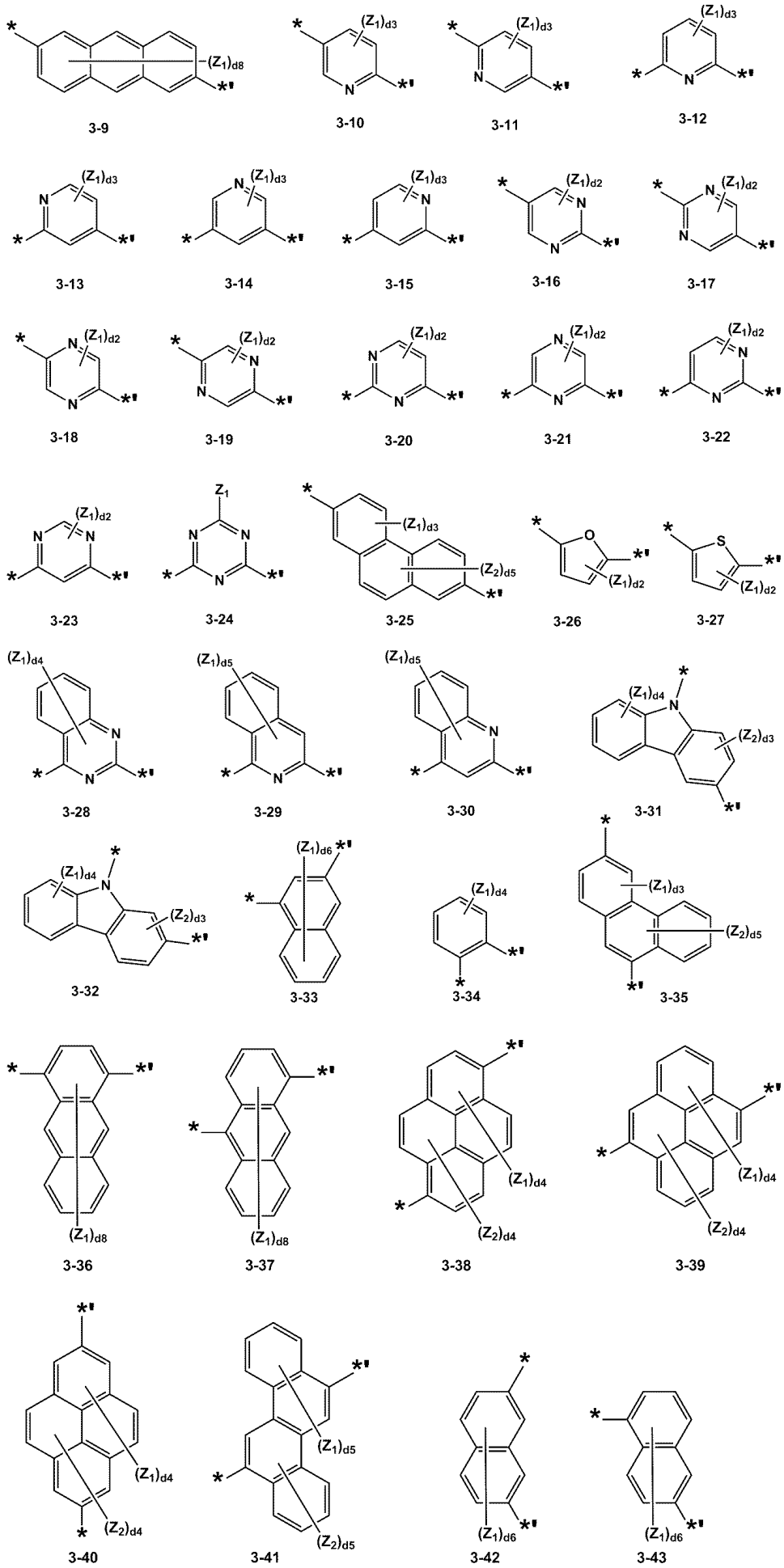
[0076] 중에서 선택되고,

[0077] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알킬닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0078] 다른 구현예에 따르면, 상기 L₂₁은 단일결합 및 하기 화학식 3-1 내지 3-46으로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



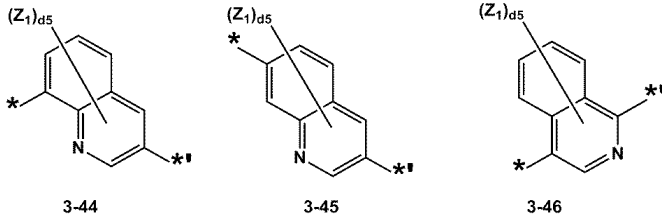
[0079]



[0080]

[0081]

[0082]



- [0083]
- [0084] 상기 화학식 3-1 내지 3-46 중,
- [0085] Y₁은 O, S, C(Z₃)(Z₄), N(Z₅) 또는 Si(Z₆)(Z₇)이고,
- [0086] Z₁ 내지 Z₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 스파이로-플루오렌-벤조플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -B(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택되고,
- [0087] d₂는 1 내지 2의 정수 중에서 선택되고,
- [0088] d₃는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
- [0089] d₄는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,
- [0090] d₅는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0091] d₆는 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고,
- [0092] d₈는 1 내지 8의 정수 중에서 선택되고,
- [0093] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0094] 상기 화학식 2A 및 2B 중, a₂₁은 1 내지 5의 정수 중에서 선택될 수 있다. a₂₁이 2 이상인 경우, 2 이상의 L₂₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0095] 상기 화학식 2A 및 2B 중, R₂₁ 내지 R₂₉은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 중에서 선택되고,
- [0096] R₂₁ 내지 R₂₉ 중 인접하는 2개의 기는 선택적으로(optionally) 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.
- [0097] 일 구현예에 따르면, R₁ 내지 R₃은 서로 독립적으로, 화학식 2A로 표시되는 그룹, 화학식 2B로 표시되는 그룹,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 -N(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

[0098] R₄ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 -N(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

[0099] Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

[0100] R₁₂와 R₁₃, R₁₄와 R₁₅, R₂₄와 R₂₅, R₂₆와 R₂₇, 및/또는 R₂₈과 R₂₉는 선택적으로 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0101] 다른 구현예에 따르면, R₁ 내지 R₃은 서로 독립적으로, 화학식 2A로 표시되는 그룹, 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 퓨리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤즈이미다졸일기, 퓨라닐기, 벤조퓨라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이속사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 벤조옥사졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기;

[0102] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기, C₁-C₂₀헤테로아릴기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 퓨리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤즈이미다졸일기, 퓨라닐기, 벤조퓨라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이속사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 벤조옥사졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기; 및

[0103] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

[0104] R₄ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 퓨리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프

티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤즈이미다졸일기, 퓨라닐기, 벤조퓨라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이속사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 벤조옥사졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기;

[0105] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기, C₁-C₂₀헤테로아릴기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 핵사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 퓨리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤즈이미다졸일기, 퓨라닐기, 벤조퓨라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이속사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 벤조옥사졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기; 및

[0106] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

[0107] Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₆₀알킬기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

[0108] R₁₂와 R₁₃, R₁₄와 R₁₅, R₂₄와 R₂₅, R₂₆와 R₂₇, 및/또는 R₂₈과 R₂₉는 선택적으로 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0109] 또 다른 구현예에 따르면, R₁ 내지 R₃은 서로 독립적으로, 화학식 2A로 표시되는 그룹, 화학식 2B로 표시되는 그룹, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 -N(Q₁)(Q₂); 및

[0110] 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 및 피리디닐기 중 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기; 중에서 선택되고,

[0111] R₄ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 -N(Q₁)(Q₂); 및

[0112] 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 및 피리디닐기 중 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기; 중에서 선택되고,

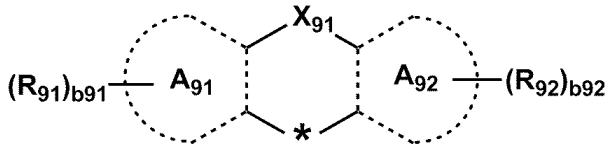
[0113] Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기 및 페닐기 중에서 선택되고,

[0114] R₁₂와 R₁₃, R₁₄와 R₁₅, R₂₄와 R₂₅, R₂₆와 R₂₇, 및/또는 R₂₈과 R₂₉는 선택적으로 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0115] 일 구현예에 따르면, R₁₂와 R₁₃, R₁₄와 R₁₅, R₂₄와 R₂₅, R₂₆와 R₂₇, 및/또는 R₂₈과 R₂₉가 서로 연결되어 하기 화학식

9-1로 표시되는 기를 형성할 수 있다:

[0116] <화학식 9-1>



[0117] 상기 화학식 9-1 중,

[0118] X_{91} 은 단일 결합, O, S, Se, $C(R_{93})(R_{94})$, $Si(R_{93})(R_{94})$ 및 $Ge(R_{93})(R_{94})$ 중에서 선택되고,

[0119] A_{91} 및 A_{92} 는 서로 독립적으로, C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 및 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0120] R_{91} 및 R_{92} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$ 및 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되고,

[0121] Q_1 내지 Q_3 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고;

[0122] b_{91} 및 b_{92} 는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0123] *는 상기 화학식 1, 화학식 2A 및 화학식 2B 중의 탄소 원자이다.

[0124] 상기 화학식 2A 및 화학식 2B 중, b_{21} 내지 b_{23} 는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있다. b_{21} 이 2 이상인 경우 2 이상의 R_{21} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. b_{22} 가 2 이상인 경우 2 이상의 R_{22} 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. b_{23} 가 2 이상인 경우 2 이상의 R_{23} 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0125] 일 구현예에 따르면, i) X_{11} 은 $Si(R_{12})(R_{13})$ 이고 X_{12} 는 $Si(R_{14})(R_{15})$ 이고, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나가 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이거나;

[0126] ii) X_{11} 은 $C(R_{12})(R_{13})$, $Si(R_{12})(R_{13})$, O 및 S 중에서 선택되고, X_{12} 는 $C(R_{14})(R_{15})$, O 및 S 중에서 선택되고, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나가 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이거나;

[0127] iii) X_{11} 은 $C(R_{12})(R_{13})$, O 및 S 중에서 선택되고, X_{12} 는 $C(R_{14})(R_{15})$, $Si(R_{14})(R_{15})$, O 및 S 중에서 선택되고, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나가 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹이거나;

[0128] iv) X_{11} 은 $Si(R_{12})(R_{13})$ 이고 X_{12} 는 $Si(R_{14})(R_{15})$ 이고, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이거나;

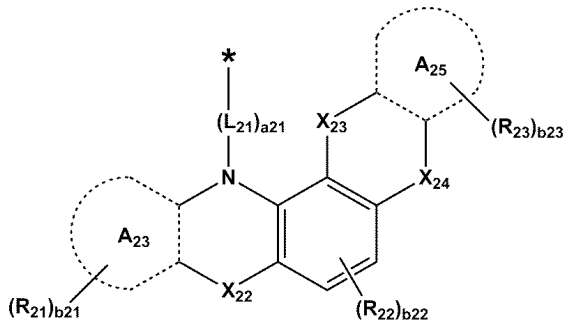
[0129] v) X_{11} 은 $Si(R_{12})(R_{13})$ 이고, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이거나; 또는

[0131] vi) X_{12} 은 $Si(R_{14})(R_{15})$ 이고, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이거나; 또는

[0132] vii) X_{11} 은 $C(R_{12})(R_{13})$, O 및 S 중에서 선택되고, X_{12} 는 $C(R_{14})(R_{15})$, O 및 S 중에서 선택되고, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나가 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹이고, R_{24} 와 R_{25} 가 서로 연결되어 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

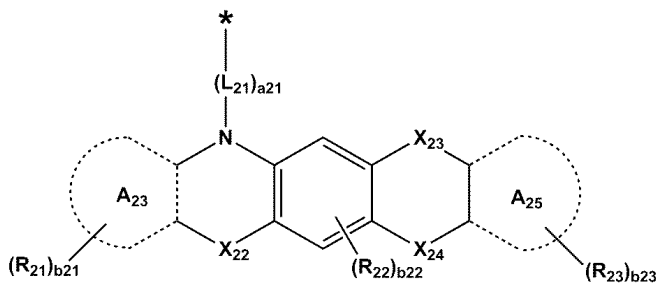
[0133] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2B-1 내지 2B-5 중 어느 하나로 표시될 수 있다:

[0134] <화학식 2B-1>



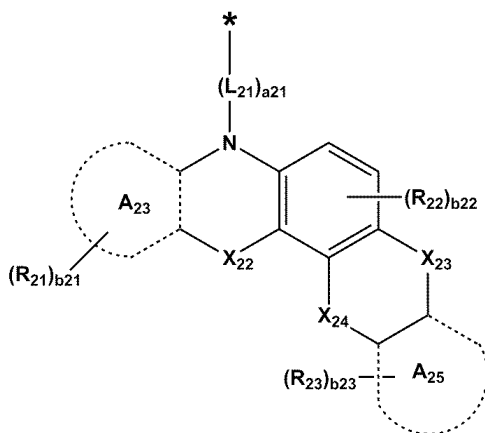
[0135]

[0136] <화학식 2B-2>



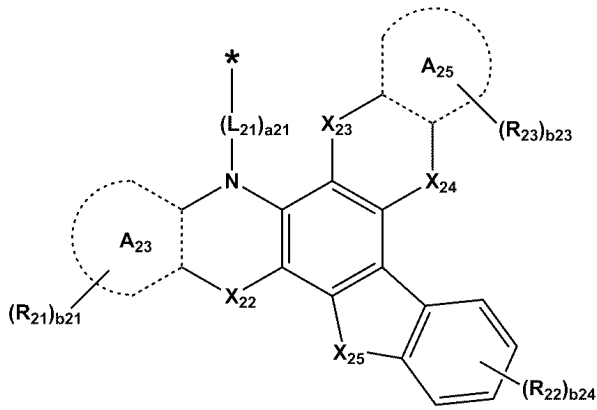
[0137]

[0138] <화학식 2B-3>



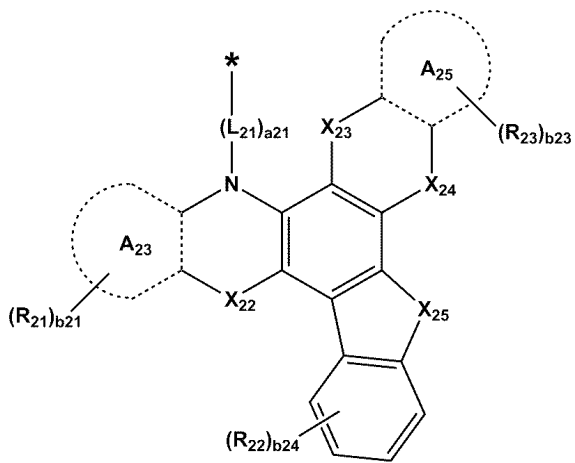
[0139]

[0140] <화학식 2B-4>



[0141]

[0142] <화학식 2B-5>



[0143]

[0144] 상기 화학식 2B-1 내지 2B-5 중,

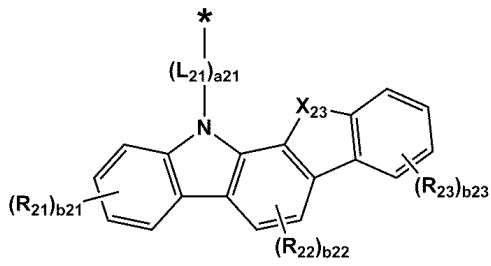
[0145] b22는 1 또는 2이고, b24는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0146] X25는 C(R30)(R31), Si(R30)(R31), N(R30), O 및 S 중에서 선택되고,

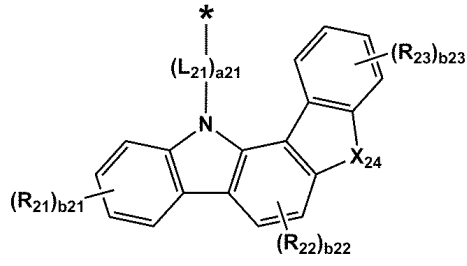
[0147] R30 및 R31의 정의는 각각 상기 화학식 1 중 R1에 대한 설명을 참조하고,

[0148] A23, A25, X22 내지 X24, L21, a21, R21 내지 R23, b21 및 b23에 대한 정의는 각각 화학식 2B에서 정의한 바와 동일하다.

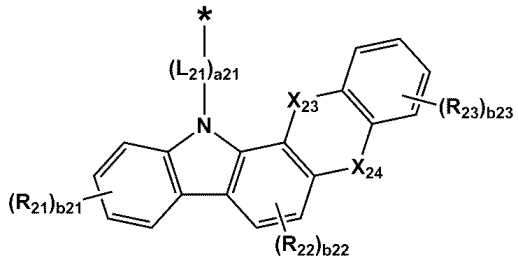
[0149] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2B-1(1) 내지 2B-5(2) 중 어느 하나로 표시될 수 있다:



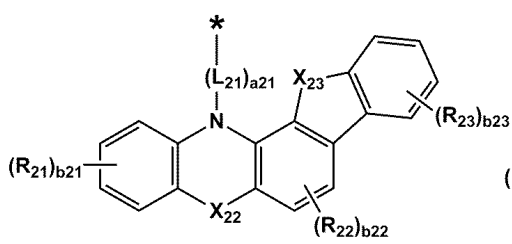
2B-1(1)



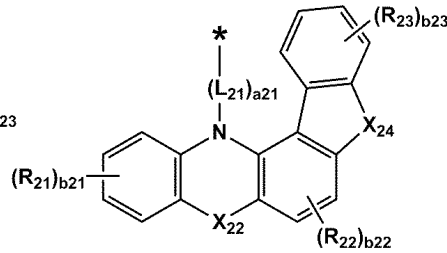
2B-1(2)



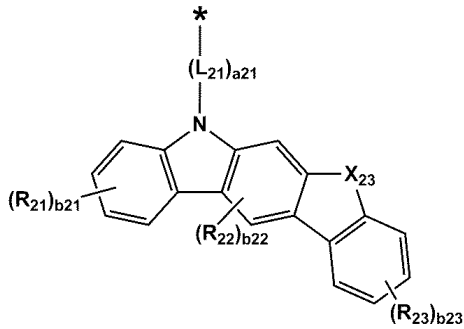
2B-1(3)



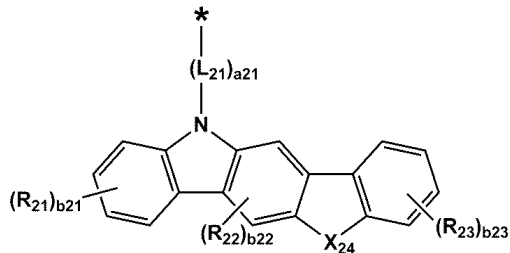
2B-1(4)



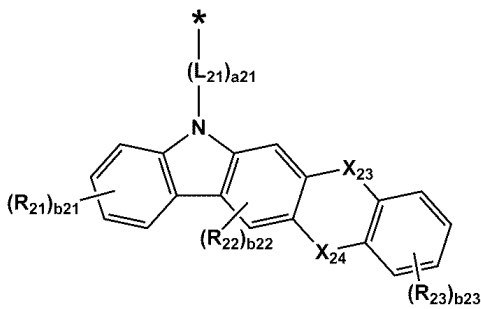
2B-1(5)



2B-2(1)



2B-2(2)

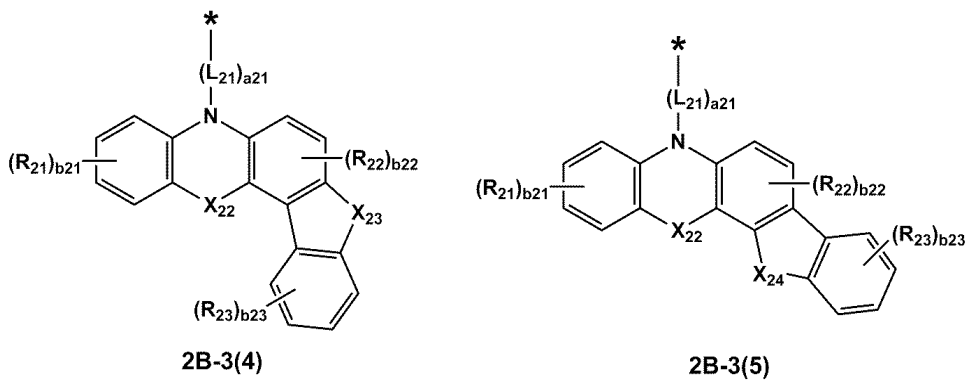
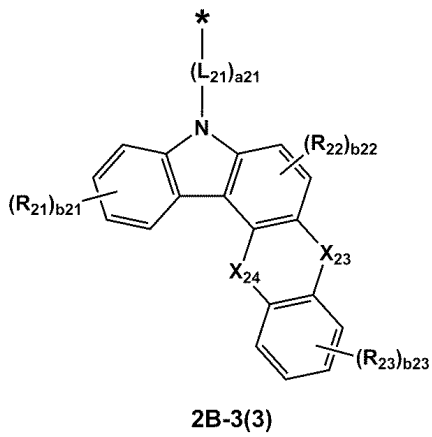
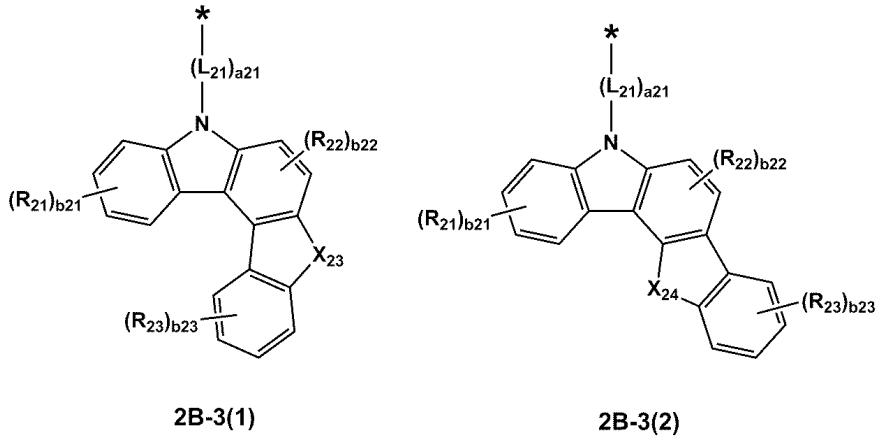
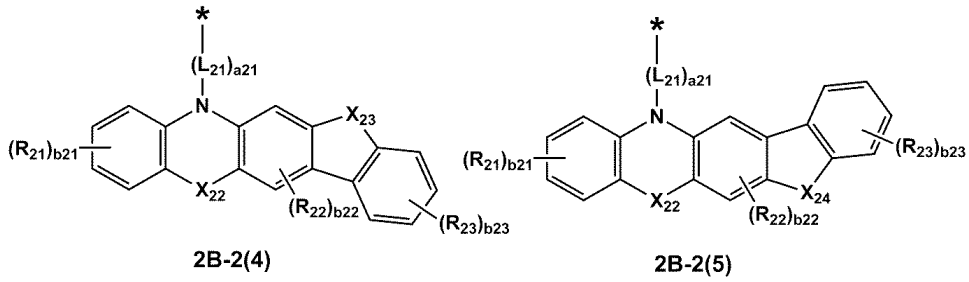


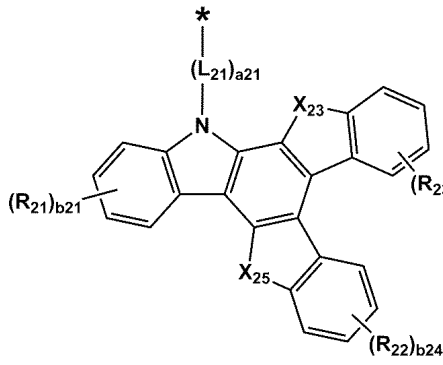
2B-2(3)

[0150]

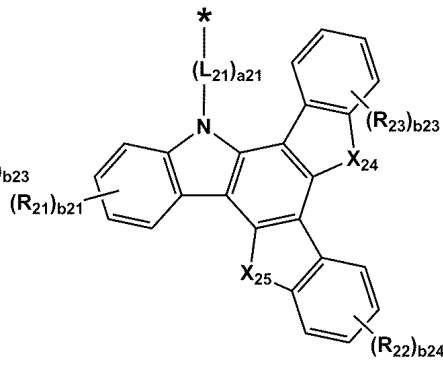
[0151]

[0152]



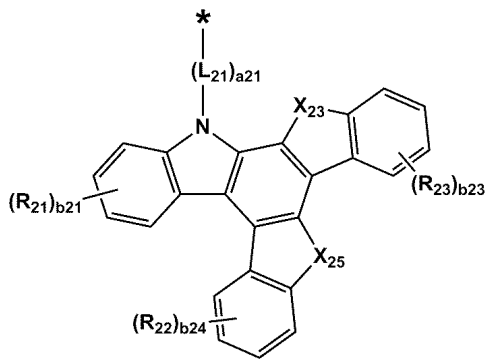


2B-4(1)

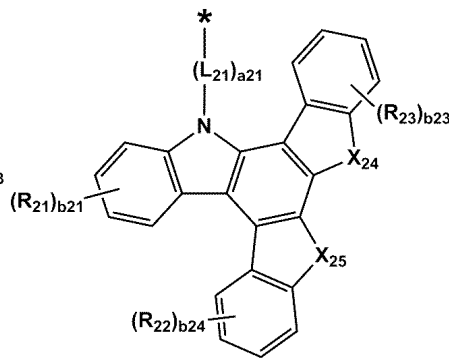


2B-4(2)

[0157]



2B-5(1)



2B-5(2)

[0158]

[0159]

상기 화학식 2B-1(1) 내지 2B-5(2) 중,

[0160]

X₂₂는 C(R₂₄)(R₂₅), Si(R₂₄)(R₂₅), N(R₂₄), O 및 S 중에서 선택되고,

[0161]

X₂₃는 C(R₂₆)(R₂₇), Si(R₂₆)(R₂₇), N(R₂₆), O 및 S 중에서 선택되고,

[0162]

X₂₄는 C(R₂₈)(R₂₉), Si(R₂₈)(R₂₉), N(R₂₈), O 및 S 중에서 선택되고,

[0163]

X₂₅는 C(R₃₀)(R₃₁), Si(R₃₀)(R₃₁), N(R₃₀), O 및 S 중에서 선택되고,

[0164]

R₃₀ 내지 R₃₁의 정의는 각각 상기 화학식 1 중 R₁에 대한 설명을 참조하고,

[0165]

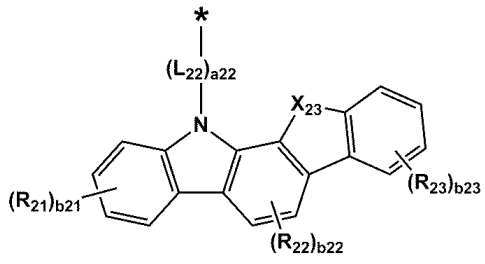
b₂₁, b₂₃ 및 b₂₄는 서로 독립적으로, 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, b₂₂는 1 또는 2이고,

[0166]

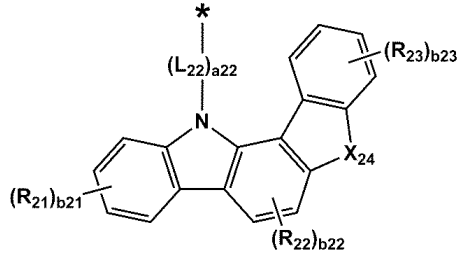
L₂₁, a₂₁ 및 R₂₁ 내지 R₂₉에 대한 정의는 각각 화학식 2B에서 정의한 바와 동일하다.

[0167]

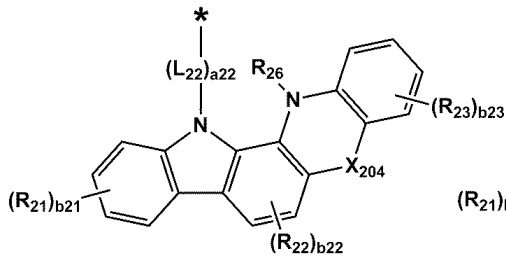
또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹은 하기 화학식 2B-1-a 내지 2B-5-b 중 어느 하나로 표시될 수 있다:



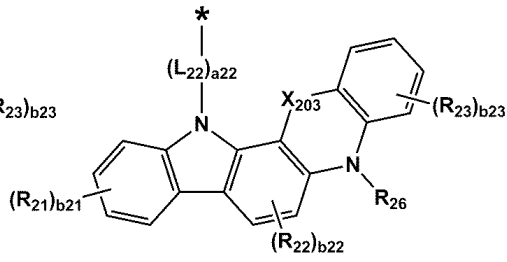
2B-1-a



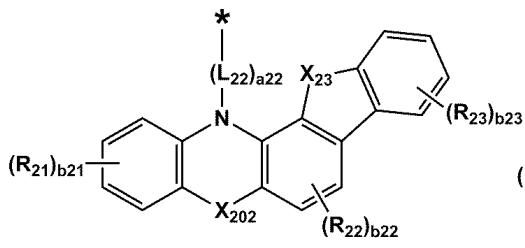
2B-1-b



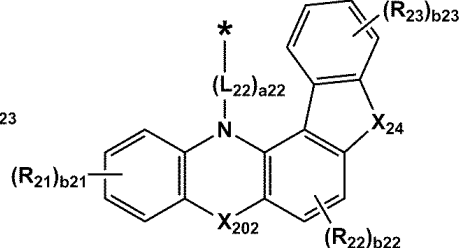
2B-1-c



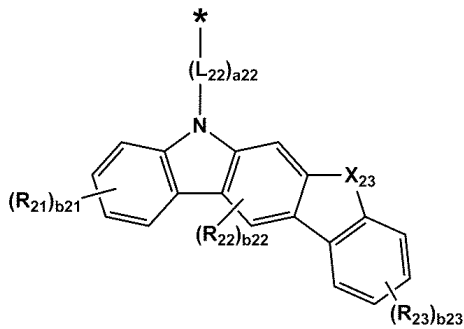
2B-1-d



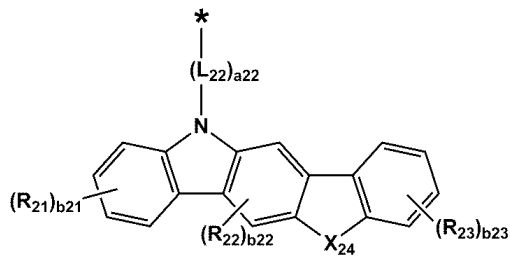
2B-1-e



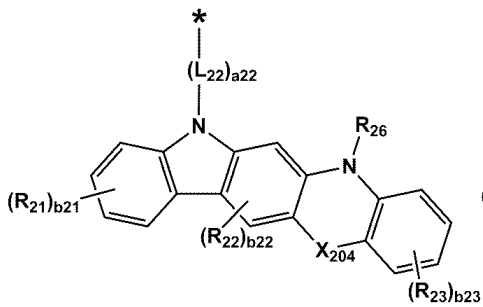
2B-1-f



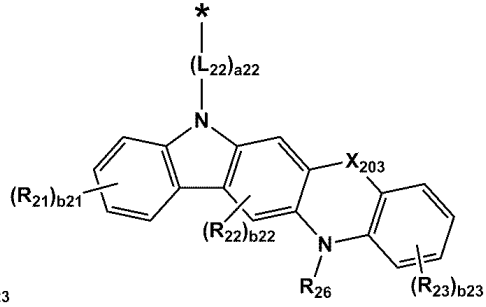
2B-2-a



2B-2-b



2B-2-c

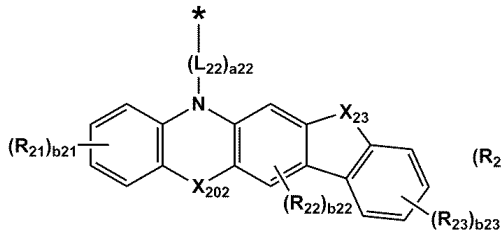


2B-2-d

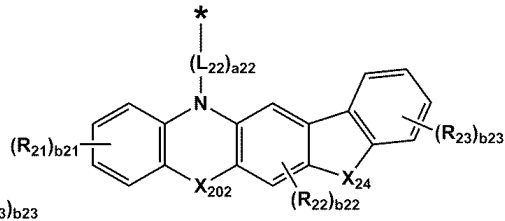
[0168]

[0169]

[0170]

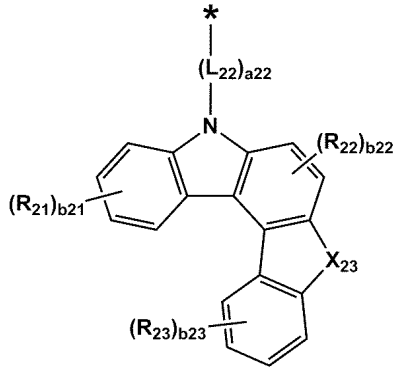


2B-2-e

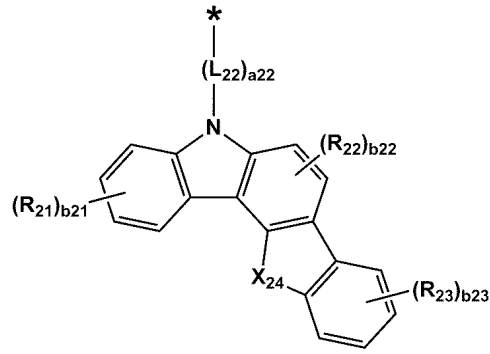


2B-2-f

[0171]

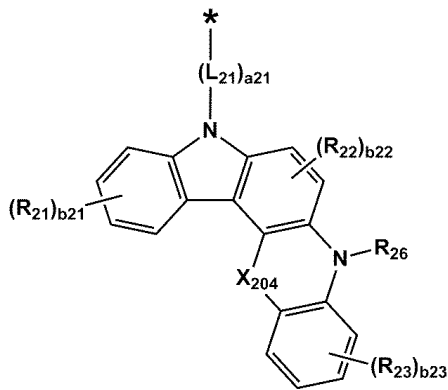


2B-3-a

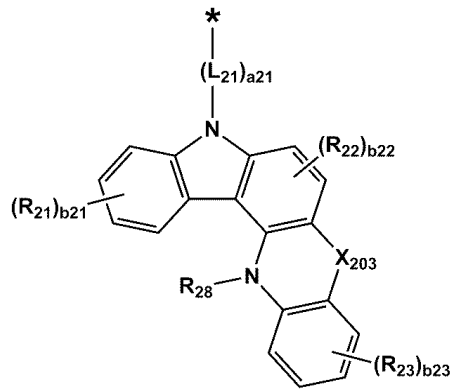


2B-3-b

[0172]

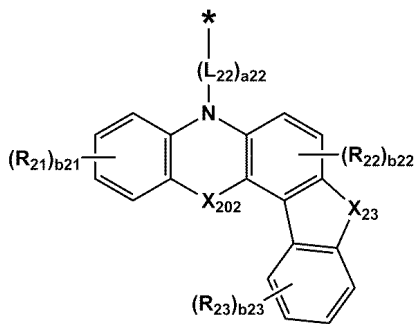


2B-3-c

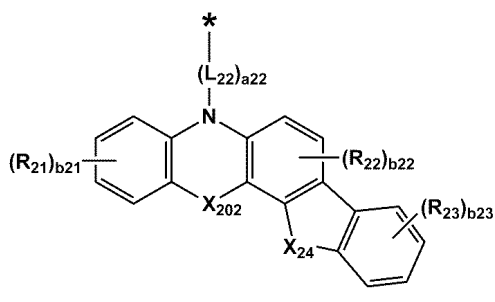


2B-3-d

[0173]

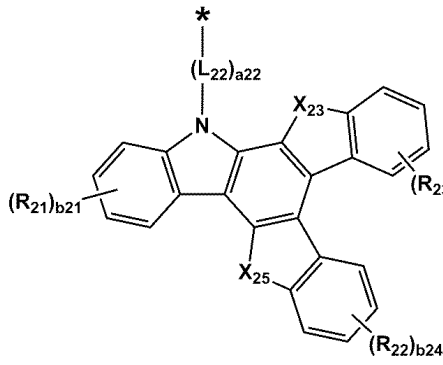


2B-3-e

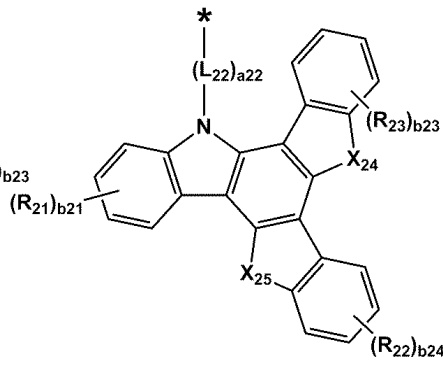


2B-3-f

[0174]

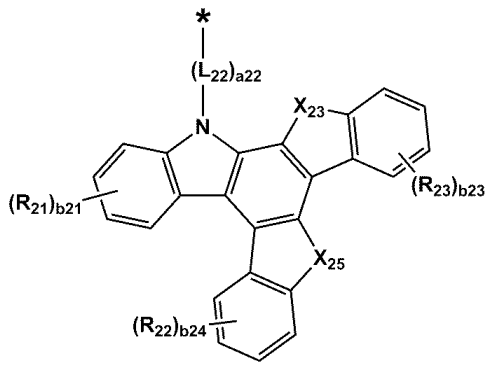


2B-4-a

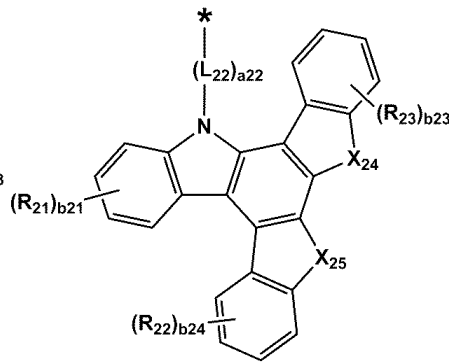


2B-4-b

[0175]



2B-5-a



2B-5-b

[0176]

[0177]

상기 화학식 2B-1-a 내지 2B-5-b 중,

[0178]

X_{23} 는 $C(R_{26})(R_{27})$, $Si(R_{26})(R_{27})$, $N(R_{26})$, O 및 S 중에서 선택되고,

[0179]

X_{24} 는 $C(R_{28})(R_{29})$, $Si(R_{28})(R_{29})$, $N(R_{28})$, O 및 S 중에서 선택되고,

[0180]

X_{25} 는 $C(R_{30})(R_{31})$, $Si(R_{30})(R_{31})$, $N(R_{30})$, O 및 S 중에서 선택되고,

[0181]

X_{202} 내지 X_{204} 는 서로 독립적으로, $C(R_{32})(R_{33})$ 및 $Si(R_{32})(R_{33})$ 중에서 선택되고,

[0182]

R_{30} 내지 R_{33} 의 정의는 각각 상기 화학식 1 중 R_1 에 대한 설명을 참조하고,

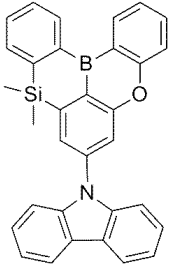
[0183]

b_{21} , b_{23} 및 b_{24} 는 서로 독립적으로, 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, b_{22} 는 1 또는 2이고,

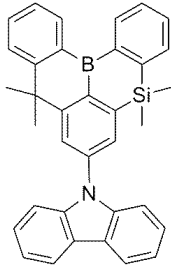
[0184]

L_{21} , a_{21} 및 R_{21} 내지 R_{29} 에 대한 정의는 각각 화학식 2B에서 정의한 바와 동일하다.

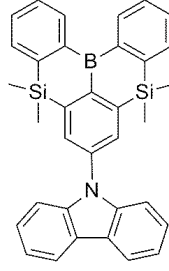
[0185] 일 구현예에 따르면, 상기 축합환 화합물은 하기 화합물 1 내지 23 중에서 선택될 수 있다:



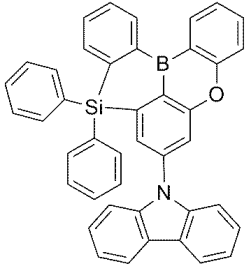
1



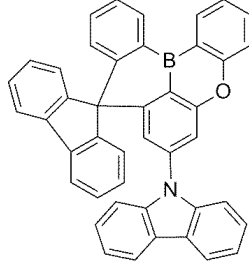
2



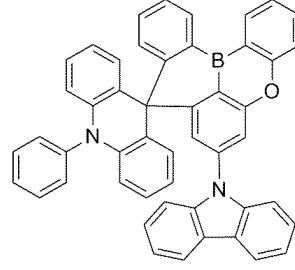
3



4

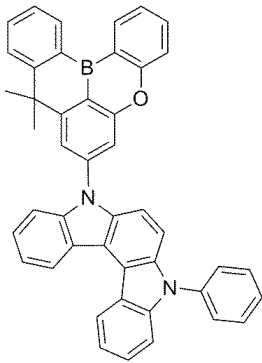


5

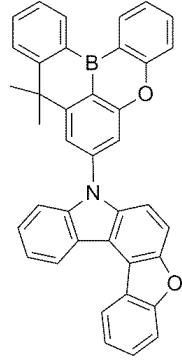


6

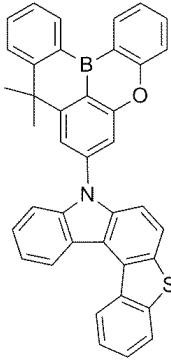
[0186]



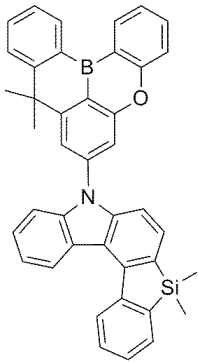
7



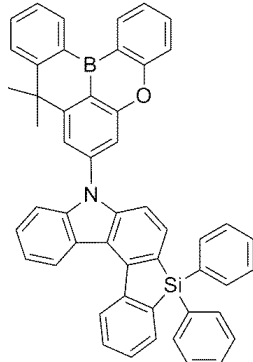
8



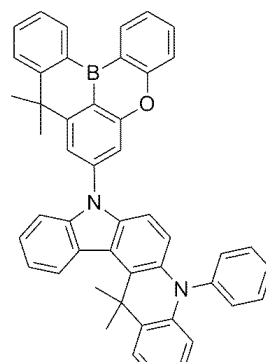
9



10

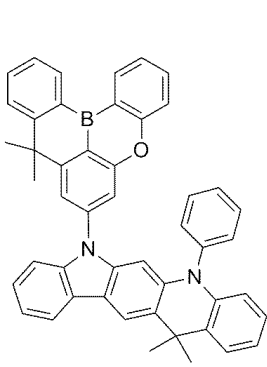


11

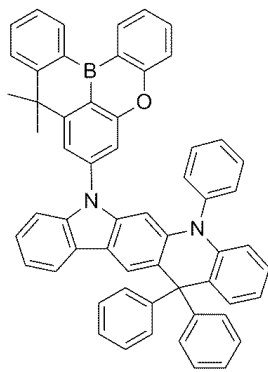


12

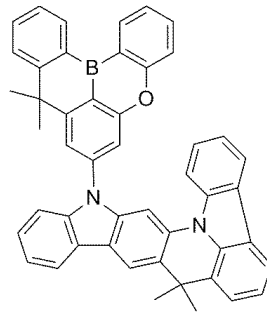
[0187]



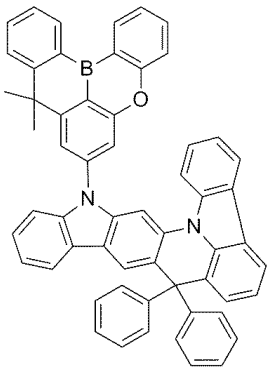
13



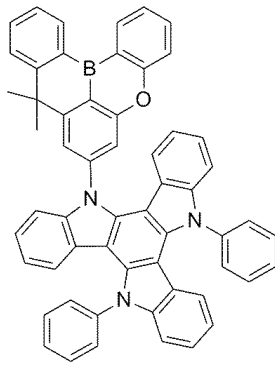
14



15

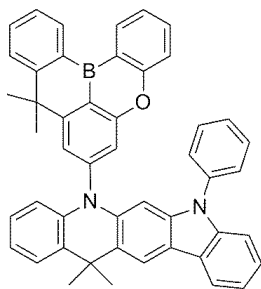


16

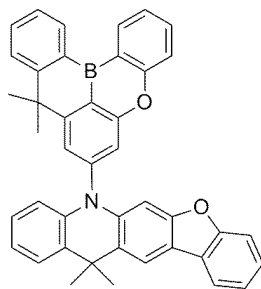


17

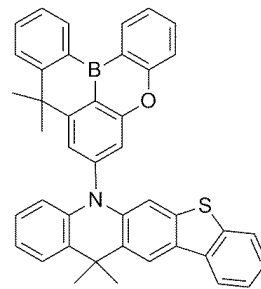
[0188]



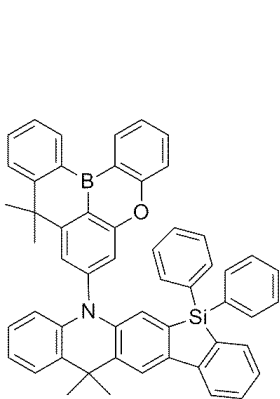
18



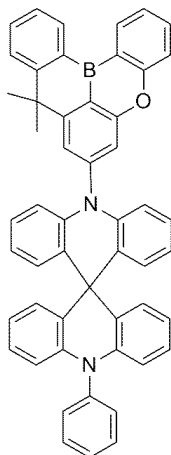
19



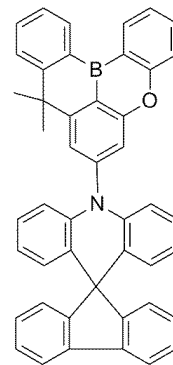
20



21



22



23

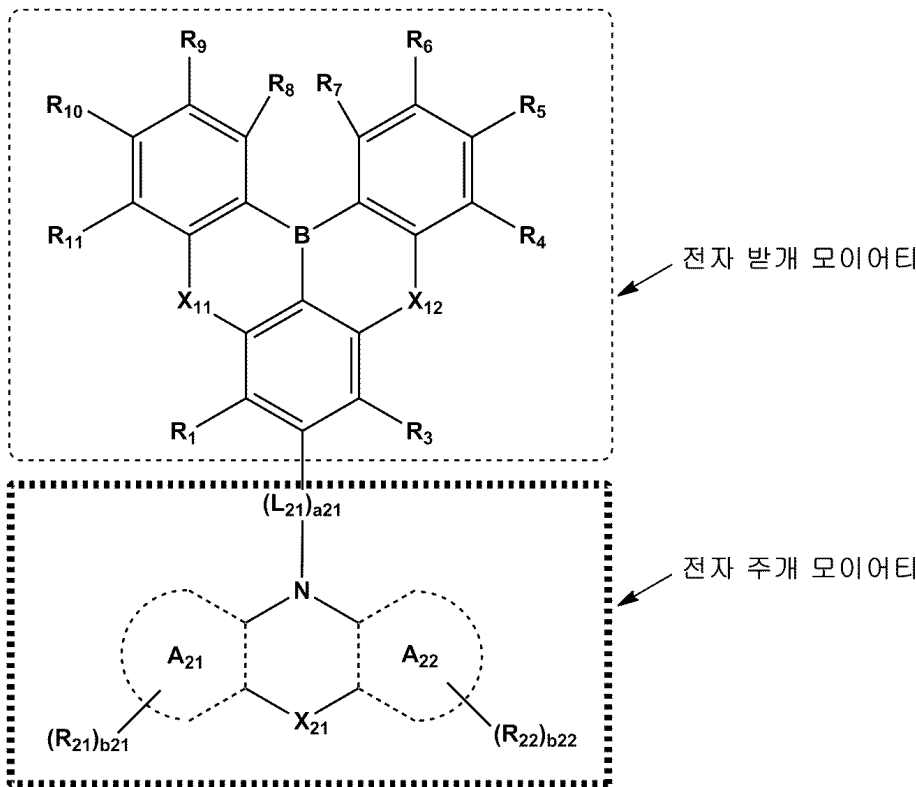
[0189]

[0190] 상기 축합환 화합물은 화합물 내에 각각 전자수용성 그룹(Electron Withdrawing Group: EWG)과 전자공여성 그룹(Electron Donating Group: EDG)의 성질을 가지는 치환기를 포함할 수 있다. 이러한 치환기들을 적절한 위치에 도입함으로써, 전체적인 화합물의 일중항 상태와 삼중항 상태의 에너지 차이를 적절히 조절할 수 있다. 이를 통해, 열활성화 지연형광(TADF)을 나타낼 수 있다.

[0191] 상기 축합환 화합물의 일중항(singlet) 에너지(S1)와 삼중항(triplet) 에너지(T1) 사이에는 다음과 같은 식을 만족한다.

[0192] $\Delta E_{st} = S1 - T1 \leq 0.3eV$

[0193] 상기 축합환 화합물은 상기 화학식 1의 구조를 포함한다. 예를 들어, 상기 축합환 화합물은 하기 도시한 바와 같이 화학식 2A 또는 2B로 표시되는 전자 주개(electron donor) 모이어티와 전자 받개(electron acceptor) 모이어티를 모두 포함함으로써 분자 내 전하 이동이 쉽게 이루어질 수 있어 발광 효율이 향상된다. 또한, 전자주개 모이어티에서 전자받개 모이어티로 쌍극자(dipole)가 형성되어 분자 내부의 쌍극자 모멘트(dipole moment)가 증가됨으로써, 광효율이 더욱 상승된다.



[0194] 또한, 상기 축합환 화합물은 전자주개 모이어티와 전자받개 모이어티가 분리됨으로써 분자 내 궤도 겹침(orbital overlap)을 효과적으로 차단할 수 있다. 이에 따라, 분자의 일중항과 삼중항이 겹치지 않도록 하여 매우 낮은 ΔE_{st} 를 가질 수 있다. 이를 통해, 상온에서도 삼중항 여기(excited) 상태에서부터 열활성을 통한 일중항 여기 상태로의 역계간전이가 가능하게 되어, 지연 형광을 나타낼 수 있으며, 삼중항 상태의 엑시톤이 발광에 이용되므로 발광 효율이 향상된다.

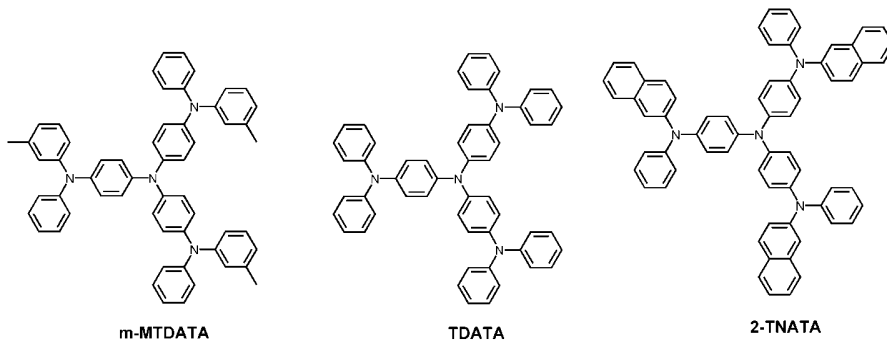
[0196] 나아가, 상기 축합환 화합물은 상대적으로 높은 전하(정공 또는 전자) 수송 능력을 가지므로, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 채용한 유기 발광 소자 중 발광층 내에서의 엑시톤 형성 비율이 향상될 수 있어, 상기 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 장수명 및 높은 최대 양자 효율을 가질 수 있다.

[0197] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.

[0198] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 축합환 화합물은 정공 수송 영역, 전자 수송 영역 및 발광층 중 적어도 하나에 포함될 수 있다. 또는, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극의 외측에 위치한 캡핑층 재료로 사용될 수 있다.

- [0199] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 1 종 이상 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0200] 본 명세서 중 "(유기층)이 축합환 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층)이 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 축합환 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 축합환 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0201] 예를 들어, 상기 유기층은, 상기 축합환 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 축합환 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1은 발광층에 존재하고 상기 화합물 2는 전자 수송층에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0202] 일 구현예에 따르면, 상기 제1전극이 애노드이고, 상기 제2전극이 캐소드이고, 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 배치된 전자 수송 영역을 더 포함하고, 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,
- [0203] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0204] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 발광층이 상기 축합환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0205] 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 발광층이 상기 축합환 화합물을 포함하고, 상기 발광층에 포함된 상기 축합환 화합물은 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고, 상기 발광층이 지연 형광을 방출할 수 있다.
- [0206] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 발광층이 상기 축합환 화합물로 이루어지거나(consist of); 또는 상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층 100중량부 당 상기 축합환 화합물의 함량이 0.1중량부 내지 50중량부일 수 있다.
- [0207] 상기 발광층 중 호스트는 안트라센계 화합물, 파이렌계 화합물, 스피로-바이플루오렌계 화합물, 카바졸계 화합물, 벤즈이미다졸계 화합물 및 포스핀옥사이드계 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0208] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 발광층이 상기 축합환 화합물을 포함하고, 상기 발광층이 최대 발광 파장이 420nm 이상 470nm 이하인 청색광을 방출할 수 있다.
- [0209] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 정공 수송 영역이 p-도펀트를 포함하고, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다.
- [0210] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 전자 수송 영역이 포스핀옥사이드계 화합물 및 벤즈이미다졸계 화합물 중 적어도 하나를 포함하고,
- [0211] 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이들 중 임의의 조합을 더 포함할 수 있다.
- [0212] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.
- [0213] [도 1에 대한 설명]
- [0214] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 유기 발광 소자(10)는 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)을 포함한다.
- [0215] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0216] [제1전극(110)]
- [0217] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

- [0218] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기관 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공 함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록, 제1전극용 물질은, 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다.
- [0219] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0220] 상기 제1전극(110)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0221] [유기층(150)]
- [0222] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.
- [0223] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극(110)과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.
- [0224] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]
- [0225] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0226] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.
- [0227] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조를 갖거나, 제1전극(110)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/발광 보조층, 정공 주입층/발광 보조층, 정공 수송층/발광 보조층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 다층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0228] 상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMPD, TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine (4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐린/도데실벤젠설포닉산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트))), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페르설포닉산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트))), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다:



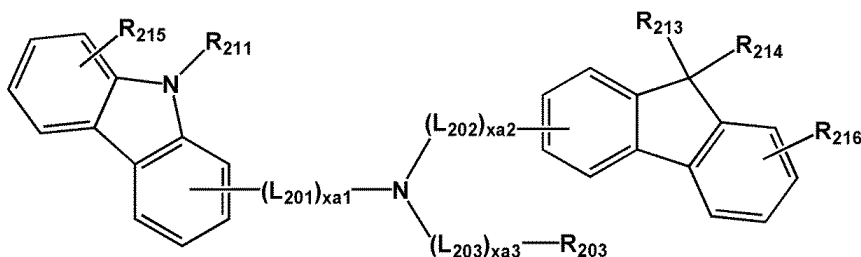
[0229]

된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

- [0241] 예를 들어, 상기 화학식 202 중 R_{201} 과 R_{202} 는, 선택적으로(optionally), 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있고, R_{203} 과 R_{204} 는, 선택적으로, 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0242] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,
- [0243] L_{201} 내지 L_{205} 는 서로 독립적으로,
- [0244] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기; 및
- [0245] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1 - C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}) 및 -N(Q_{31})(Q_{32}) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;
- [0246] 중에서 선택되고,
- [0247] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0248] 다른 구현예에 따르면, xa_1 내지 xa_4 는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0249] 또 다른 구현예에 따르면, xa_5 는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.
- [0250] 또 다른 구현예에 따르면, R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0251] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1 - C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기,

아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기, 피리디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 및 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기 및 피리디닐기;

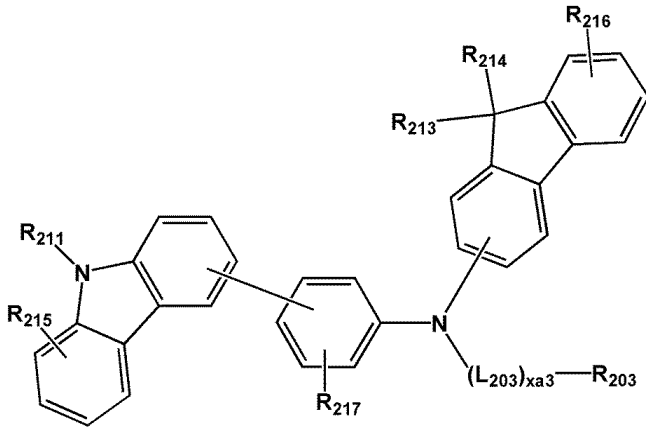
- [0252] 중에서 선택될 수 있고,
- [0253] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0254] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R_{201} 내지 R_{203} 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0255] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및
- [0256] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1-C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, $-F$ 로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;
- [0257] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0258] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R_{201} 과 R_{202} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R_{203} 과 R_{204} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0259] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R_{201} 내지 R_{204} 중 적어도 하나는,
- [0260] 카바졸일기; 및
- [0261] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1-C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, $-F$ 로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;
- [0262] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0263] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:
- [0264] <화학식 201A>



[0265]

[0266] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

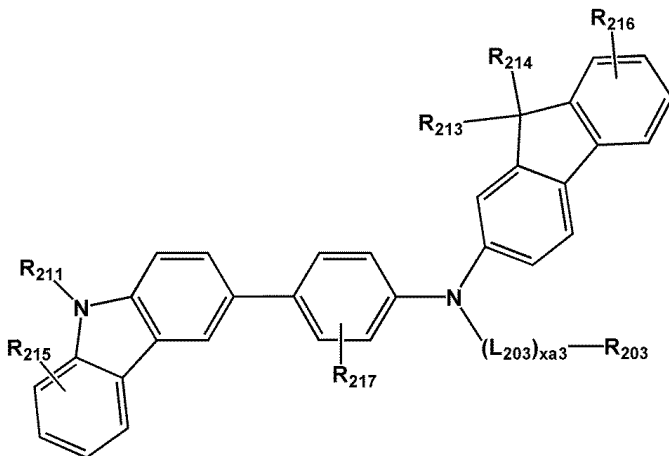
[0267] <화학식 201A(1)>



[0268]

[0269] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

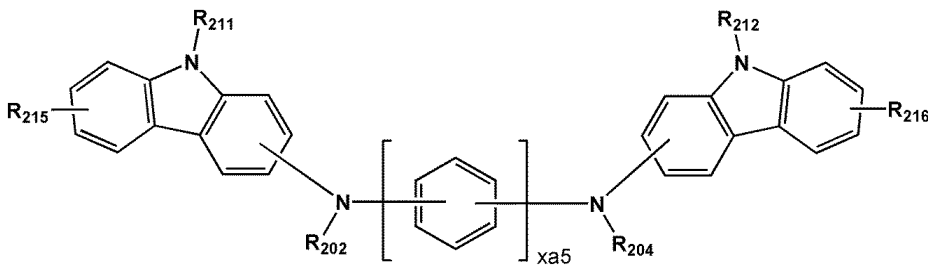
[0270] <화학식 201A-1>



[0271]

[0272] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

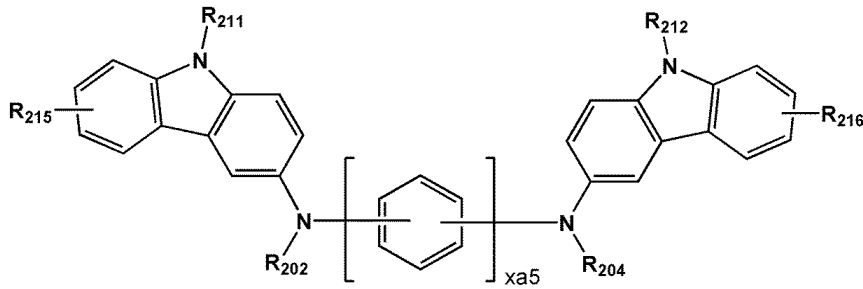
[0273] <화학식 202A>



[0274]

[0275] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0276] <화학식 202A-1>



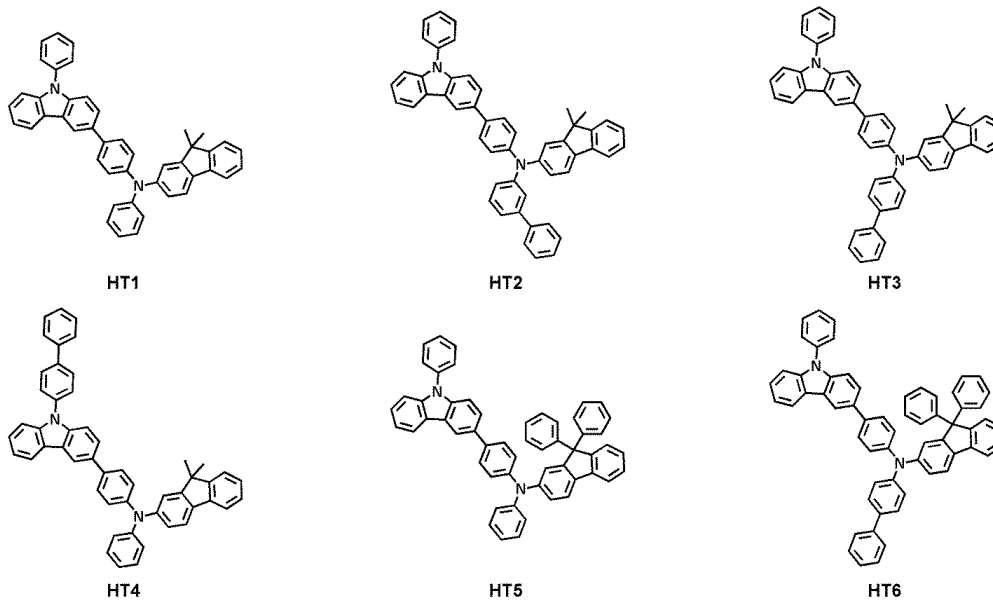
[0277] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,
 [0278] L₂₀₁ 내지 L₂₀₃, xa1 내지 xa3, xa5 및 R₂₀₂ 내지 R₂₀₄에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0279] R₂₁₁ 및 R₂₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀₃에 대한 설명을 참조하고,

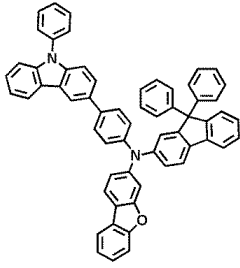
[0280] R₂₁₃ 내지 R₂₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵텐일기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, कोरो네닐기, 오발레닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0281] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

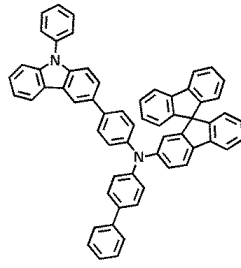
[0282] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



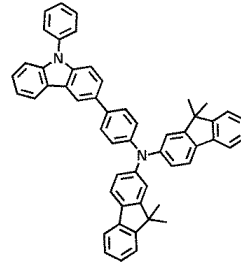
[0283]



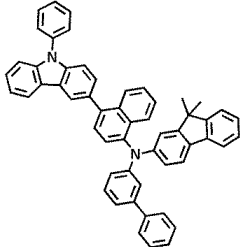
HT7



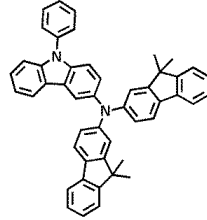
HT8



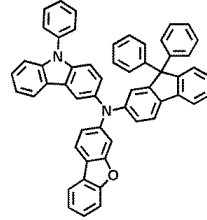
HT9



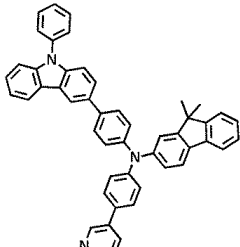
HT10



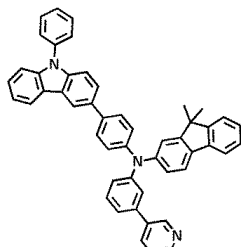
HT11



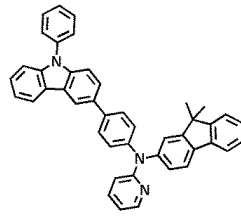
HT12



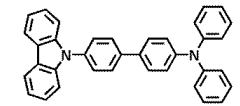
HT13



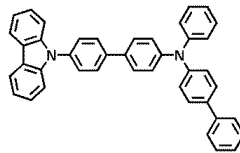
HT14



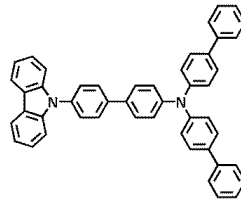
HT15



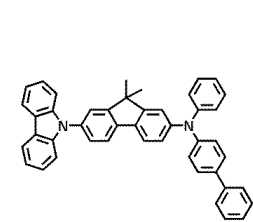
HT16



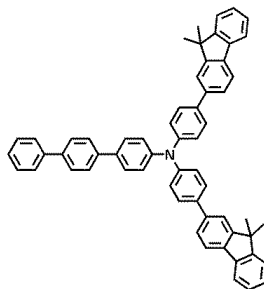
HT17



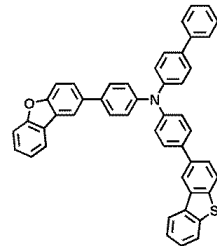
HT18



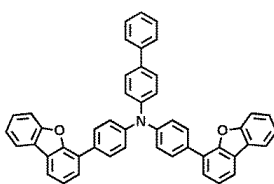
HT19



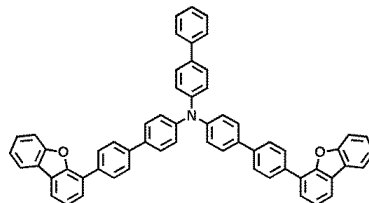
HT20



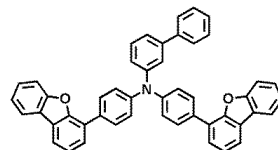
HT21



HT22



HT23

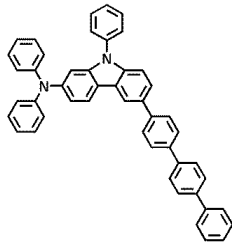


HT24

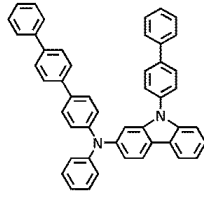
[0284]

[0285]

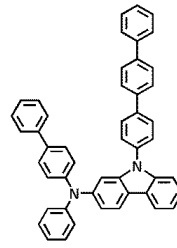
[0286]



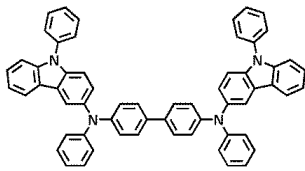
HT25



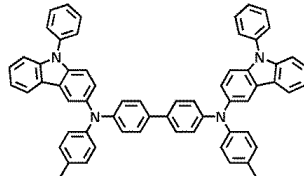
HT26



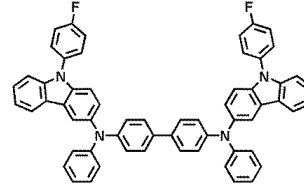
HT27



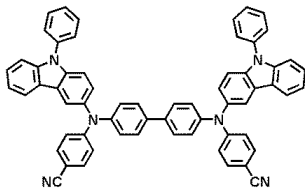
HT28



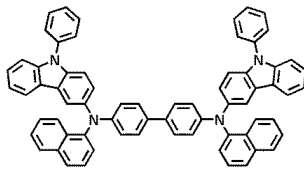
HT29



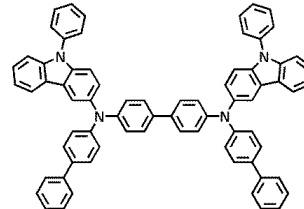
HT30



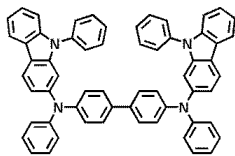
HT31



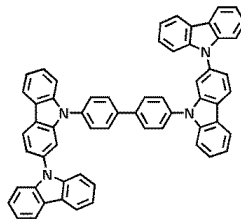
HT32



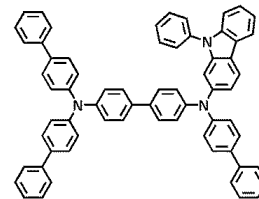
HT33



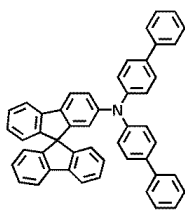
HT34



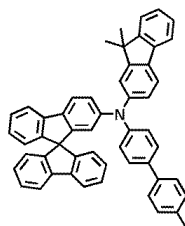
HT35



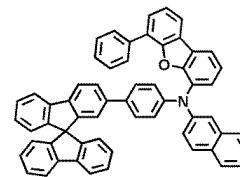
HT36



HT37



HT38



HT39

[0287]

[0288]

[0289]

[0290]

[0291]

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

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

[0292] [p-도펀트]

[0293] 상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 전하-생성 물질은 상기 정공 수송 영역 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

[0294] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0295] 일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다.

[0296] 상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0297] 예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0298] TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체;

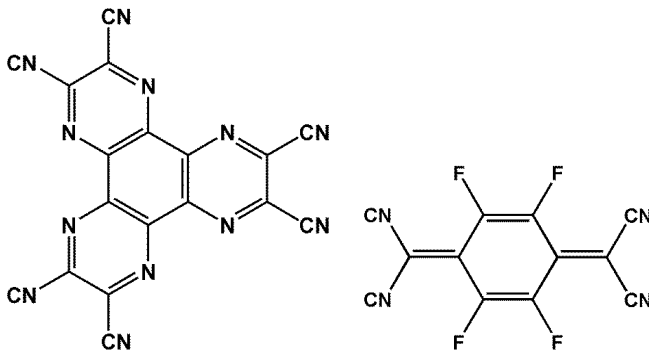
[0299] 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

[0300] HAT-CN (1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및

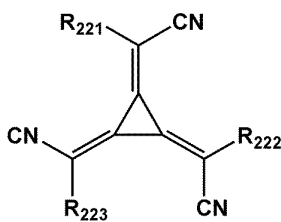
[0301] 하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

[0302] 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0303] <HAT-CN> <F4-TCNQ>



[0304] <화학식 221>



[0305] 상기 화학식 221 중,

[0306] R₂₂₁ 내지 R₂₂₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R₂₂₁ 내지 R₂₂₃ 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Cl로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Br로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 및 -I로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0307] [유기층(150) 중 발광층]

[0308] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발

광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

- [0311] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0312] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0313] 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.
- [0314] [발광층 중 호스트]
- [0315] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0316] <화학식 301>
- [0317] $[Ar_{301}]_{xb11}-[(L_{301})_{xb1}-R_{301}]_{xb21}$
- [0318] 상기 화학식 301 중,
- [0319] Ar_{301} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0320] $xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0321] L_{301} 은, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0322] $xb1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0323] R_{301} 은, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$, $-N(Q_{301})(Q_{302})$, $-B(Q_{301})(Q_{302})$, $-C(=O)(Q_{301})$, $-S(=O)_2(Q_{301})$ 및 $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$ 중에서 선택되고,
- [0324] $xb21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0325] Q_{301} 내지 Q_{303} 는 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0326] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar_{301} 은,
- [0327] 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타렌 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹; 및

[0328] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;

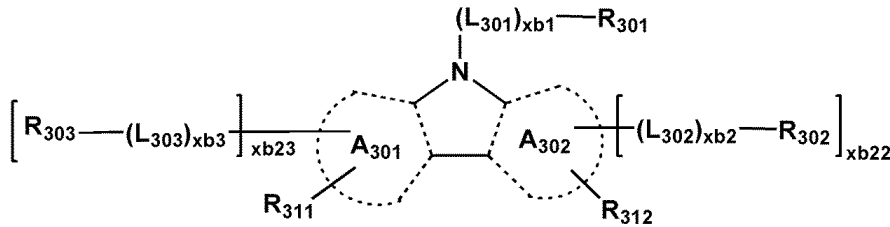
[0329] 중에서 선택되고,

[0330] Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0331] 상기 화학식 301 중 xb1이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₃₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

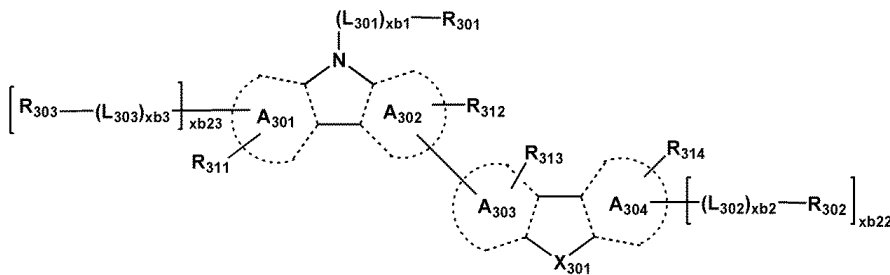
[0332] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0333] <화학식 301-1>



[0334]

[0335] <화학식 301-2>



[0336]

[0337] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0338] A₃₀₁ 내지 A₃₀₄는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 피리딘, 피리미딘, 인덴, 플루오렌, 스파이로-비플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 인돌, 카바졸, 벤조카바졸, 디벤조카바졸, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 나프토피란, 벤조나프토피란, 디나프토피란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 나프토티오펜, 벤조나프토티오펜 및 디나프토티오펜 중에서 선택되고,

[0339] X₃₀₁은 O, S 또는 N-[(L₃₀₄)xb4-R₃₀₄]이고,

[0340] R₃₁₁ 내지 R₃₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택되고,

[0341] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0342] L₃₀₁, xb1, R₃₀₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0343] L₃₀₂ 내지 L₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L₃₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0344] Xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,

- [0345] R₃₀₂ 내지 R₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R₃₀₁에 대한 설명을 참조한다.
- [0346] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L₃₀₁ 내지 L₃₀₄는 서로 독립적으로,
- [0347] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및
- [0348] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;
- [0349] 중에서 선택되고,
- [0350] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.
- [0351] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R₃₀₁ 내지 R₃₀₄는 서로 독립적으로,
- [0352] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사

졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

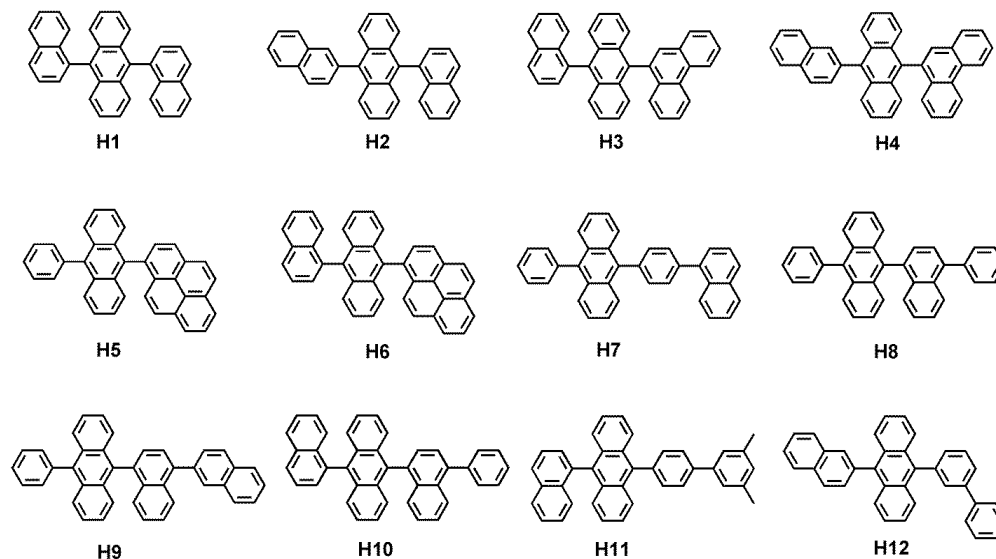
[0353] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

[0354] 중에서 선택되고,

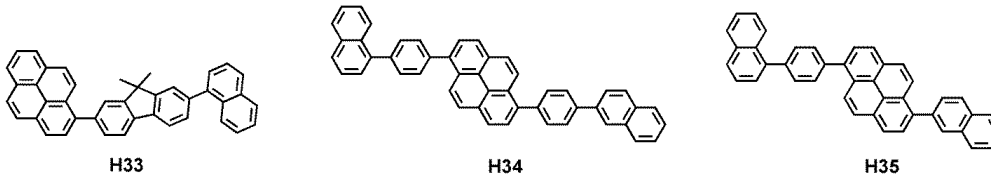
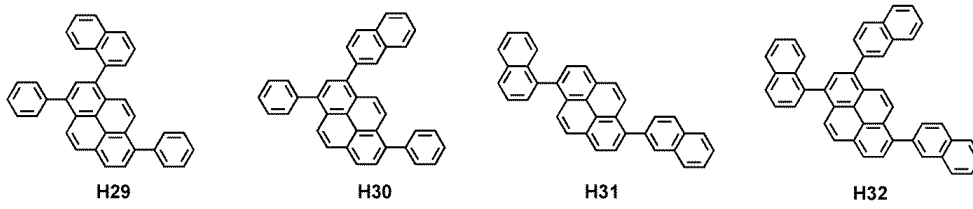
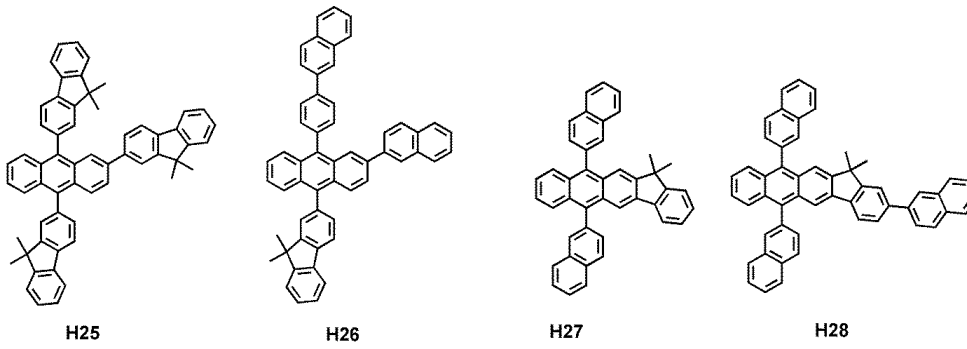
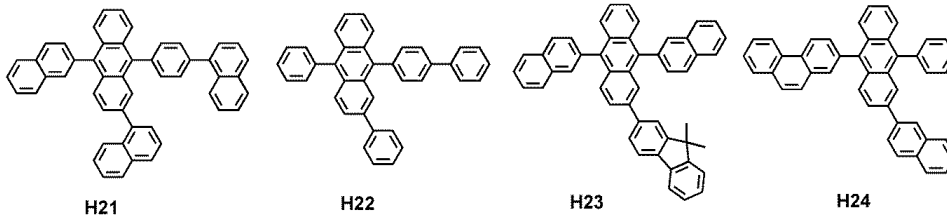
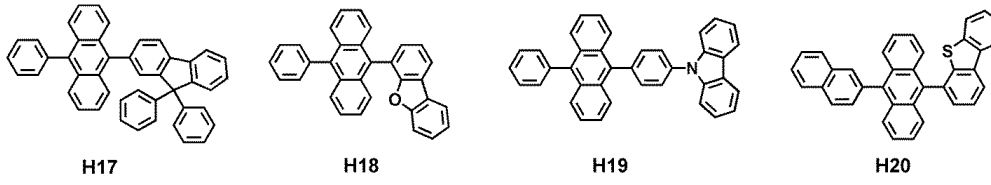
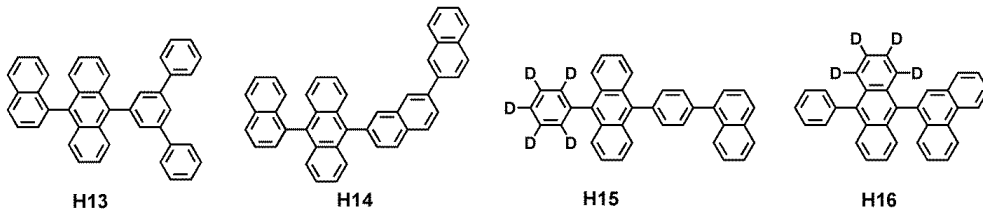
[0355] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0356] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 알칼리토 금속 착체를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 Be 착체 (예를 들면, 하기 화합물 H55), Mg 착체 및 Zn 착체 중에서 선택될 수 있다.

[0357] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



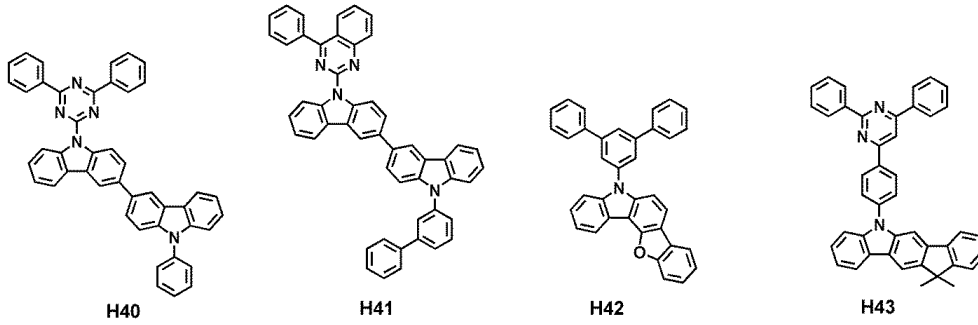
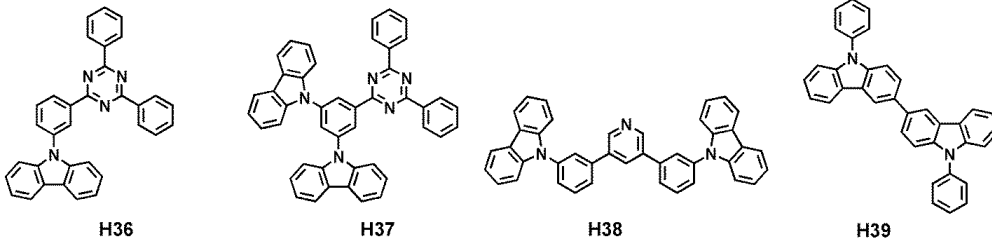
[0358]



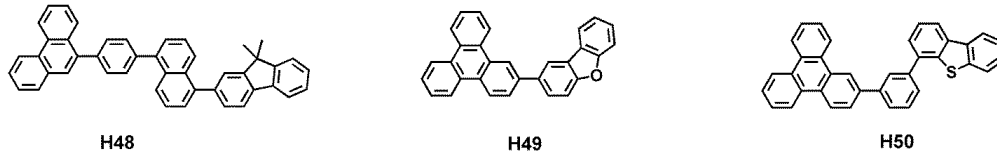
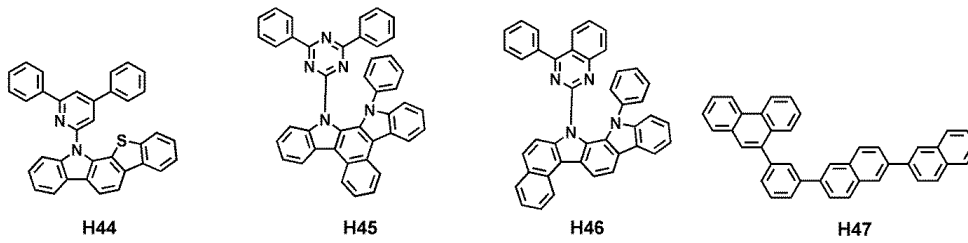
[0359]

[0360]

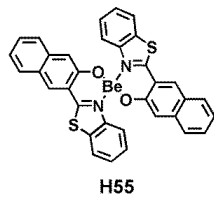
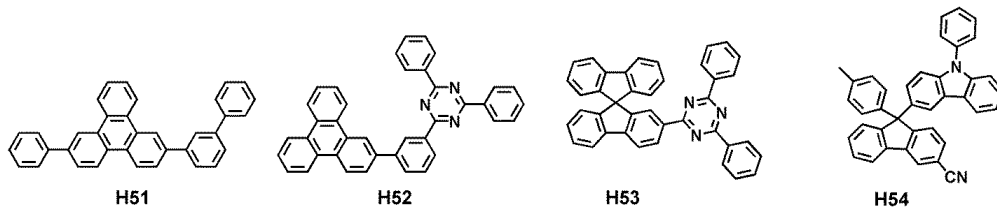
[0361]



[0362]



[0363]



[0364]

[0365]

[유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]

[0366]

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

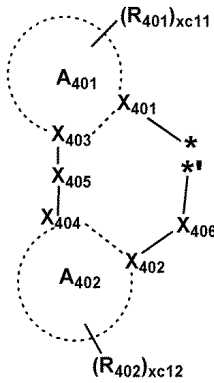
[0367]

<화학식 401>

[0368]

$M(L_{401})_{x1}(L_{402})_{x2}$

[0369] <화학식 402>



[0370]

[0371]

[0372]

[0373]

[0374]

[0375]

[0376]

[0377]

[0378]

[0379]

[0380]

[0381]

[0382]

[0383]

상기 화학식 401 및 402 중,

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

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

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

X₄₀₁ 내지 X₄₀₄는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

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

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

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

X₄₀₆은 단일 결합, O 또는 S이고,

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

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

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

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 인덴 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란(furan) 그룹, 이미다졸 그룹, 피

라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸(isoxazole) 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 카바졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조퓨란(benzofuran) 그룹, 벤조티오펜 그룹, 이소벤조티오펜 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 디벤조퓨란(dibenzofuran) 그룹 및 디벤조티오펜 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0384] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 i) X_{401} 은 질소이고, X_{402} 는 탄소이거나, 또는 ii) X_{401} 과 X_{402} 가 모두 질소일 수 있다.

[0385] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 R_{401} 및 R_{402} 는 서로 독립적으로,

[0386] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

[0387] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 페닐기, 나프틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 노르보나닐기 및 노르보네닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

[0388] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기;

[0389] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기; 및

[0390] $-Si(Q_{401})(Q_{402})(Q_{403})$, $-N(Q_{401})(Q_{402})$, $-B(Q_{401})(Q_{402})$, $-C(=O)(Q_{401})$, $-S(=O)_2(Q_{401})$ 및 $-P(=O)(Q_{401})(Q_{402})$;

[0391] 중에서 선택되고,

[0392] 상기 Q_{401} 내지 Q_{403} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0393] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 401 중 x_{c1} 이 2 이상일 경우, 2 이상의 L_{401} 중 2개의 A_{401} 은 선택적으로 (optionally), 연결기인 X_{407} 을 통하여 서로 연결되거나, 2개의 A_{402} 는 선택적으로, 연결기인 X_{408} 을 통하여 서로 연결될 수 있다 (하기 화합물 PD1 내지 PD4 및 PD7 참조). 상기 X_{407} 및 X_{408} 은 서로 독립적으로, 단일 결합, $*-O-*$, $*-S-*$, $*-C(=O)-*$, $*-N(Q_{413})-*$, $*-C(Q_{413})(Q_{414})-*$ 또는 $*-C(Q_{413})=C(Q_{414})-*$ (여기서, Q_{413} 및 Q_{414} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기임)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0394] 상기 화학식 401 중 L_{402} 는 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기 L_{402} 는 할로겐, 디케톤 (예를 들면, 아세틸아세토네이트), 카르복실산(예를 들면, 피콜리네이트), $-C(=O)$, 이소니트릴, $-CN$ 및 포스포러스 (예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphite)) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0395] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

- [0408] xd1 내지 xd3는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
- [0409] R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헥테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헥테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헥테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0410] xd4는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.
- [0411] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar₅₀₁은,
- [0412] 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스퀴이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타렌 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹; 및
- [0413] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스퀴이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타렌 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹;
- [0414] 중에서 선택될 수 있다.
- [0415] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로,
- [0416] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및
- [0417] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기;
- [0418] 중에서 선택될 수 있다.
- [0419] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로,
- [0420] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0421] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-

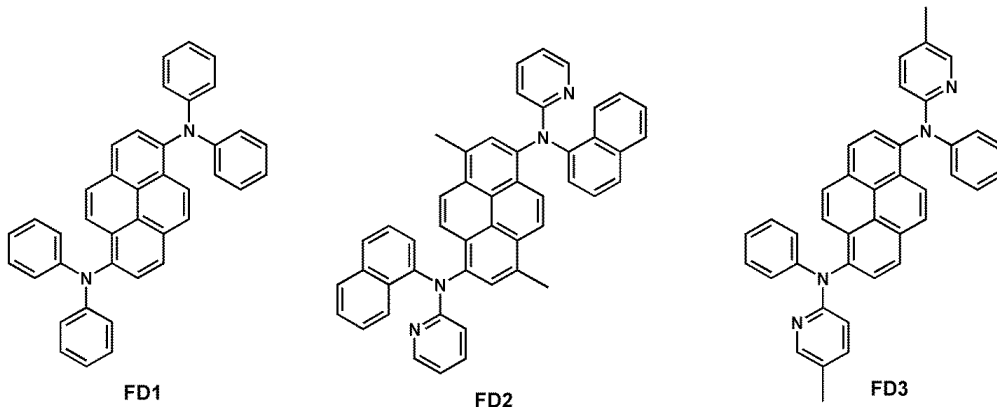
C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기 및 -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;

[0422] 중에서 선택되고,

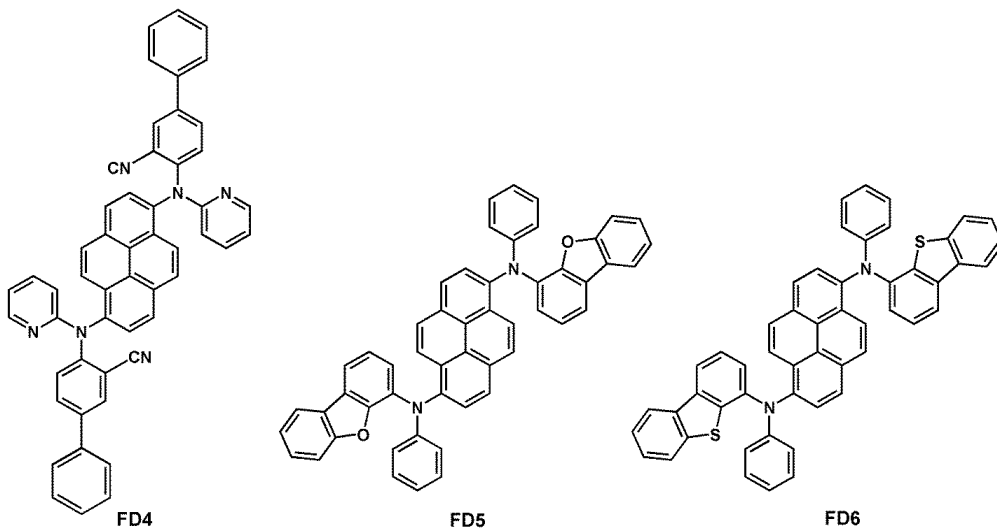
[0423] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0424] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

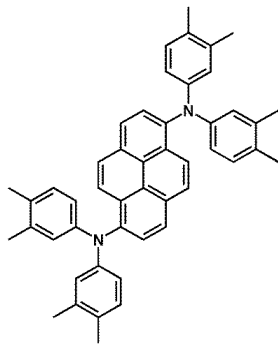
[0425] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:



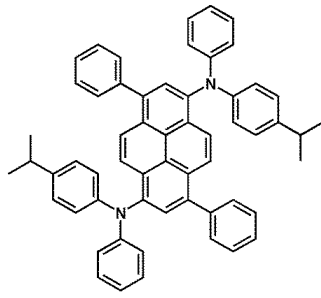
[0426]



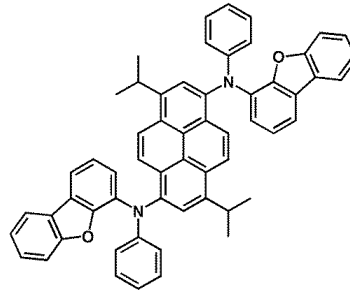
[0427]



FD7

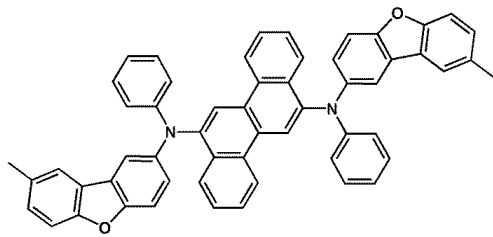


FD8

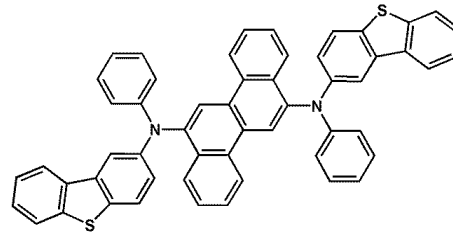


FD9

[0428]

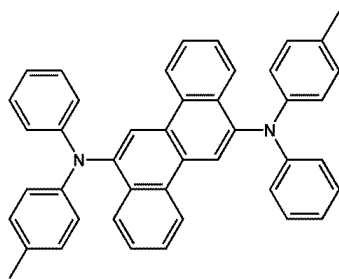


FD10

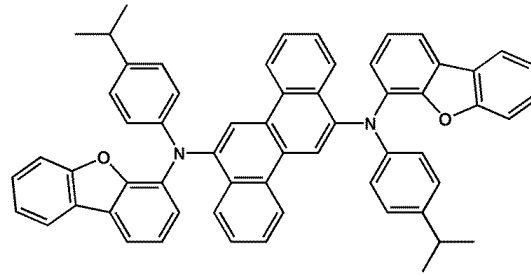


FD11

[0429]

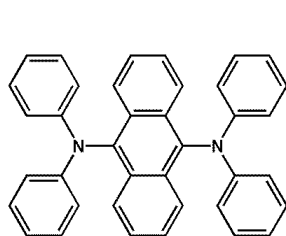


FD12

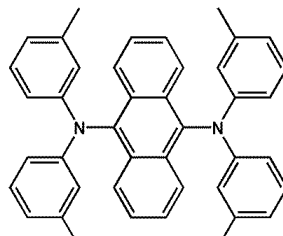


FD13

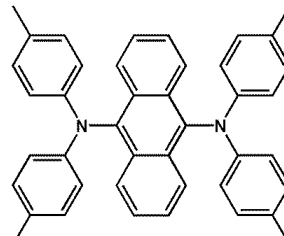
[0430]



FD14

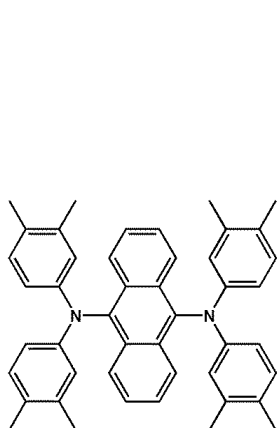


FD15

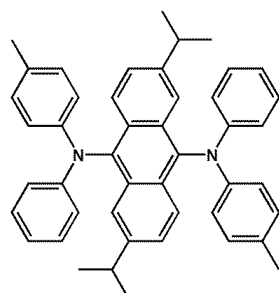


FD16

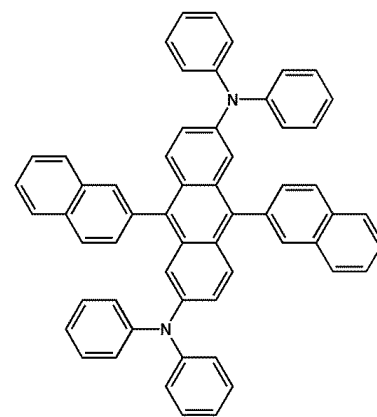
[0431]



FD17

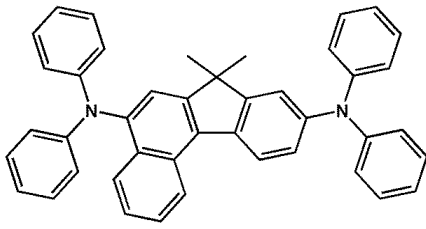


FD18

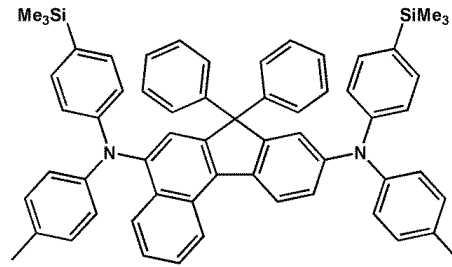


FD19

[0432]

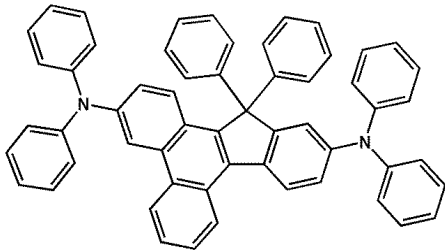


FD20



FD21

[0433]

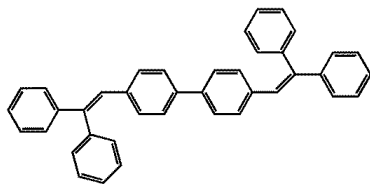


FD22

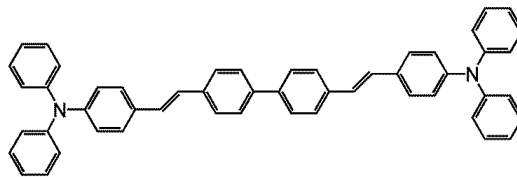
[0434]

[0435]

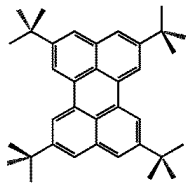
또는, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물들 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



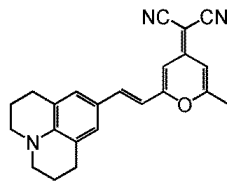
DPVBi



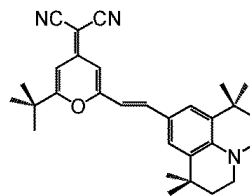
DPAVBi



TBPe

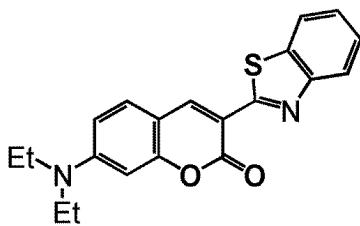


DCM

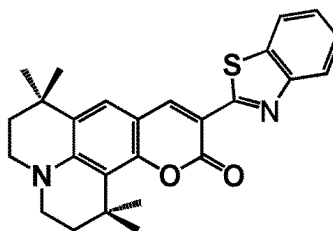


DCJTb

[0436]



Coumarin 6



C545T

[0437]

[0438]

[유기층(150) 중 전자 수송 영역]

[0439]

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

[0440]

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

[0441]

예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적층된 전자 수송층/전자 주입층, 정공 지지층/전자 수송층/전자 주입층, 전자 조절층/전자 수송층/전자 주입층, 또는 버퍼층/전자 수송층/전자 주입층 등의 구조를

가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0442] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은, π 전자 결핍성 함질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0443] 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 의미한다.
- [0444] 예를 들어, 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, i) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹이거나, ii) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 2 이상이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹이거나, 또는 iii) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 적어도 하나와, 적어도 하나의 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0445] 상기 π 전자 결핍성 함질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 인다졸, 푸린(purine), 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴놀살린, 퀴나졸린, 시놀린, 페난트리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 벤조이미다졸, 이소벤조티아졸, 벤조옥사졸, 이소벤조옥사졸, 트리아졸, 테트라졸, 옥사디아졸, 트리아진, 티아디아졸, 이미다조피리딘, 이미다조피리미딘, 아자카바졸 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0446] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0447] <화학식 601>
- [0448] $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$
- [0449] 상기 화학식 601 중,
- [0450] Ar₆₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0451] xe11은 1, 2 또는 3이고,
- [0452] L₆₀₁은, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0453] xe1은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0454] R₆₀₁은, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₆₀₁)(Q₆₀₂)(Q₆₀₃), -C(=O)(Q₆₀₁), -S(=O)₂(Q₆₀₁) 및 -P(=O)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂) 중에서 선택되고,
- [0455] 상기 Q₆₀₁ 내지 Q₆₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0456] xe21은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0457] 일 구현예에 따르면, 상기 xe11개의 Ar₆₀₁ 및 xe21개의 R₆₀₁ 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 함질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0458] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar₆₀₁은,
- [0459] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스퀴이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센

그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹; 및

[0460] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹;

[0461] 중에서 선택될 수 있고,

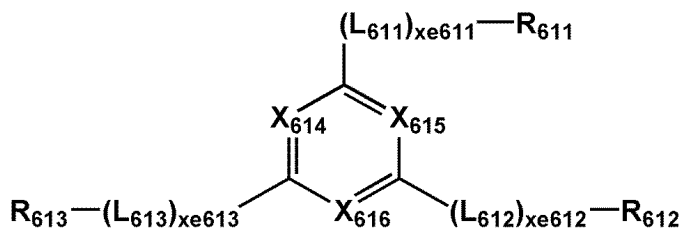
[0462] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0463] 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0464] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0465] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

[0466] <화학식 601-1>



[0467]

[0468] 상기 화학식 601-1 중,

[0469] 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,

[0470] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0471] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0472] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0473] R₆₁₄ 내지 R₆₁₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

- [0474] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L_{601} 및 L_{611} 내지 L_{613} 은 서로 독립적으로,
- [0475] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아IRO-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및
- [0476] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아IRO-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아IRO-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;
- [0477] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0478] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0479] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R_{601} 및 R_{611} 내지 R_{613} 은 서로 독립적으로,
- [0480] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아IRO-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

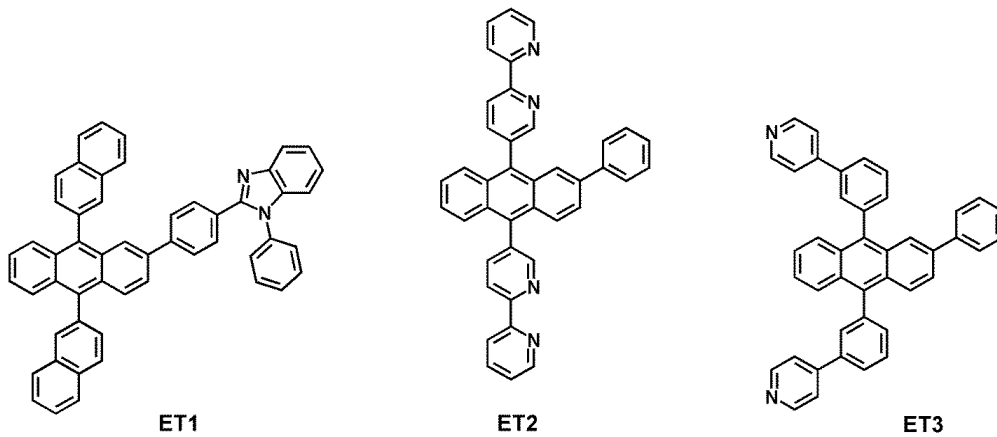
[0481] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0482] -S(=O)₂(Q₆₀₁) 및 -P(=O)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂);

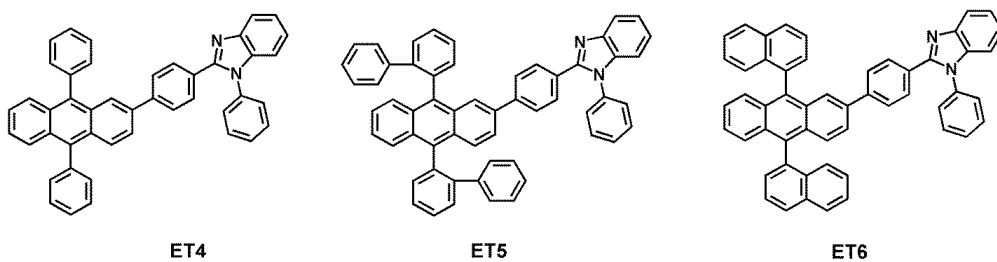
[0483] 중에서 선택되고,

[0484] 상기 Q₆₀₁ 및 Q₆₀₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

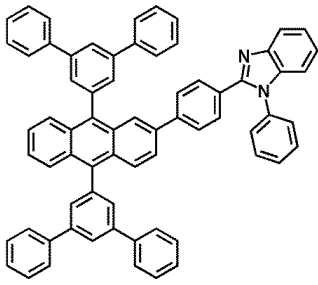
[0485] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



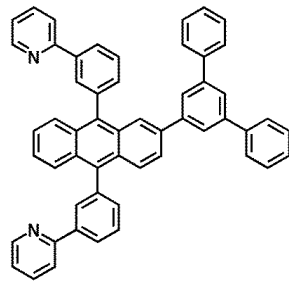
[0486]



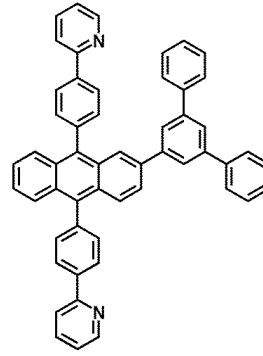
[0487]



ET7

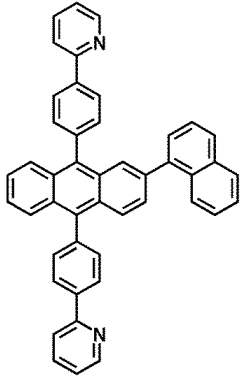


ET8

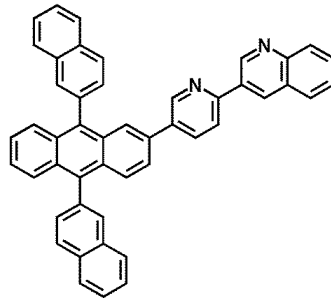


ET9

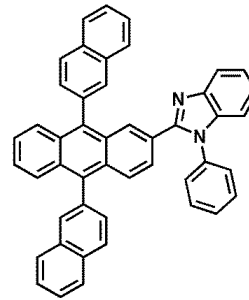
[0488]



ET10

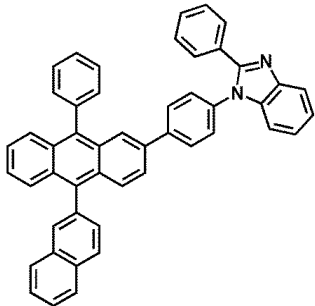


ET11

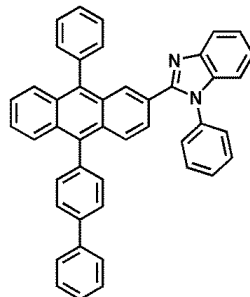


ET12

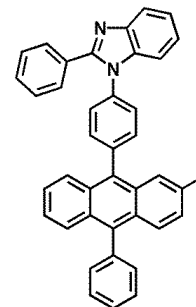
[0489]



ET13

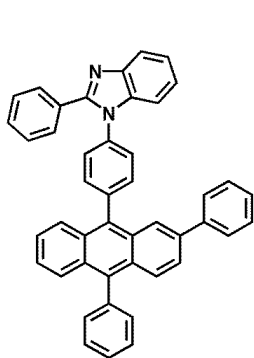


ET14

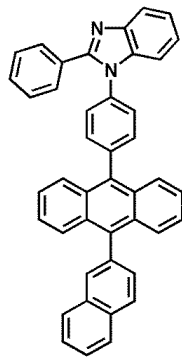


ET15

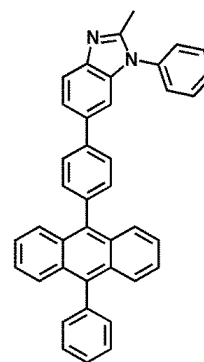
[0490]



ET16

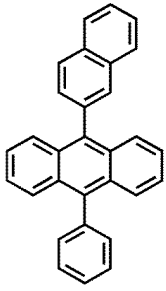


ET17

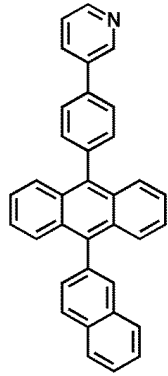


ET18

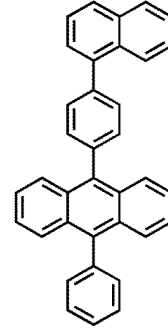
[0491]



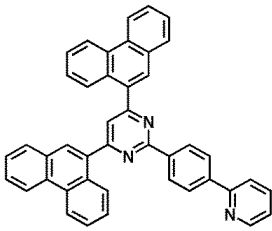
ET19



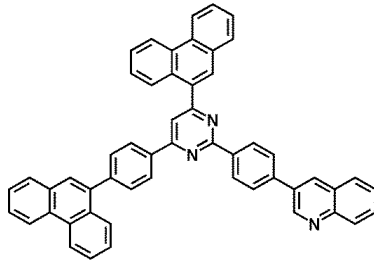
ET20



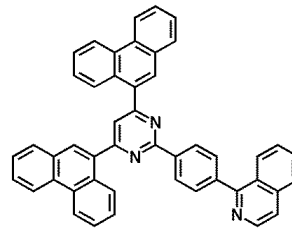
ET21



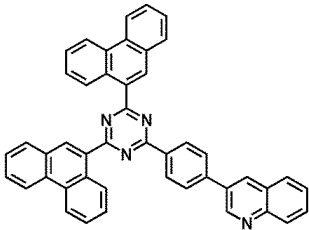
ET22



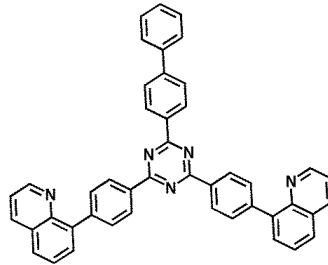
ET23



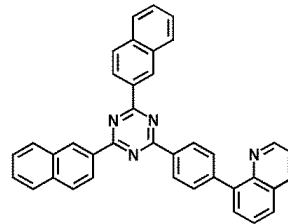
ET24



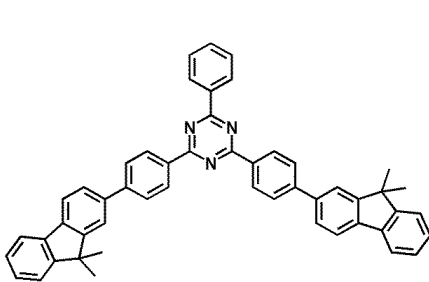
ET25



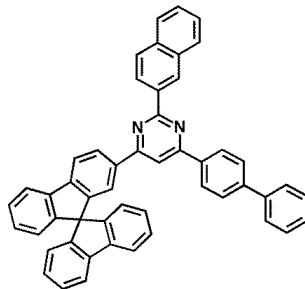
ET26



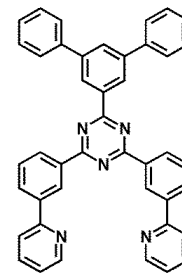
ET27



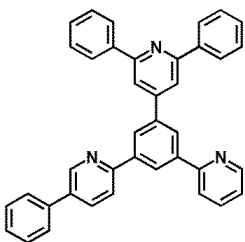
ET28



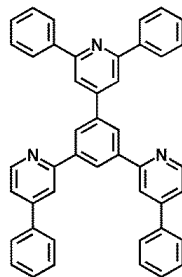
ET29



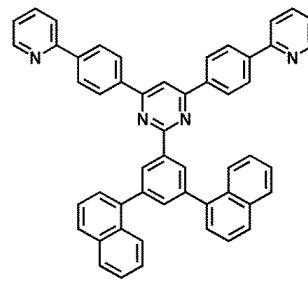
ET30



ET31



ET32



ET33

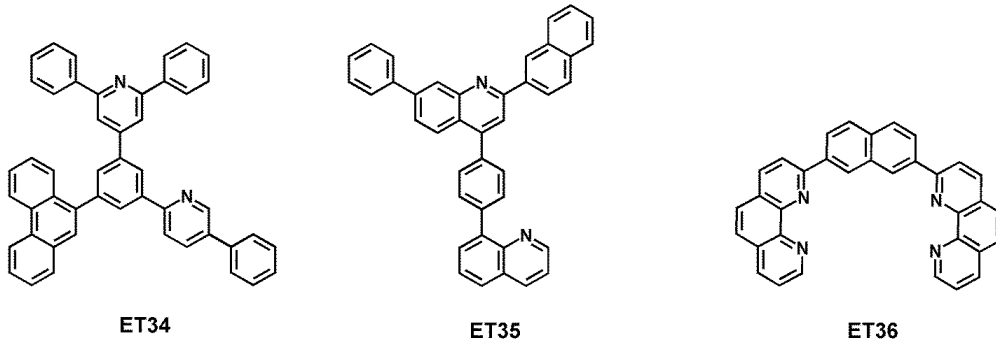
[0492]

[0493]

[0494]

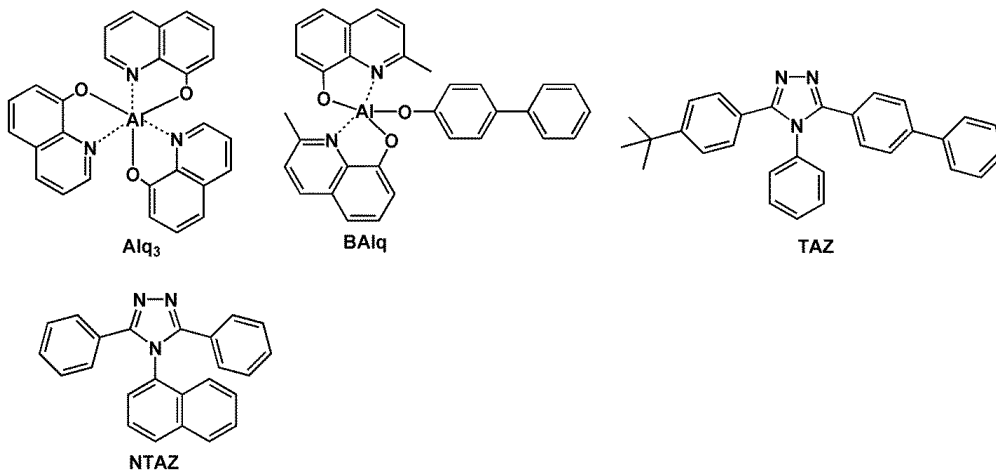
[0495]

[0496]



[0497]

[0498] 또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, BAlq, TAZ(3-(Biphenyl-4-yl)-5-(4-*tert*-butylphenyl)-4-phenyl-4*H*-1,2,4-triazole) 및 NTAZ 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다.



[0499]

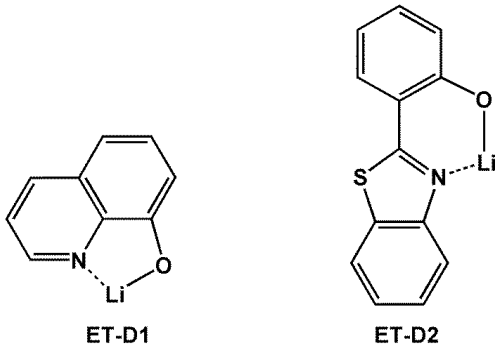
[0500] 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성 또는 전자 조절 특성을 얻을 수 있다.

[0501] 상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0502] 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.

[0503] 상기 금속-함유 물질은 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체의 금속 이온은, Li 이온, Na 이온, K 이온, Rb 이온 및 Cs 이온 중에서 선택될 수 있고, 상기 알칼리 토금속 착체의 금속 이온은 Be 이온, Mg 이온, Ca 이온, Sr 이온 및 Ba 이온 중에서 선택될 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

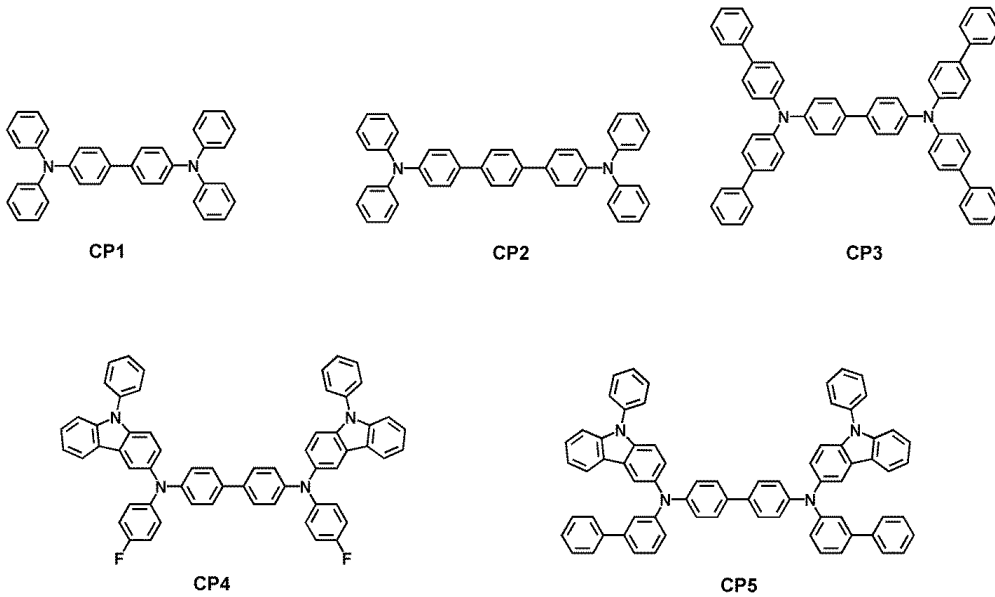
[0504] 예를 들면, 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다.



- [0505]
- [0506] 상기 전자 수송 영역은, 제2전극(190)으로부터의 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층은 상기 제2전극(190)과 직접(directly) 접촉할 수 있다.
- [0507] 상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0508] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0509] 상기 알칼리 금속은, Li, Na, K, Rb 및 Cs 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li, Na 또는 Cs일 수 있다. 다른 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li 또는 Cs일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0510] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.
- [0511] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.
- [0512] 상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.
- [0513] 상기 알칼리 금속 화합물은, Li₂O, Cs₂O, K₂O 등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속 화합물은, LiF, Li₂O, NaF, LiI, NaI, CsI, KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0514] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO, Ba_xSr_{1-x}O(0<x<1), Ba_xCa_{1-x}O(0<x<1) 등과 같은 알칼리 토금속 화합물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0515] 상기 희토류 금속 화합물은, YbF₃, ScF₃, ScO₃, Y₂O₃, Ce₂O₃, GdF₃, 및 TbF₃ 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은 YbF₃, ScF₃, TbF₃, YbI₃, ScI₃, TbI₃ 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0516] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트린, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0517] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합만으로 이루어져 있거나, 상기 유기물을 더 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층이 유기물을 더 포함할 경우, 상기 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류

금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합은 상기 유기물로 이루어진 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

- [0518] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 적절한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0519] [제2전극(190)]
- [0520] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극인 캐소드(cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(190)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합(combination)을 사용할 수 있다.
- [0521] 상기 제2전극(190)은, 리튬(Li), 은(Ag), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), ITO 및 IZO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 제2전극(190)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다.
- [0522] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0523] [도 2 내지 4에 대한 설명]
- [0524] 한편, 도 2의 유기 발광 소자(20)는 제1캐핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 3의 유기 발광 소자(30)는 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 4의 유기 발광 소자(40)는 제1캐핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.
- [0525] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.
- [0526] 유기 발광 소자(20, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제1전극(110) 및 제1캐핑층(210)을 지나 외부로 추출될 수 있고, 유기 발광 소자(30, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)을 지나 외부로 추출될 수 있다.
- [0527] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.
- [0528] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 서로 독립적으로, 유기물로 이루어진 유기 캐핑층, 무기물로 이루어진 무기 캐핑층, 또는 유기물 및 무기물을 포함한 복합 캐핑층일 수 있다.
- [0529] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물, 아민계 화합물, 포르핀 유도체 (porphine derivatives), 프탈로시아닌 유도체 (phthalocyanine derivatives), 나프탈로시아닌 유도체 (naphthalocyanine derivatives), 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나의 물질을 포함할 수 있다. 상기 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물 및 아민계 화합물은, 선택적으로, O, N, S, Se, Si, F, Cl, Br 및 I 중에서 선택된 적어도 하나의 원소를 포함한 치환기로 치환될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민계 화합물을 포함할 수 있다.
- [0530] 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 또는 상기 화학식 202로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0531] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화합물 HT28 내지 HT33 및 하기 화합물 CP1 내지 CP5 중에서 선택된 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0532]

[0533]

[0534]

[0535]

[0536]

[0537]

[0538]

[0539]

[0540]

[0541]

[0542]

[0543]

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

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.

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°C의 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.

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

[치환기의 일반적인 정의]

본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monivalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기, 프로피닐기, 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는, -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.

본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의

구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0544] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리아졸리딘기(1,2,3,4-oxatriazolidiny), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오페닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0545] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0546] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸일기, 2,3-디히드로퓨라닐기, 2,3-디히드로티오페닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0547] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

[0548] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함된다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

[0549] 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.

[0550] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기(heteroarylloxy)는 -OA₁₀₄(여기서, A₁₀₄는 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기임)를 가리키고, 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기(heteroarylthio)는 -SA₁₀₅(여기서, A₁₀₅는 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기임)를 가리킨다.

[0551] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 8 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예에는, 플루오레닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0552] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 구체예에는, 카바졸일기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2

가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0553] 본 명세서 중 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 5 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.
- [0554] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이란, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹과 동일한 구조를 갖되, 고리-형성 원자로서, 탄소(탄소수는 1 내지 60일 수 있음) 외에, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 그룹을 의미한다.
- [0555] 본 명세서 중, 상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0556] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0557] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0558] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0559] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0560] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0561] 중에서 선택되고,
- [0562] 상기 Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실

기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0563] 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"은 메톡시기를 의미한다.

[0564] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0565] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0566] 본 명세서 중 * 및 *'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

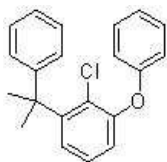
[0567] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성에 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.

[0568] [실시예]

[0569] [합성예]

[0570] **합성예 1: 화합물 7의 합성**

[0571] 1. 화합물 7-1의 합성



[0572]

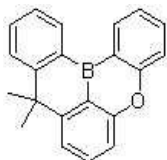
[0573] <화합물 7-1>

[0574] 1-bromo-2,3-dichlorobenzene(40.0 g, 177 mmol), phenol(18.9 g, 194.7 mmol), cumene(23.36 g, 194.7 mmol), sodium tert-butoxide(43.0 g, 447 mmol), dichlorobis[di-tert-butyl(p-dimethyl aminophenyl)phosphino]palladium (II)(1.30 g, 1.84 mmol)을 질소 분위기 하에서 o-xylene(400 mL)에 녹였다.

[0575] 80 °C에서 2시간, 120 °C에서 3시간 교반 후, 반응물을 상온까지 식혔다. 에틸아세테이트와 물을 반응물에 첨가하여 침전을 형성시켰다. 침전은 필터로 분리한 후, 톨루엔에 녹인 후, silica gel에 통과시켰다. 용매는 진공으로 건조한 후, 반응물을 헵탄으로 세정하여 화합물 7-1을 얻었다. (35.4 g, 109.7 mmol, 62% 수율)

[0576] m/z [M+H]⁺ calcd for C₂₁H₁₉ClO 322.11; observed 322.83.

[0577] 2. 화합물 7-2의 합성



[0578]

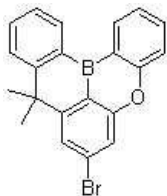
[0579] <화합물 7-2>

[0580] 화합물 7-1(14.4 g, 44.7 mmol)를 tert-butylbenzene(150 mL)에 녹인 용액에 tert-butyllithium in pentane 용액(31.6 mL, 1.70 M, 53.7 mmol)을 -30 °C, 질소 분위기에서 천천히 적하시켰다. 60 °C에서 2시간 교반 후, 헵탄을 진공으로 건조시켰다. -30 °C에서 boron tribromide(5.10 mL, 53.9 mmol)을 적하한 후, 상온에서 30분간 교반하였다. 0 °C에서 N,N-Diisopropylethylamine(15.6 mL, 91.1 mmol)을 적하한 후, 120 °C에서 3시간 교반한

후, 반응물을 상온으로 식혔다. sodium acetate(13.0 g in 100 mL) 수용액과 ethyl acetate(50 mL)을 반응물로 첨가하고, 수용액 층을 ethyl acetate 층으로부터 분별 추출하였다. 유기층을 진공 건조하여 응축하고, 그 응축물을 톨루엔에 녹인 후, silica gel에 통과시켰다. 톨루엔은 진공 건조하여 제거하고 헵탄에 재침전시켜 화합물 7-2을 얻었다. (3.58 g, 12.1 mmol, 27% 수율)

[0581] m/z [M+H]⁺ calcd for C₂₁H₁₇BO 296.14; observed 296.18.

[0582] 3. 화합물 7-3의 합성



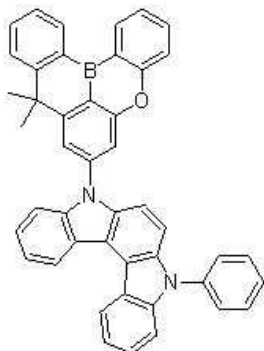
[0583]

[0584] <화합물 7-3>

[0585] 화합물 7-2(2.68 g, 9.034mmol), NBS(1.77g, 9.938mmol), and CHCl₃(100mL) 혼합물을 60 °C 아르곤 분위기에서 교반하였다. 3시간 교반 후, 상온까지 식히고 물(300mL)과 CHCl₃(3X50mL)로 분별 추출하였다. 유기층은 무수 MgSO₄로 건조시키고, 용매를 제거하여 응축물로 만들었다. 이를 silica gel에 통과시키고, CH₂Cl₂/methanol에 재침전 시켜 화합물 7-3을 얻었다. (3.12 g, 8.311 mmol, 92% 수율)

[0586] m/z [M+H]⁺ calcd for C₂₁H₁₆BBrO 374.05; observed 375.07.

[0587] 4. 화합물 7의 합성



[0588]

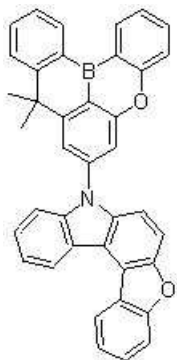
[0589] <화합물 7>

[0590] 5-phenyl-5H-8λ²-indolo[2,3-c]carbazoleCarbazole (19.82 g, 59.8 mmol), 화합물 7-3(22.88 g, 61 mmol), copper powder(11.628 g, 183 mmol), potassium carbonate(25.293 g, 193 mmol)를 dimethylformamide(DMF)(120 mL)에 녹이고 140 °C, 질소 분위기에서 24시간 교반하였다. 반응이 종료된 후, 반응물을 소금물에 붓고, 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층은 무수 MgSO₄로 건조시키고, 용매를 제거하여 응축물로 만들었다. 이를 ethyl acetate (EA) : n-hexane 1 : 10 전개액으로 silica gel에 통과시키고, 용매를 제거하여 화합물 7을 얻었다. (16.04 g, 25.6 mmol, 42% 수율)

[0591] ¹H NMR (400MH, CDCl₃, δ): 8.55 (2H), 7.94 (2H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.62 (2H), 7.58 (2H), 7.50 (3H), 7.35 (3H), 7.29 (1H), 7.26 (1H), 7.25 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (2H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H).

[0592] m/z [M+H]⁺ calcd for C₄₅H₃₁BN₂O 626.25; observed 626.57.

[0593] **합성예 2: 화합물 8의 합성**



[0594]

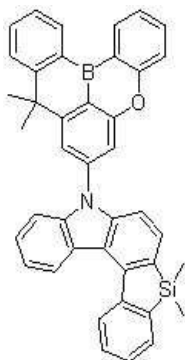
[0595] <화합물 8>

[0596] 8λ²-benzofuro[2,3-c]carbazole(15.33 g, 59.8 mmol), 화합물 7-3(22.88 g, 61 mmol), copper powder(11.628 g, 183 mmol), potassium carbonate(25.293 g, 193 mmol)를 dimethylformamide(DMF)(120 mL)에 녹이고 140 °C, 질소 분위기에서 24시간 교반하였다. 반응이 종료된 후, 반응물을 소금물에 붓고, 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층은 무수 MgSO₄로 건조시키고, 용매를 제거하여 응축물로 만들었다. 이를 ethyl acetate (EA) : n-hexane 1 : 10 전개액으로 silica gel에 통과시키고, 용매를 제거하여 화합물 8을 얻었다. (15.16 g, 27.5 mmol, 45% 수율)

[0597] ¹H NMR (400MH, CDCl₃, δ): 8.55 (1H), 7.98 (1H), 7.94 (1H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.60 (1H), 7.54 (1H), 7.50 (1H), 7.39 (1H), 7.35 (2H), 7.31 (1H), 7.29 (1H), 7.25 (1H), 7.19 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (1H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H).

[0598] m/z [M+H]⁺ calcd for C₃₉H₂₆BN₂O 551.21; observed 551.45.

[0599] **합성예 3: 화합물 10의 합성**



[0600]

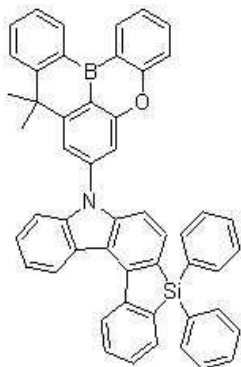
[0601] <화합물 10>

[0602] 8,8-dimethyl-8H-5λ²-benzo[4,5]silolo[2,3-c]carbazole(17.85 g, 59.8 mmol), 화합물 7-3(22.88 g, 61 mmol), copper powder(11.628 g, 183 mmol), potassium carbonate(25.293 g, 193 mmol)를 dimethylformamide(DMF)(120 mL)에 녹이고 140 °C, 질소 분위기에서 24시간 교반하였다. 반응이 종료된 후, 반응물을 소금물에 붓고, 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층은 무수 MgSO₄로 건조시키고, 용매를 제거하여 응축물로 만들었다. 이를 ethyl acetate (EA) : n-hexane 1 : 10 전개액으로 silica gel에 통과시키고, 용매를 제거하여 화합물 10을 얻었다. (16.03 g, 27.0 mmol, 41% 수율)

[0603] ¹H NMR (400MH, CDCl₃, δ): 8.55 (1H), 7.94 (1H), 7.87 (1H), 7.78 (1H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.65 (1H), 7.60 (1H), 7.55 (1H), 7.50 (1H), 7.47 (1H), 7.35 (2H), 7.29 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (1H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H), 0.66 (6H).

[0604] m/z [M+H]⁺ calcd for C₄₁H₃₂BNOSi 593.23; observed 593.61.

[0605] **합성예 4: 화합물 11의 합성**



[0606]

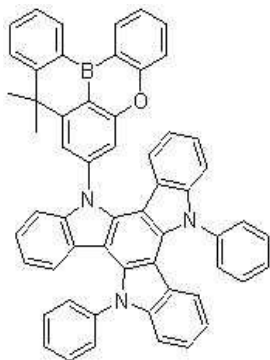
[0607] <화합물 11>

[0608] 8,8-diphenyl-8H-5λ²-benzo[4,5]silolo[2,3-c]carbazole(25.27 g, 59.8 mmol), 화합물 7-3(22.88 g, 61 mmol), copper powder(11.628 g, 183 mmol), potassium carbonate(25.293 g, 193 mmol)를 dimethylformamide(DMF)(120 mL)에 녹이고 140 °C, 질소 분위기에서 24시간 교반하였다. 반응이 종료된 후, 반응물을 소금물에 붓고, 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층은 무수 MgSO₄로 건조시키고, 용매를 제거하여 응축물로 만들었다. 이를 ethyl acetate (EA) : n-hexane 1 : 10 전개액으로 silica gel에 통과시키고, 용매를 제거하여 화합물 11을 얻었다. (17.08 g, 23.8 mmol, 39% 수율)

[0609] ¹H NMR (400MH, CDCl₃, δ): 8.55 (1H), 7.94 (1H), 7.87 (1H), 7.78 (1H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.65 (1H), 7.60 (1H), 7.55 (1H), 7.50 (1H), 7.47 (1H), 7.46 (4H), 7.38 (6H), 7.35 (2H), 7.29 (1H), 7.25 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (1H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H).

[0610] m/z [M+H]⁺ calcd for C₅₁H₃₆BNOSi 717.27; observed 717.75.

[0611] **합성예 5: 화합물 17의 합성**



[0612]

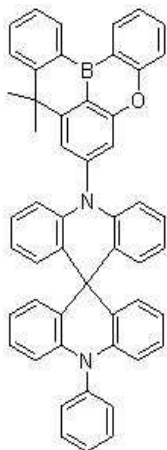
[0613] <화합물 17>

[0614] 5,10-diphenyl-10,15-dihydro-5H-diindolo[3,2-a:3',2'-c]carbazole(29.763 g, 59.8 mmol), 화합물 7-3(22.88 g, 61 mmol), copper powder(11.628 g, 183 mmol), potassium carbonate(25.293 g, 193 mmol)를 dimethylformamide(DMF)(120 mL)에 녹이고 140 °C, 질소 분위기에서 24시간 교반하였다. 반응이 종료된 후, 반응물을 소금물에 붓고, 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층은 무수 MgSO₄로 건조시키고, 용매를 제거하여 응축물로 만들었다. 이를 ethyl acetate (EA) : n-hexane 1 : 10 전개액으로 silica gel에 통과시키고, 용매를 제거하여 화합물 17을 얻었다. (19.32 g, 24.4 mmol, 40% 수율)

[0615] ¹H NMR (400MH, CDCl₃, δ): 8.55 (3H), 7.94 (3H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.62 (4H), 7.58 (2H), 7.50 (5H), 7.29 (1H), 7.25 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (3H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H).

[0616] m/z [M+H]⁺ calcd for C₅₇H₃₈BN₃O 791.31; observed 791.76.

[0617] **합성예 6: 화합물 22의 합성**



[0618]

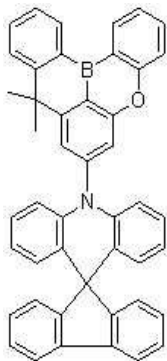
[0619] <화합물 22>

[0620] 10-phenyl-10H,10'H-9,9'-spirobi[acridine](25.27 g, 59.8 mmol), 화합물 7-3(22.88 g, 61 mmol), copper powder(11.628 g, 183 mmol), potassium carbonate(25.293 g, 193 mmol)를 dimethylformamide(DMF)(120 mL)에 녹이고 140 °C, 질소 분위기에서 24시간 교반하였다. 반응이 종료된 후, 반응물을 소금물에 붓고, 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층은 무수 MgSO₄로 건조시키고, 용매를 제거하여 응축물로 만들었다. 이를 ethyl acetate (EA) : n-hexane 1 : 10 전개액으로 silica gel에 통과시키고, 용매를 제거하여 화합물 22을 얻었다. (20.57 g, 28.7 mmol, 47% 수율)

[0621] ¹H NMR (400MH, CDCl₃, δ): 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.35 (1H), 7.29 (1H), 7.25 (1H), 7.24 (2H), 7.19 (4H), 7.18 (1H), 7.17 (4H), 7.14 (4H), 7.08 (2H), 7.07 (1H), 7.00 (2H), 6.99 (1H), 6.95 (4H), 6.76 (1H), 1.69 (6H).

[0622] m/z [M+H]⁺ calcd for C₅₂H₃₇N₂O 716.30; observed 716.69.

[0623] **합성예 7: 화합물 23의 합성**



[0624]

[0625] <화합물 23>

[0626] 10H-spiro[acridine-9,9'-fluorene](19.82 g, 59.8 mmol), 화합물 7-3(22.88 g, 61 mmol), copper powder(11.628 g, 183 mmol), potassium carbonate(25.293 g, 193 mmol)를 dimethylformamide(DMF)(120 mL)에 녹이고 140 °C, 질소 분위기에서 24시간 교반하였다. 반응이 종료된 후, 반응물을 소금물에 붓고, 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층은 무수 MgSO₄로 건조시키고, 용매를 제거하여 응축물로 만들었다. 이를 ethyl acetate (EA) : n-hexane 1 : 10 전개액으로 silica gel에 통과시키고, 용매를 제거하여 화합물 23을 얻었다. (15.26 g, 24.4 mmol, 40% 수율)

[0627] ¹H NMR (400MH, CDCl₃, δ): 7.90 (2H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.55 (2H), 7.38 (2H), 7.35 (1H), 7.29 (1H), 7.28 (2H), 7.25 (1H), 7.19 (2H), 7.18 (1H), 7.17 (2H), 7.14 (2H), 7.07 (1H), 7.00 (1H), 6.99 (1H), 6.95 (2H), 6.76 (2H), 1.69 (6H).

[0628] m/z [M+H]⁺ calcd for C₄₆H₃₂BN₀ 625.26; observed 625.58.

[0629] 상기 합성에 1 내지 7에서 합성된 화합물들의 ¹H NMR 및 MS/FAB을 하기 표 1에 나타내었다.

[0630] 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.

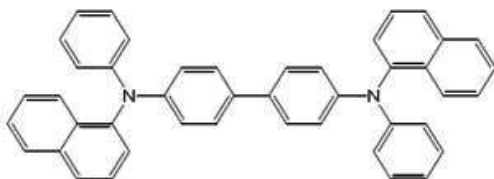
표 1

화합물	¹ H NMR (CDCl ₃ , 400 MHz)	MS/FAB	
		found	calc.
7	8.55 (2H), 7.94 (2H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.62 (2H), 7.58 (2H), 7.50 (3H), 7.35 (3H), 7.29 (1H), 7.26 (1H), 7.25 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (2H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H).	626.57	626.25
8	8.55 (1H), 7.98 (1H), 7.94 (1H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.60 (1H), 7.54 (1H), 7.50 (1H), 7.39 (1H), 7.35 (2H), 7.31 (1H), 7.29 (1H), 7.25 (1H), 7.19 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (1H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H).	551.45	551.21
10	8.55 (1H), 7.94 (1H), 7.87 (1H), 7.78 (1H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.65 (1H), 7.60 (1H), 7.55 (1H), 7.50 (1H), 7.47 (1H), 7.35 (2H), 7.29 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (1H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H), 0.66 (6H).	593.61	593.23
11	8.55 (1H), 7.94 (1H), 7.87 (1H), 7.78 (1H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.65 (1H), 7.60 (1H), 7.55 (1H), 7.50 (1H), 7.47 (1H), 7.46 (4H), 7.38 (6H), 7.35 (2H), 7.29 (1H), 7.25 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (1H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H).	717.75	717.27
17	8.55 (3H), 7.94 (3H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.62 (4H), 7.58 (2H), 7.50 (5H), 7.29 (1H), 7.25 (1H), 7.18 (1H), 7.16 (3H), 7.07 (1H), 7.01 (1H), 7.00 (1H), 1.69 (6H).	791.76	791.31
22	7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.35 (1H), 7.29 (1H), 7.25 (1H), 7.24 (2H), 7.19 (4H), 7.18 (1H), 7.17 (4H), 7.14 (4H), 7.08 (2H), 7.07 (1H), 7.00 (2H), 6.99 (1H), 6.95 (4H), 6.76 (1H), 1.69 (6H).	716.69	716.30
23	7.90 (2H), 7.74 (1H), 7.71 (1H), 7.55 (2H), 7.38 (2H), 7.35 (1H), 7.29 (1H), 7.28 (2H), 7.25 (1H), 7.19 (2H), 7.18 (1H), 7.17 (2H), 7.14 (2H), 7.07 (1H), 7.00 (1H), 6.99 (1H), 6.95 (2H), 6.76 (2H), 1.69 (6H).	625.58	625.26

[0632] 실시예 1

[0633] OLED용 글라스(삼성-코닝사 제품) 기관인 ITO 유리 기관(25 x 25 mm, 15 Ω/ cm²)을, 증류수 및 이소프로판올을 사용하여 초음파 세척을 순차적으로 실시한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하였다. 세정 후의 투명 전극 라인 부착 유리 기관을 진공 증착 장치의 기관 홀더에 장착하고, ITO 전극(애노드) 상에 NPB(N,N'-bis(naphthalen-1-yl)-N,N'-bis(phenyl)benzidine)를 증착하여 40nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, 상기 정공 수송층 상에 mCP와 화합물 7을 중량비 90 : 10으로 공증착하여 20nm 두께의 발광층을 형성한 후, 상기 발광층 상에 TPBi(2,2',2''-(1,3,5-benzinetriyl)-tris(1-phenyl-1Hbenzimidazole))을 증착하여 40nm 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 이어서 상기 전자 수송층 상에 LiF를 증착하여 1nm 두께의 전자 주입층을 형성한 다음, 상기 전자 주입층 상에 Al을 증착하여 100nm 두께의 캐소드를 형성함으로써, 유기 발광 소자를 제작하였다. 증착에 사용한 장비는 선익시스템사의 Suicel plus 200 증착기를 사용하였다.

[0634] <NPB>



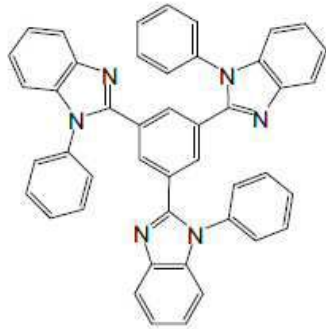
[0635]

[0636] <mCP>



[0637]

[0638] <TPBi>



[0639]

[0640] **실시예 2 내지 7 및 비교예 1 내지 3**

[0641] 발광층 형성시 상기 화합물 7 대신 표 2에 기재된 화합물을 각각 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0642] **[평가예]**

[0643] 상기 실시예 1 내지 7 및 비교예 1 내지 3에서 제작한 유기 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동 전압, 효율, 색순도를 하기 방법을 이용하여 측정하여 그 결과를 표 2에 나타내었다:

[0644] - 색좌표: 전류-전압계(Kethley SMU 236)에서 전원을 공급하고, 휘도계 PR650을 이용하여 측정하였다.

[0645] - 휘도: 전류-전압계(Kethley SMU 236)에서 전원을 공급하고, 휘도계 PR650을 이용하여 측정하였다.

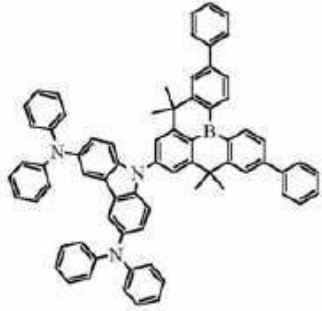
[0646] - 효율: 전류-전압계(Kethley SMU 236)에서 전원을 공급하고, 휘도계 PR650을 이용하여 측정하였다.

표 2

[0647]

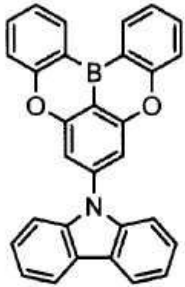
	발광층		구동전압 (V)	외부 양자효율(%)	색좌표	
	호스트	도펀트			CIE _x	CIE _y
실시예 1	mCP	화합물 7	4.4	18.2	0.15	0.12
실시예 2	mCP	화합물 8	4.5	17.5	0.15	0.13
실시예 3	mCP	화합물 10	4.3	16.2	0.15	0.15
실시예 4	mCP	화합물 11	4.4	17.8	0.15	0.12
실시예 5	mCP	화합물 17	4.5	20.2	0.15	0.12
실시예 6	mCP	화합물 22	4.2	18.4	0.15	0.13
실시예 7	mCP	화합물 23	4.4	18.6	0.15	0.13
비교예 1	mCP	화합물A	4.1	17.5	0.17	0.24
비교예 2	mCP	화합물B	4.4	14.2	0.15	0.13
비교예 3	mCP	화합물C	4.6	15.2	0.16	0.18

[0648] <화합물 A>



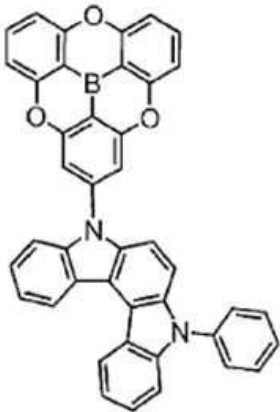
[0649]

[0650] <화합물 B>



[0651]

[0652] <화합물 C>



[0653]

[0654] 표 2에서 보는 바와 같이, 본 발명의 화합물을 발광층에 사용한 경우, 화합물 B 및 C을 사용한 경우와 비교해서, 유기 발광 소자의 구동전압이 개선되고 외부 양자 효율이 향상되는 결과를 나타내었다. 또한, 본 발명의 화합물을 발광층에 사용한 경우, 화합물 A 및 C를 사용한 경우 보다 우수한 색순도가 나타나는 것을 알 수 있다.

[0655] 즉, 본 발명의 화합물이 소자의 발광층 재료로 사용될 경우, 구동전압, 효율과 색순도 측면에서 우수한 효과를 발휘할 수 있음을 알 수 있다.

[0656] 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

[0657] 10, 20, 30, 40: 유기 발광 소자

110: 제1전극

- 150: 유기층
- 190: 제2전극
- 210: 제1캐핑층
- 220: 제2캐핑층

도면

도면1

10

190
150
110

도면2

20

190
150
110
210

도면3

30

220
190
150
110

도면4

40

220
190
150
110
210

专利名称(译)	稠环化合物和包括该稠环化合物的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020190141052A	公开(公告)日	2019-12-23
申请号	KR1020180067527	申请日	2018-06-12
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	김세훈 유재진		
发明人	김세훈 유재진		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/008 H01L51/0094 H01L51/5012 H01L51/5024 C09K2211/1096 C09K2211/181 C07F5/027 C07F7/0803 C09K2211/1029 C09K2211/1092 H01L51/0071 H01L51/0072 C07F7/0816 C07F5/02 H01L51/5004 H01L51/5056 H01L51/5072		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

稠环化合物和包括该稠环化合物的有机发光器件技术领域本发明涉及稠环化合物和包括该稠环化合物的有机发光器件。该有机发光器件包括：第一电极；以及第二电极。与第一电极相对的第二电极；有机层设置在第一电极和第二电极之间并包括发光层。

10

190
150
110