



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0062465
(43) 공개일자 2020년06월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0094 (2013.01)
C07F 7/0812 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0147692
(22) 출원일자 2018년11월26일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
안희춘
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
김형민
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

헤테로시클릭 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1

10

190
150
110

(52) CPC특허분류
H01L 51/5024 (2013.01)

(72) 발명자
엄현아
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

이예슬
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

임이랑
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

고수병
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

김영국
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

명세서

청구범위

청구항 1

제1전극;

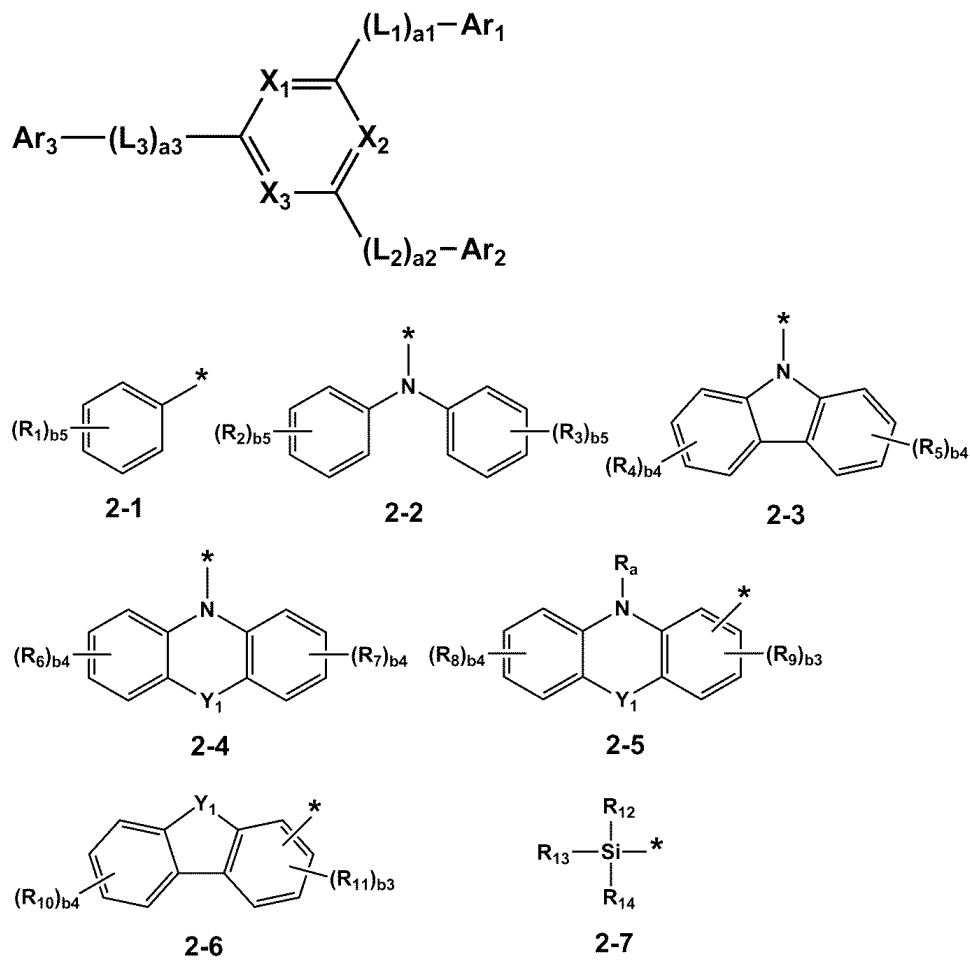
상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

하기 화학식 1로 표시된 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 1>



상기 화학식 1 및 2-1 내지 2-7 중,

X₁ 내지 X₃은 서로 독립적으로, N 또는 C(R₁₅)이고, 단, X₁ 내지 X₃ 중 적어도 하나는 N이고,

L₁ 내지 L₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

a₁ 내지 a₃은 서로 독립적으로, 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중에서 선택된 어느 하나로 표시된 그룹이고,

R₁ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 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 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

b₃는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고, b₄는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고, b₅는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

단, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물에 포함된 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중 어느 하나로 표시된 그룹의 치환기 R₁ 내지 R₁₁ 중 적어도 하나는, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃)이고,

단, 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a₁은 0이고, 상기 Ar₂가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a₂는 0이고, 상기 Ar₃가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a₃은 0이고,

단, 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₂ 및 Ar₃는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₂ 및 L₃는 벤젠 그룹이 아니고, 상기 Ar₂가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₁ 및 Ar₃는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₁ 및 L₃는 벤젠 그룹이 아니고, 상기 Ar₃가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₁ 및 Ar₂는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₁ 및 L₂는 벤젠 그룹이 아니고,

단, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃가 모두 화학식 2-1로 표시된 그룹인 경우는 배제되고,

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

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

중수소, -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, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기;

중수소, -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, 1

가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, $-\text{Si}(\text{Q}_{21})(\text{Q}_{22})(\text{Q}_{23})$, $-\text{N}(\text{Q}_{21})(\text{Q}_{22})$, $-\text{B}(\text{Q}_{21})(\text{Q}_{22})$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{21})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{21})$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{21})(\text{Q}_{22})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

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

중에서 선택되고,

상기 Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 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} 알킬기로 치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

중수소, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{60} 알킬기 및 $-\text{Si}(\text{R}_a)(\text{R}_b)(\text{R}_c)$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_1 - C_{60} 알킬기로 치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 중에서 선택되고,

상기 R_a 내지 R_c 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

*은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

상기 유기층은 상기 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함하고,

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

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

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

청구항 3

제1항에 있어서,
 상기 발광층은 도펀트 및 호스트를 포함하고,
 상기 호스트는 상기 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

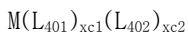
청구항 4

제3항에 있어서,
 상기 도펀트는 인광 도펀트인, 유기 발광 소자.

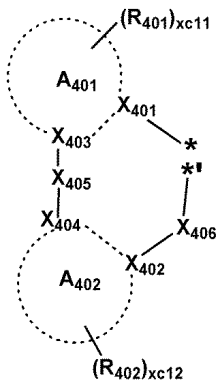
청구항 5

제3항에 있어서,
 상기 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 401>



<화학식 402>



상기 화학식 401 및 402 중,

M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 로듐(Rh) 및 툴륨(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(Q₄₁₁)=*이고, 상기 Q₄₁₁ 및 Q₄₁₂는, 수소, 중수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,

X₄₀₆은 단일 결합, O 또는 S이고,

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

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

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

청구항 6

제2항에 있어서,

상기 정공 수송 영역이 LUMO 에너지 준위가 -3.5eV 보다 낮은 p-도펀트를 더 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 7

제2항에 있어서,

상기 전자 수송 영역은, 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 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 발광층은 제1색광 방출-발광층이고,

상기 제1전극과 제2전극 사이에, i) 적어도 하나의 제2색광 방출-발광층이 추가로 포함되어 있거나, ii) 적어도 하나의 제2색광 방출-발광층 및 적어도 하나의 제3색광 방출-발광층이 추가로 포함되어 있고,

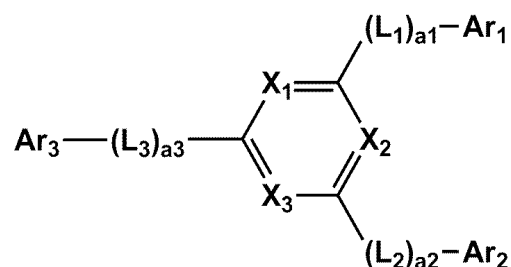
상기 제1색광의 최대 발광 파장, 상기 제2색광의 최대 발광 파장 및 상기 제3색광의 최대 발광 파장은 서로 동일하거나 상이하고,

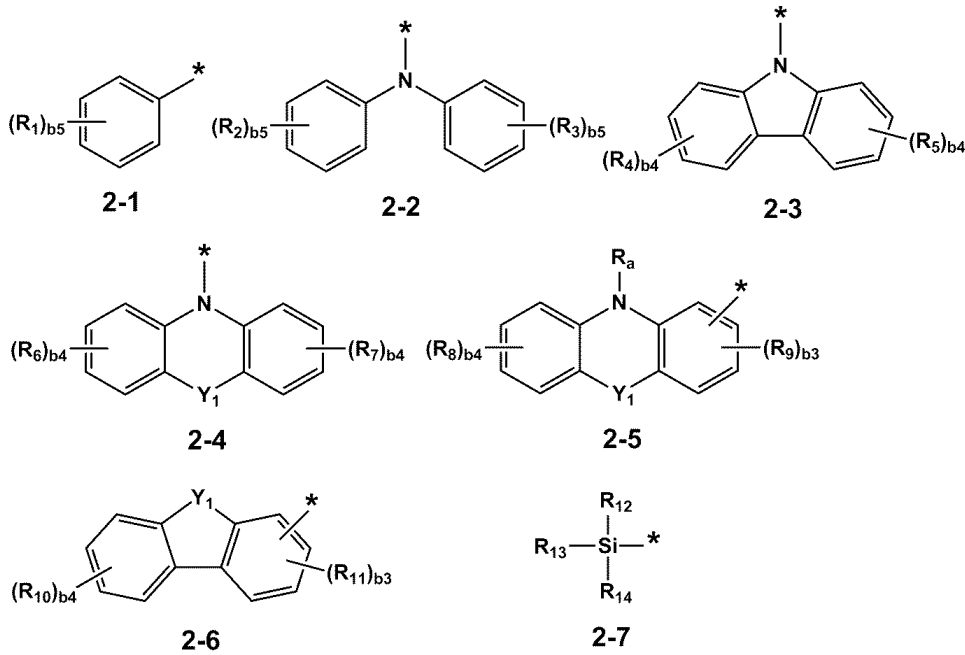
상기 제1색광과 상기 제2색광이 서로 혼합된 혼색광 또는 상기 제1색광, 상기 제2색광 및 상기 제3색광이 서로 혼합된 혼색광이 방출되는, 유기 발광 소자.

청구항 9

하기 화학식 1로 표시된 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 1>





상기 화학식 1 및 2-1 내지 2-7 중,

X_1 내지 X_3 은 서로 독립적으로, N 또는 C(R_{15})이고, 단, X_1 내지 X_3 중 적어도 하나는 N이고,

L_1 내지 L_3 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

a_1 내지 a_3 은 서로 독립적으로, 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중에서 선택된 어느 하나로 표시된 그룹이고,

R_1 내지 R_{15} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-S(=O)_2(Q_1)$ 및 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되고,

b_3 는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고, b_4 는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고, b_5 는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

단, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물에 포함된 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중 어느 하나로 표시된 그룹의 치환기 R_1 내지 R_{11} 중 적어도 하나는, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 이고,

단, 상기 Ar_1 이 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a_1 은 0이고, 상기 Ar_2 가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a_2 는 0이고, 상기 Ar_3 가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a_3 은 0이고,

단, 상기 Ar_1 이 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar_2 및 Ar_3 는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L_2 및 L_3 는 벤젠 그룹이 아니고, 상기 Ar_2 가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar_1 및 Ar_3 는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L_1 및 L_3 는 벤젠 그룹이 아니고, 상기 Ar_3 가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우,

Ar₁ 및 Ar₂는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₁ 및 L₂는 벤젠 그룹이 아니고,

단, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃가 모두 화학식 2-1로 표시된 그룹인 경우는 배제되고,

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

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

중수소, -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, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기;

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

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

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기 및 -Si(R_a)(R_b)(R_c) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 중에서 선택되고,

상기 R_a 내지 R_c는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 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 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

*은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로,

벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 스파이로-벤조플루오렌-플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 실롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 및 이미다조피리미딘 그룹;

중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴기레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -B(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 스파이로-벤조플루오렌-플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 실롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 및 이미다조피리미딘 그룹;

중에서 선택되고,

Q₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 및 피리디닐기 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 11

제9항에 있어서,

상기 L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 하기 화학식 3-1 내지 3-27로 표시된 그룹 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:

d2는 0 내지 2의 정수이고,

d3는 0 내지 3의 정수이고,

d4는 0 내지 4의 정수이고,

d6는 0 내지 6의 정수이고,

d8은 0 내지 8의 정수이고,

* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 12

제9항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₃ 중 적어도 하나는, 나머지 둘과 상이한 그룹인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 13

제9항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₃ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2-2 내지 2-4 중에서 선택된 어느 하나로 표시된 그룹인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 14

제9항에 있어서,

- i) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-2로 표시된 그룹이거나;
- ii) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이거나;
- iii) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-4로 표시된 그룹이거나;
- iv) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₂ 및 Ar₃가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이거나;
- v) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₂ 및 Ar₃가 상기 화학식 2-4로 표시된 그룹이거나;
- vi) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-6으로 표시된 그룹이거나;
- vii) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₂가 상기 화학식 2-2로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이거나; 또는
- viii) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₂가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-6으로 표시된 그룹인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 15

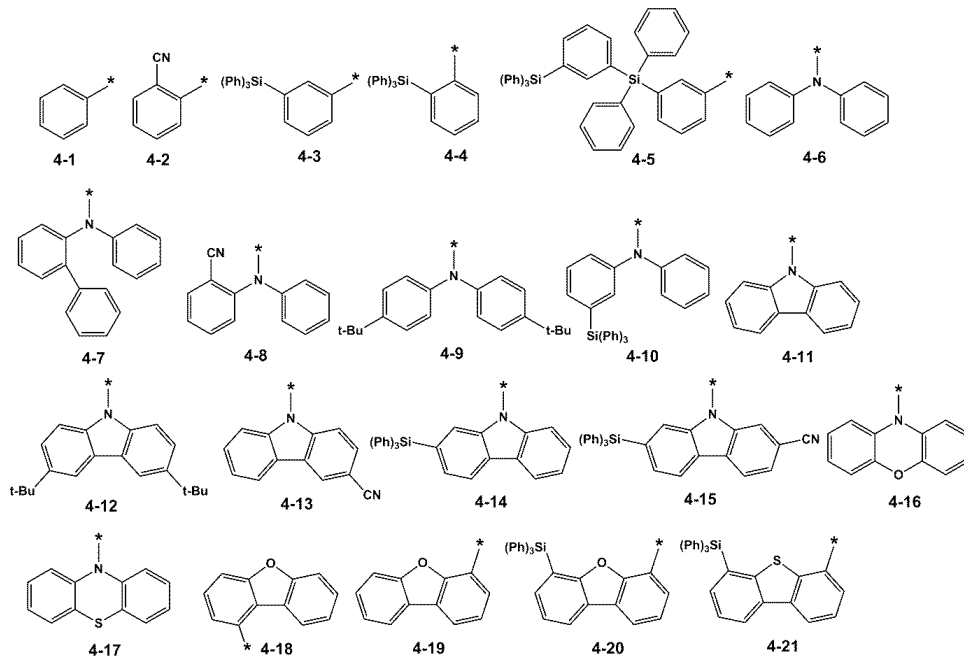
제9항에 있어서,

- i) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹인 경우, b5개의 R₁ 중 하나 이상은 -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃)이고,
- ii) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-6으로 표시된 그룹인 경우, b4개의 R₁₀ 및 b3개의 R₁₁ 중 하나 이상은 -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃)인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 16

제9항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1(1) 내지 2-1(3), 2-2(1) 내지 2-2(2), 2-3(1) 내지 2-3(2), 2-4(1) 내지 2-4(2) 및 2-6(1) 내지 2-6(4) 중에서 선택된 어느 하나로 표시된 그룹인, 헤테로시클릭 화



상기 화학식 4-1 내지 4-21 중,

Ph는 페닐기이고, t-Bu는 tert-부틸기이다.

청구항 19

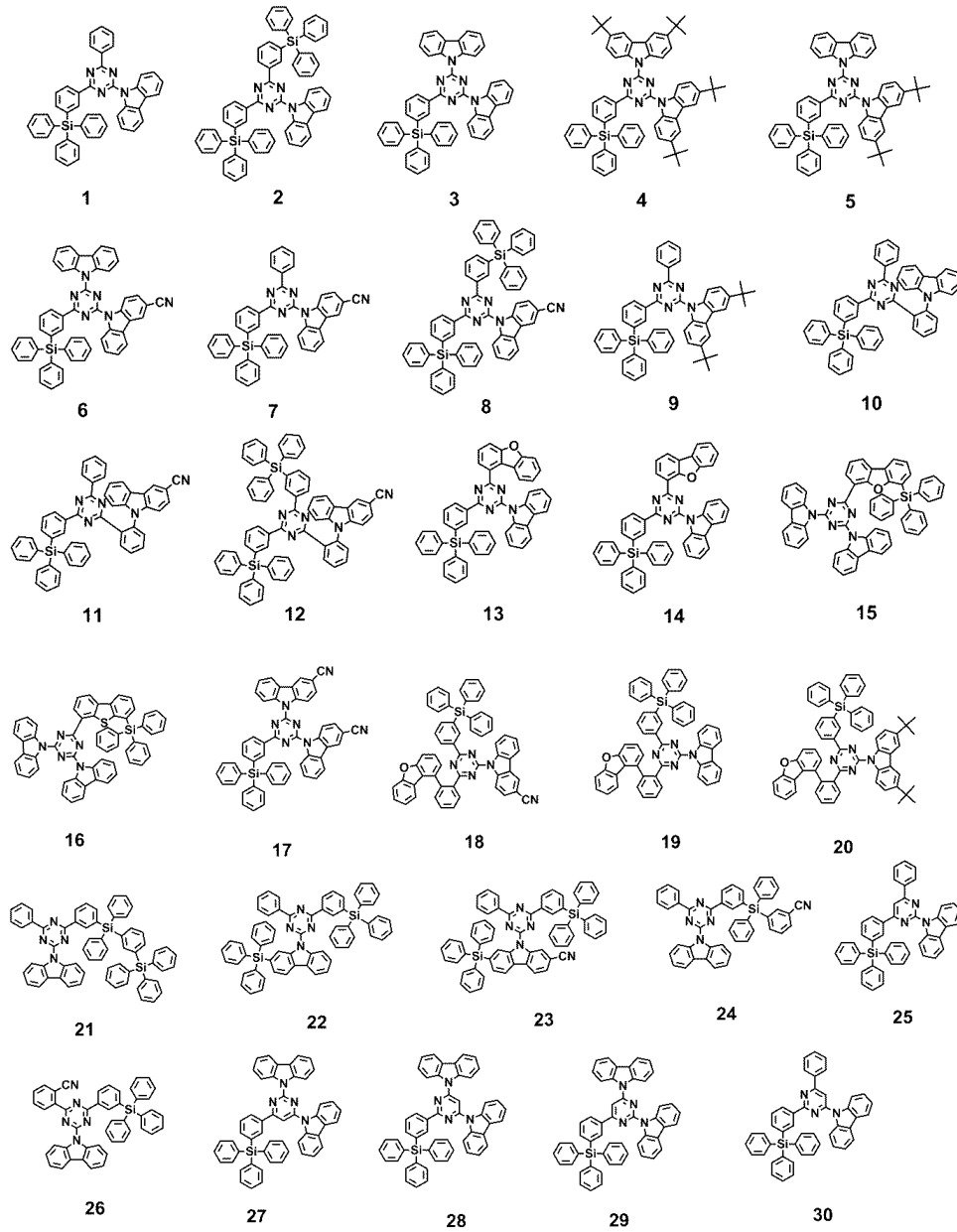
제9항에 있어서,

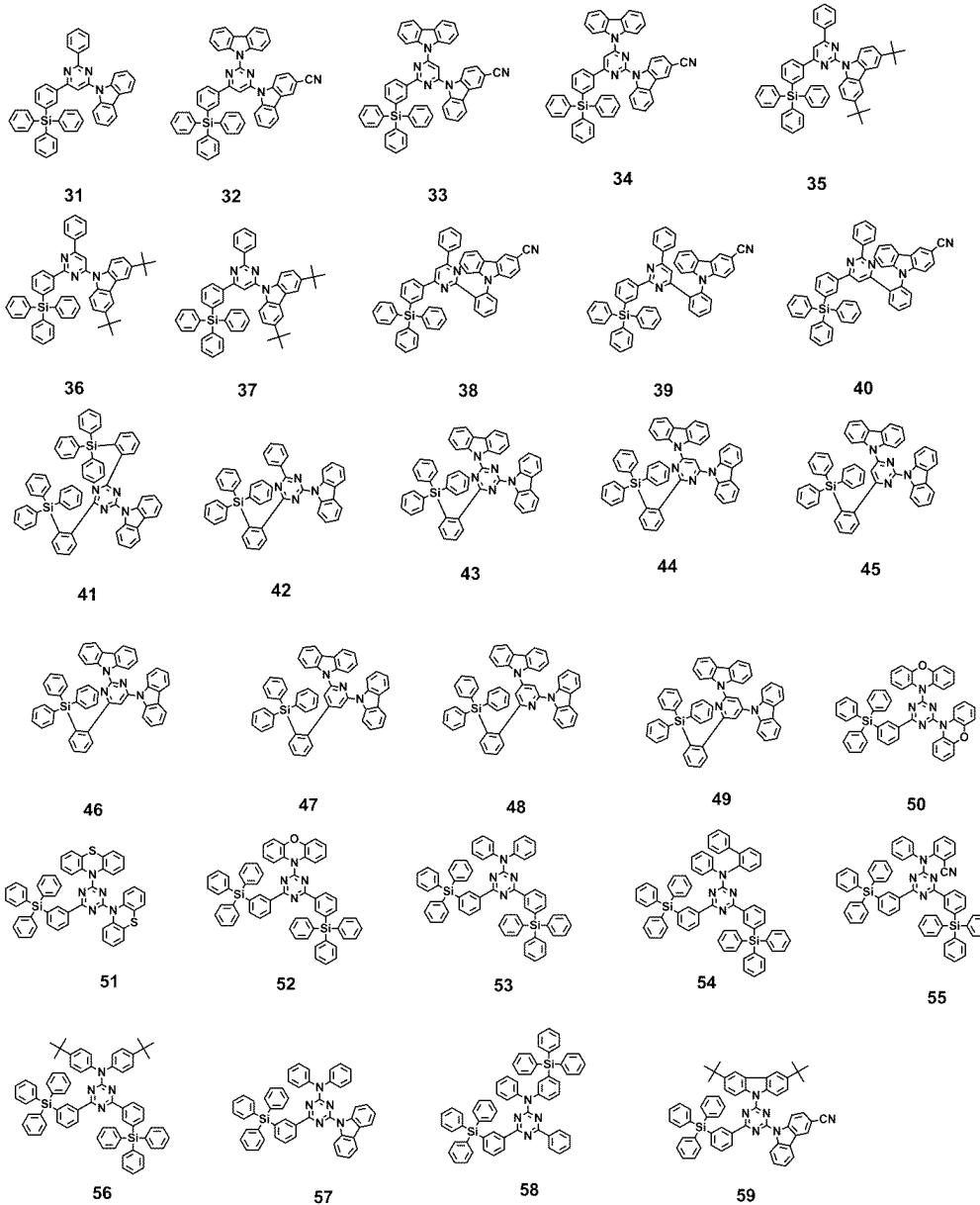
- i) 상기 X₁ 내지 X₃는 N이거나;
 - ii) 상기 X₁ 및 X₂는 N이고, X₃는 C(R₁₅)이거나;
 - iii) 상기 X₁ 및 X₃는 N이고, X₂는 C(R₁₅)이거나;
 - iv) 상기 X₂ 및 X₃는 N이고, X₁은 C(R₁₅)이거나;
 - v) 상기 X₁은 N이고, X₂ 및 X₃는 C(R₁₅)이거나;
 - vi) 상기 X₂는 N이고, X₁ 및 X₃는 C(R₁₅)이거나; 또는
 - vii) 상기 X₃는 N이고, X₁ 및 X₂는 C(R₁₅)이고,
- 상기 R₁₅는 수소인, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 20

제9항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 59 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:





발명의 설명

기술분야

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

배경기술

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

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

발명의 내용

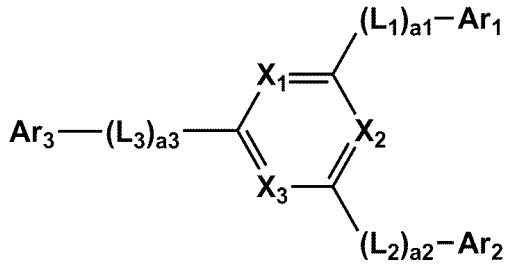
해결하려는 과제

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

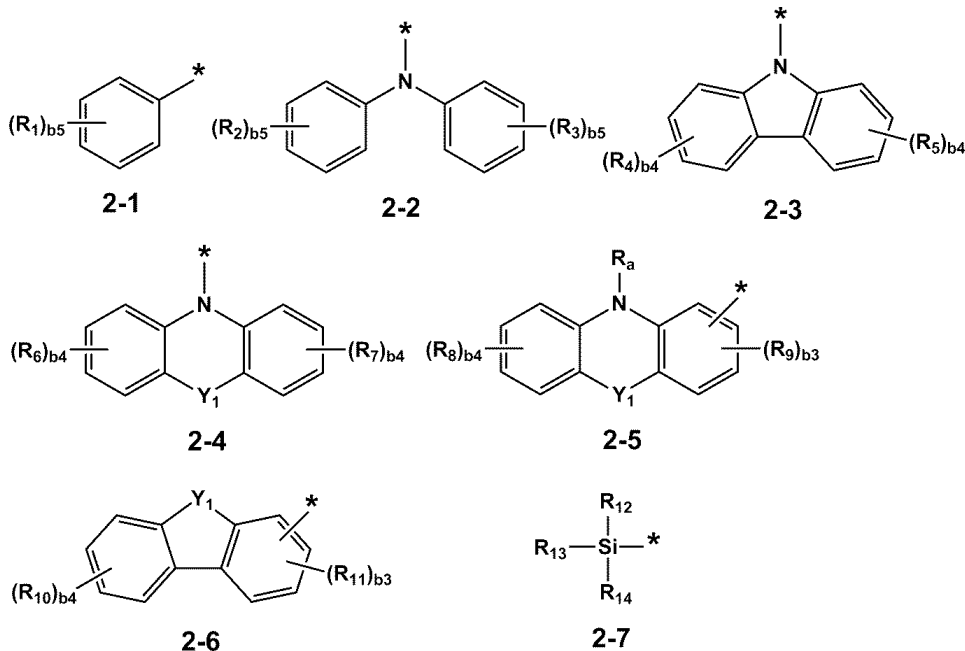
과제의 해결 수단

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

[0006] <화학식 1>



[0007]



[0008]

[0009] 상기 화학식 1 및 2-1 내지 2-7 중,

[0010] X₁ 내지 X₃은 서로 독립적으로, N 또는 C(R₁₅)이고, 단, X₁ 내지 X₃ 중 적어도 하나는 N이고,

[0011] L₁ 내지 L₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0012] a₁ 내지 a₃은 서로 독립적으로, 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

[0013] Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중에서 선택된 어느 하나로 표시된 그룹이고,

[0014] R₁ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 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 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는

비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

[0015] b3는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고, b4는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고, b5는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

[0016] 단, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물에 포함된 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중 어느 하나로 표시된 그룹의 치환기 R₁ 내지 R₁₁ 중 적어도 하나는, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃)이고,

[0017] 단, 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a1은 0이고, 상기 Ar₂가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a2는 0이고, 상기 Ar₃가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a3은 0이고,

[0018] 단, 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₂ 및 Ar₃는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₂ 및 L₃는 벤젠 그룹이 아니고, 상기 Ar₂가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₁ 및 Ar₃는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₁ 및 L₃는 벤젠 그룹이 아니고, 상기 Ar₃가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₁ 및 Ar₂는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₁ 및 L₂는 벤젠 그룹이 아니고,

[0019] 단, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃가 모두 화학식 2-1로 표시된 그룹인 경우는 배제되고,

[0020] 상기 치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0021] 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0022] 중수소, -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;

[0023] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기;

[0024] 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -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, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

[0025] $-\text{Si}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})(\text{Q}_{33})$, $-\text{N}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{B}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{31})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{31})$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$;

[0026] 중에서 선택되고,

[0027] 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, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 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, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기로 치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

[0028] 중수소, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기 및 $-\text{Si}(\text{R}_a)(\text{R}_b)(\text{R}_c)$ 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, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 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, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기로 치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 중에서 선택되고,

[0029] 상기 R_a 내지 R_c 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 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 $\text{C}_2\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_2\text{-C}_{10}$ 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 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0030] *은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0031] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상술한 바와 같은 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0032] 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고휘도, 고효율 및 장수명을 가질 수 있다.

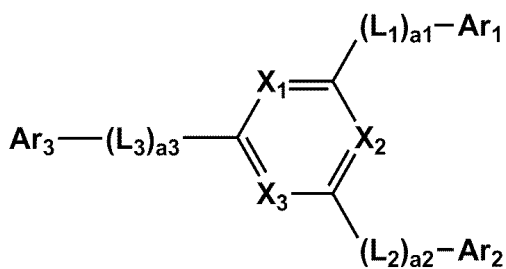
도면의 간단한 설명

[0033] 도 1 내지 4는 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 각각 나타낸 도면이다.

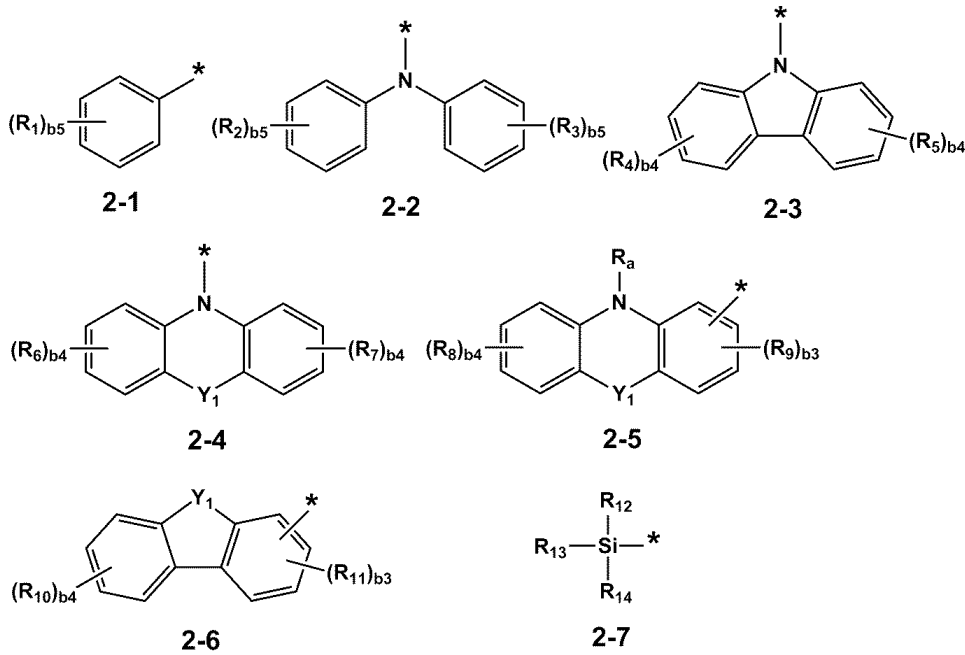
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0034] 상기 헤테로시클릭 화합물은, 하기 화학식 1로 표시된다:

[0035] <화학식 1>



[0036]



[0037]

[0038]

상기 화학식 1 및 2-1 내지 2-7 중,

[0039]

X₁ 내지 X₃은 서로 독립적으로, N 또는 C(R₁₅)이고, 단, X₁ 내지 X₃ 중 적어도 하나는 N이다.

[0040]

상기 화학식 1 중, L₁ 내지 L₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이다.

[0041]

일 구현예를 따르면, 상기 L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로,

[0042]

벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 스파이로-벤조플루오렌-플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 실롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 및 이미다조피리미딘 그룹;

[0043]

중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로헵틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵텐닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴기레닐기, 펜타페닐기, 핵사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -B(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 펜탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 스파이로-벤조플루오렌-플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 실롤 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 및 이미다조피리미딘 그룹;

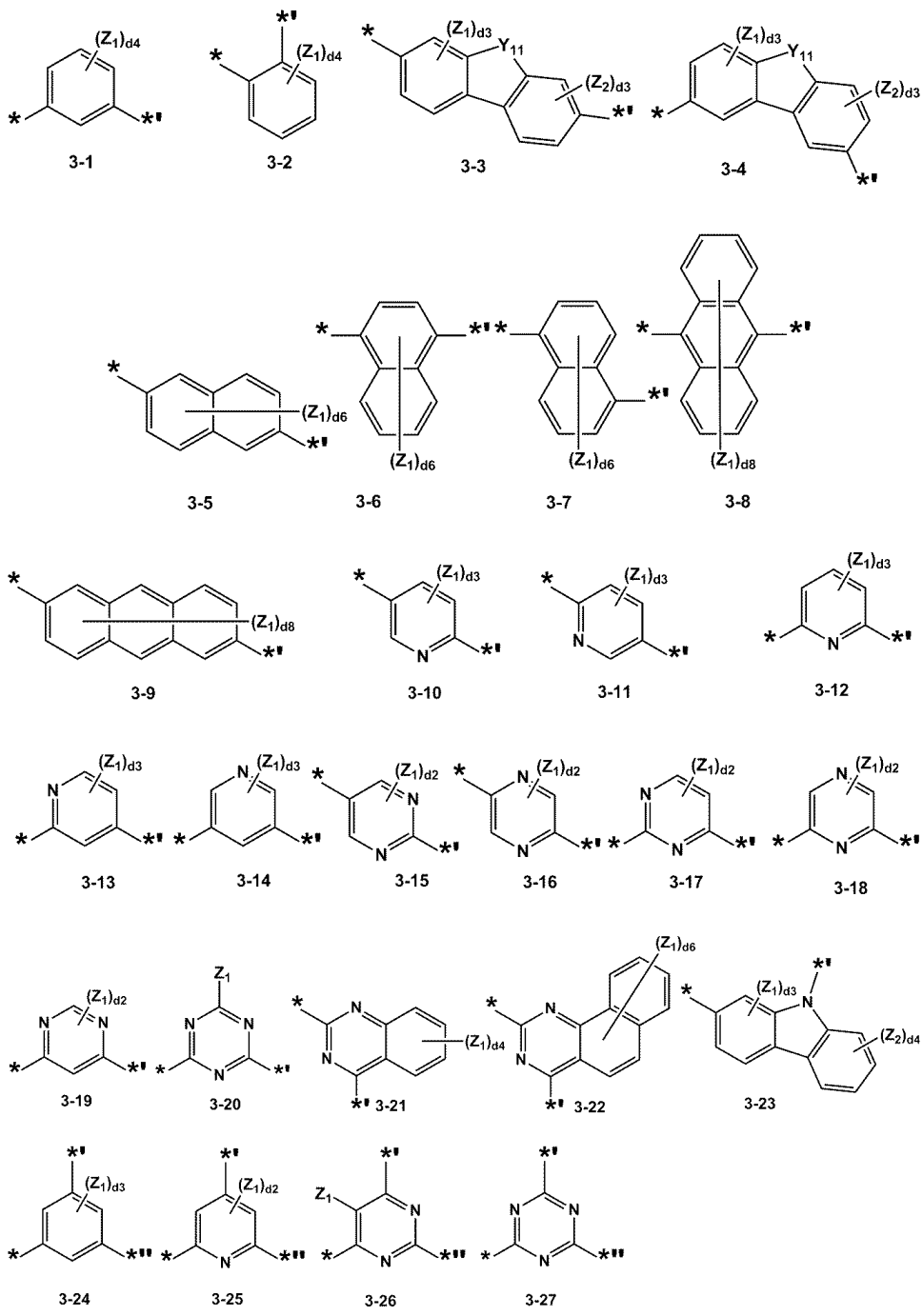
[0044]

중에서 선택되고,

[0045] Q₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0046] 예를 들어, 상기 L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹; 및 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, 벤젠 그룹; 중에서 선택될 수 있다.

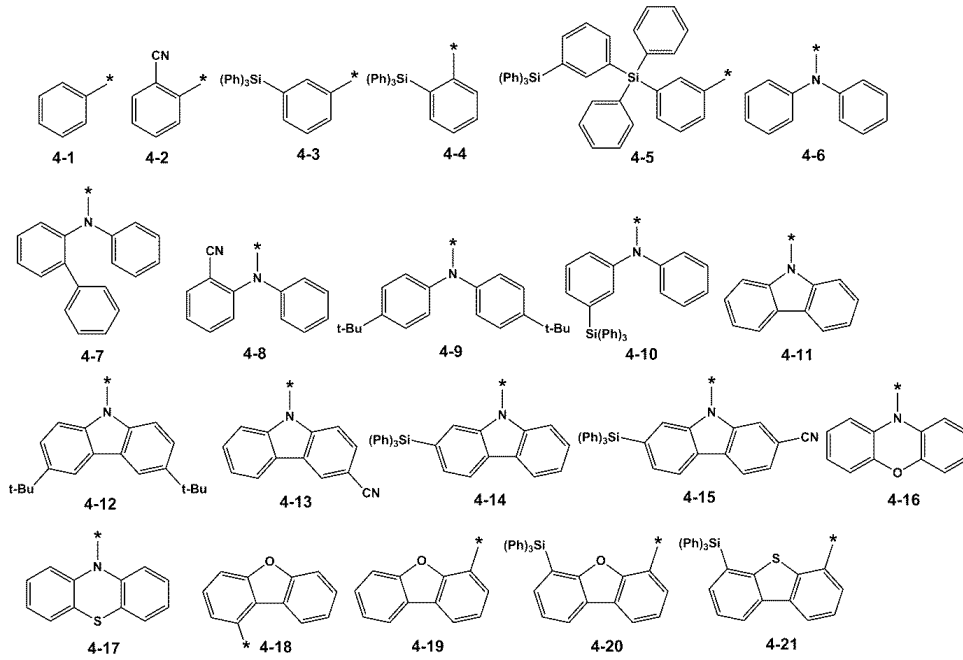
[0047] 일 구현예를 따르면, 상기 L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 하기 화학식 3-1 내지 3-27로 표시된 그룹 중에서 선택될 수 있다:



[0050]

- [0051] 상기 화학식 3-1 내지 3-27 중,
- [0052] Y_{11} 은 $C(Z_3)(Z_4)$, $N(Z_5)$, $Si(Z_6)(Z_7)$, O 및 S 중 선택되고,
- [0053] Z_1 내지 Z_7 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헥테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 디벤조실롤일기, 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택되고,
- [0054] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 및 피리디닐기 중에서 선택되고,
- [0055] d_2 는 0 내지 2의 정수이고,
- [0056] d_3 는 0 내지 3의 정수이고,
- [0057] d_4 는 0 내지 4의 정수이고,
- [0058] d_6 는 0 내지 6의 정수이고,
- [0059] d_8 은 0 내지 8의 정수이고,
- [0060] * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0061] 예를 들어, 상기 L_1 내지 L_3 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 3-1 및 3-2 중 어느 하나로 표시된 그룹일 수 있다.
- [0062] 상기 화학식 1 중, a_1 내지 a_3 은 서로 독립적으로, 0 내지 3 중에서 선택된 정수이다.
- [0063] 일 구현예를 따르면, 상기 a_1 내지 a_3 은 서로 독립적으로, 0 또는 1일 수 있다.
- [0064] 상기 화학식 1 중, Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중에서 선택된 어느 하나로 표시된 그룹이고,
- [0065] 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중, 상기 R_1 내지 R_{15} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-S(=O)_2(Q_1)$ 및 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되고,
- [0066] b_3 는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고, b_4 는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고, b_5 는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고,
- [0067] 단, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물에 포함된 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중 어느 하나로 표시된 그룹의 치환기 R_1 내지 R_{11} 중 적어도 하나는, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 이고,
- [0068] 단, 상기 Ar_1 이 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a_1 은 0이고, 상기 Ar_2 가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a_2 는 0이고, 상기 Ar_3 가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, a_3 은 0이고,

- [0069] 단, 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₂ 및 Ar₃는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₂ 및 L₃는 벤젠 그룹이 아니고, 상기 Ar₂가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₁ 및 Ar₃는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₁ 및 L₃는 벤젠 그룹이 아니고, 상기 Ar₃가 상기 화학식 2-7로 표시되는 그룹인 경우, Ar₁ 및 Ar₂는 화학식 2-1로 표시된 그룹이 아니고, L₁ 및 L₂는 벤젠 그룹이 아니고,
- [0070] 단, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃가 모두 화학식 2-1로 표시된 그룹인 경우는 배제된다.
- [0071] 일 구현예를 따르면, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃ 중 적어도 하나는, 나머지 둘과 상이한 그룹일 수 있다.
- [0072] 일 구현예를 따르면, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2-2 내지 2-4 중에서 선택된 어느 하나로 표시된 그룹일 수 있다.
- [0073] 예를 들어, i) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-2로 표시된 그룹이거나;
- [0074] ii) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이거나;
- [0075] iii) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-4로 표시된 그룹이거나;
- [0076] iv) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₂ 및 Ar₃가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이거나;
- [0077] v) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₂ 및 Ar₃가 상기 화학식 2-4로 표시된 그룹이거나;
- [0078] vi) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-6으로 표시된 그룹이거나;
- [0079] vii) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₂가 상기 화학식 2-2로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이거나; 또는
- [0080] viii) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹이고, Ar₂가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이고, Ar₃가 상기 화학식 2-6으로 표시된 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0081] 일 구현예를 따르면, i) 상기 Ar₁이 상기 화학식 2-1로 표시된 그룹인 경우, b5개의 R₁ 중 하나 이상은 -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃)이고,
- [0082] ii) 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 상기 화학식 2-3으로 표시된 그룹이고, Ar₃가 화학식 2-6으로 표시된 그룹인 경우, b4개의 R₁₀ 및 b3개의 R₁₁ 중 하나 이상은 -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃)일 수 있다.
- [0083] 다른 구현예를 따르면, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로, 하기 화학식 2-1(1) 내지 2-1(3), 2-2(1) 내지 2-2(2), 2-3(1) 내지 2-3(2), 2-4(1) 내지 2-4(2) 및 2-6(1) 내지 2-6(4) 중에서 선택된 어느 하나로 표시된 그룹일 수 있다:



[0095]

상기 화학식 4-1 내지 4-21 중,

[0096]

Ph는 페닐기이고, t-Bu는 tert-부틸기이다.

[0097]

예를 들어, 상기 화학식 2-1 내지 2-7 중, b3, b4 및 b5는 서로 독립적으로 0 또는 1일 수 있다.

[0098]

일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, R₁ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로, 수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 및 -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 중에서 선택될 수 있다.

[0099]

예를 들어, 상기 R₁ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로, 수소, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 및 페닐기; 및

[0100]

중수소, -F, -Cl, -Br 및 -I 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 및 페닐기; 중에서 선택될 수 있다.

[0101]

일 구현예를 따르면, i) 상기 X₁ 내지 X₃는 N이거나; ii) 상기 X₁ 및 X₂는 N이고, X₃는 C(R₁₅)이거나; iii) 상기 X₁ 및 X₃는 N이고, X₂는 C(R₁₅)이거나; iv) 상기 X₂ 및 X₃는 N이고, X₁은 C(R₁₅)이거나; v) 상기 X₁은 N이고, X₂ 및 X₃는 C(R₁₅)이거나; vi) 상기 X₂는 N이고, X₁ 및 X₃는 C(R₁₅)이거나; 또는 vii) 상기 X₃는 N이고, X₁ 및 X₂는 C(R₁₅)이고, 상기 R₁₅는 수소일 수 있다.

[0102]

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

[0103]

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

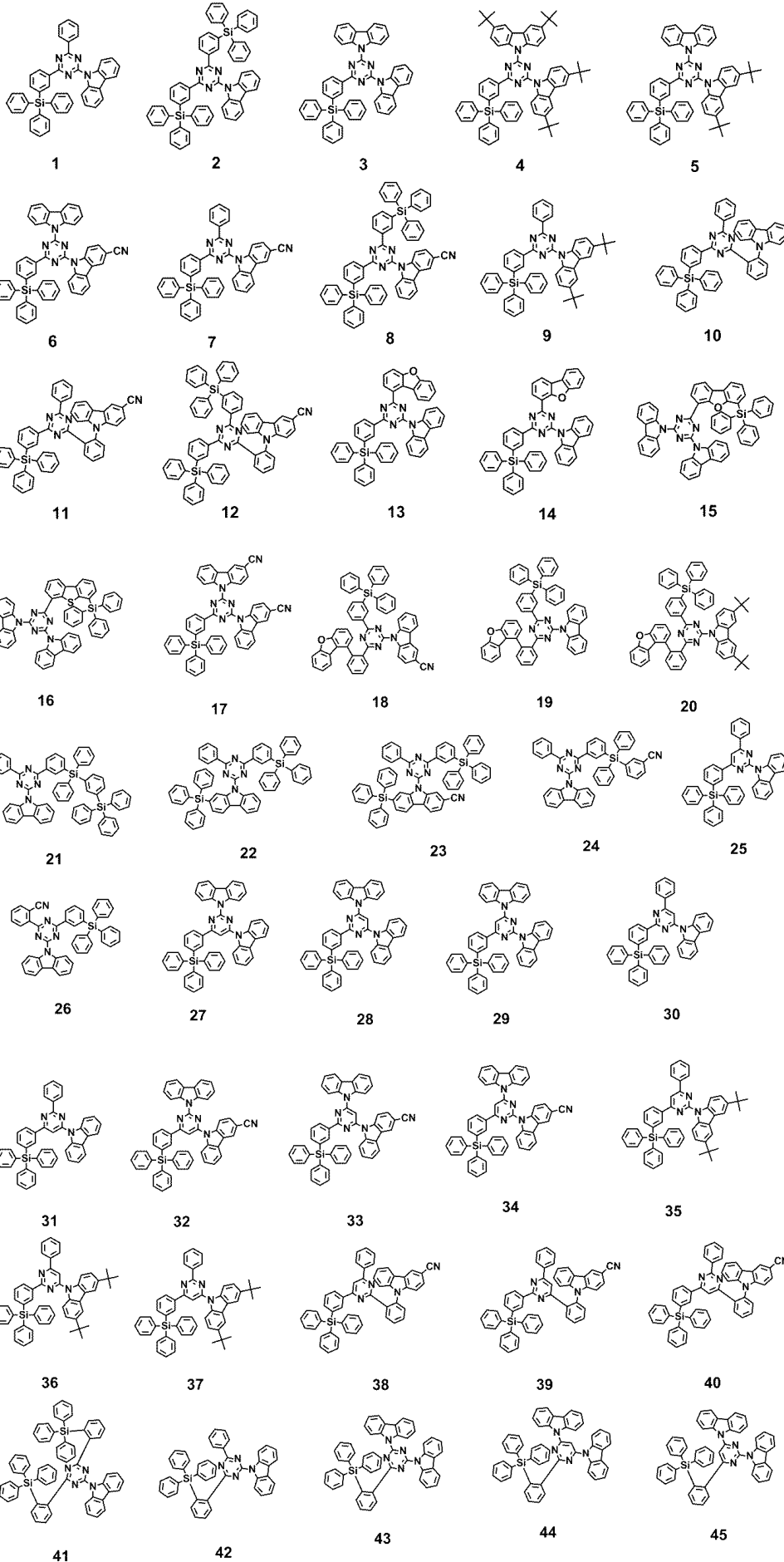
[0104]

중수소, -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 선택

[0105]

된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

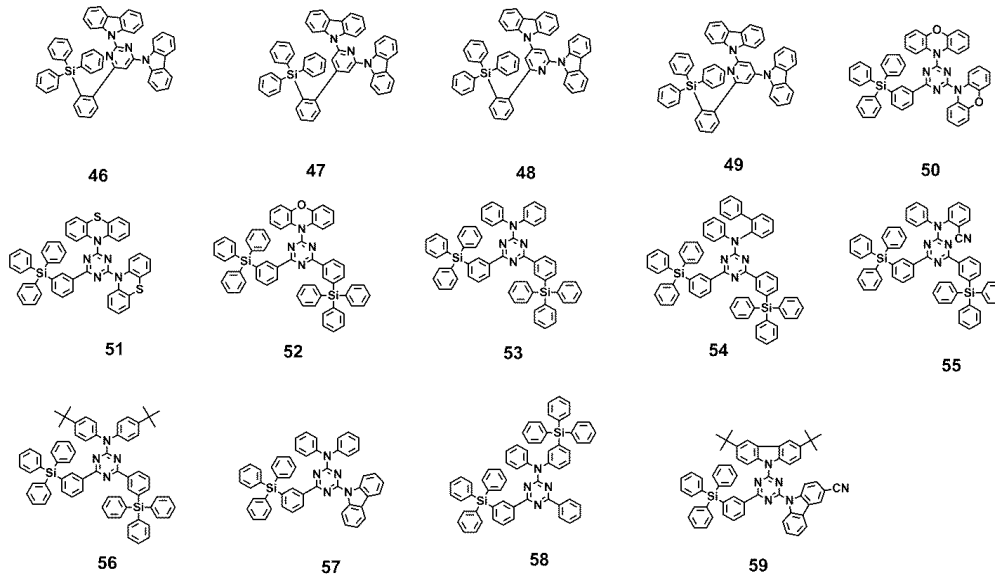
- [0106] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기;
- [0107] 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -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, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및
- [0108] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0109] 중에서 선택되고,
- [0110] 상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및
- [0111] 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기 및 -Si(R_a)(R_b)(R_c) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 중에서 선택되고,
- [0112] 상기 R_a 내지 R_c는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 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 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.
- [0113] 일 구현예에 따르면, 상기 헤테로시클릭 화합물은 하기 화합물 1 내지 59 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0114]

[0115]

[0116]



- [0117]
- [0118] 상기 헤테로시클릭 화합물은 N을 하나 이상 포함하는 아진계 코어를 가지면서, 상기 화학식 2-1 내지 2-7로 표시된 그룹과 같이, 크기가 큰 치환기들을 포함하여, 입체 장애를 통해 분자간 인력을 낮추어, 상대적으로 높은 삼중항 에너지를 가짐으로써, 인광 호스트로 적합할 수 있다.
- [0119] 한편, 상기 헤테로시클릭 화합물은 아진계 코어의 치환기 중 실릴기가 치환된 벤젠 그룹을 포함할 경우, 실릴기가 아진계 코어의 연결 위치에 대해 ortho 또는 meta 위치에서 치환됨으로써, para 위치에 치환되는 경우에 비해 삼중항 에너지 준위 차이를 높일 수 있어, 우수한 인광 발광이 가능하다.
- [0120] 따라서, 상기 화학식 1로 표시된 헤테로시클릭 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는, 저구동 전압, 고효율 및 장수명을 가질 수 있다.
- [0121] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0122] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 헤테로시클릭 화합물은 발광층에 포함될 수 있다. 또는, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극의 외측에 위치한 캡핑층 재료로 사용될 수 있다.
- [0123] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0124] 본 명세서 중 "(유기층이) 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 헤테로시클릭 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0125] 예를 들어, 상기 유기층은, 상기 헤테로시클릭 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 헤테로시클릭 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1은 발광층에 존재하고 상기 화합물 2는 전자 수송층에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0126] 일 구현예에 따르면,
- [0127] 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 애노드이고,
- [0128] 상기 유기 발광 소자의 제2전극은 캐소드이고,
- [0129] 상기 유기층은 상기 화학식 1로 표시된 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함하고,
- [0130] 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이

에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고,

[0131] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,

[0132] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0133] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층에 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물이 포함될 수 있다.

[0134] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층은 도펀트 및 호스트를 포함하고,

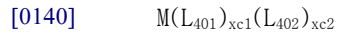
[0135] 상기 호스트는 상기 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0136] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층 100중량부 당 상기 헤테로시클릭 화합물의 함량이 50중량부 내지 99.9중량부 일 수 있다.

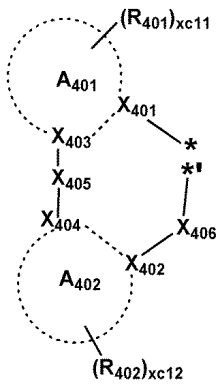
[0137] 예를 들어, 상기 도펀트는 인광 도펀트일 수 있다.

[0138] 일 구현예를 따르면, 상기 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함할 수 있다:

[0139] <화학식 401>



[0141] <화학식 402>



[0142] 상기 화학식 401 및 402 중,

[0144] M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 로듐(Rh) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고,

[0145] L₄₀₁은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, xc1은 1, 2 또는 3이고, xc1이 2 이상일 경우 2 이상의 L₄₀₁은 서로 동일하거나 상이하고,

[0146] L₄₀₂는 유기 리간드이고, xc2는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, xc2가 2 이상일 경우 2 이상의 L₄₀₂는 서로 동일하거나 상이하고,

[0147] X₄₀₁ 내지 X₄₀₄는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

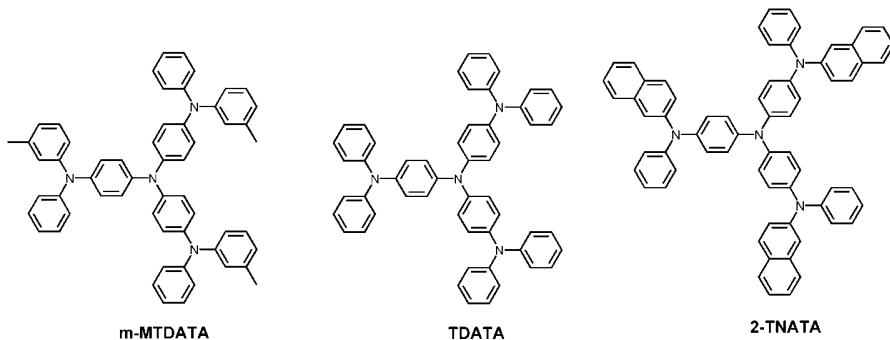
[0148] X₄₀₁과 X₄₀₃은 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고, X₄₀₂와 X₄₀₄는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,

[0149] A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

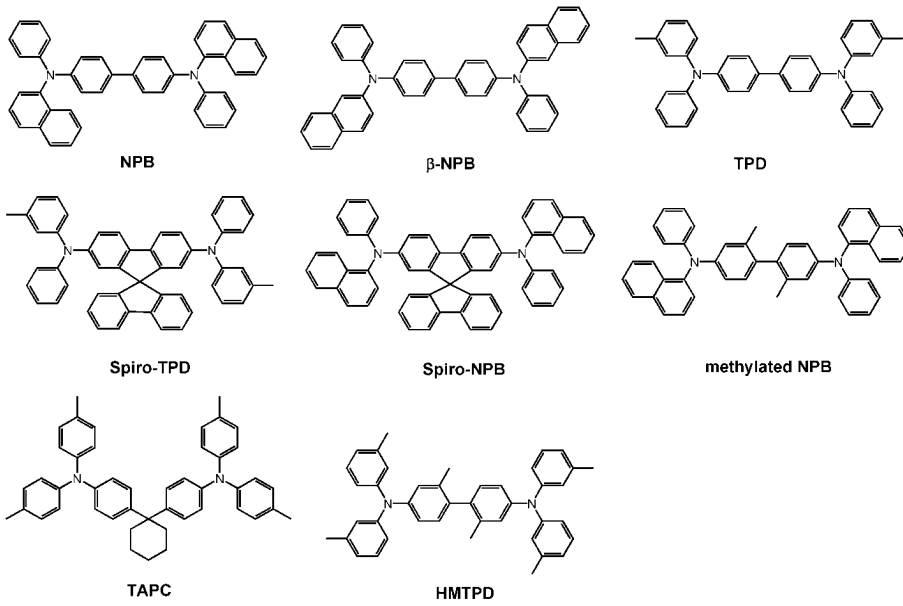
[0150] X₄₀₅는 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(=O)-*, *-N(Q₄₁₁)-*, *-C(Q₄₁₁)(Q₄₁₂)-*, *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*, *-C(Q₄₁₁)=* 또는 *=C(Q₄₁₁)*이고, 상기 Q₄₁₁ 및 Q₄₁₂는, 수소, 중수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,

- [0151] X_{406} 은 단일 결합, 0 또는 S이고,
- [0152] R_{401} 및 R_{402} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{20} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{20} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{401})(Q_{402})(Q_{403})$, $-N(Q_{401})(Q_{402})$, $-B(Q_{401})(Q_{402})$, $-C(=O)(Q_{401})$, $-S(=O)_2(Q_{401})$ 및 $-P(=O)(Q_{401})(Q_{402})$ 중에서 선택되고, 상기 Q_{401} 내지 Q_{403} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, C_6-C_{20} 아릴기 및 C_1-C_{20} 헤테로아릴기 중에서 선택되고,
- [0153] xc_{11} 및 xc_{12} 는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,
- [0154] 상기 화학식 402 중 * 및 *'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.
- [0155] 일 구현예를 따르면, 상기 정공 수송 영역이 LUMO 에너지 준위가 -3.5eV 보다 낮은 p-도펀트를 포함할 수 있다.
- [0156] 일 구현예를 따르면, 상기 전자 수송 영역이 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.
- [0157] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층은 제1색광 방출-발광층이고,
- [0158] 상기 제1전극과 제2전극 사이에, i) 적어도 하나의 제2색광 방출-발광층이 추가로 포함되어 있거나, ii) 적어도 하나의 제2색광 방출-발광층 및 적어도 하나의 제3색광 방출-발광층이 추가로 포함되어 있고,
- [0159] 상기 제1색광의 최대 발광 파장, 상기 제2색광의 최대 발광 파장 및 상기 제3색광의 최대 발광 파장은 서로 동일하거나 상이하고,
- [0160] 상기 제1색광과 상기 제2색광이 서로 혼합된 혼색광 또는 상기 제1색광, 상기 제2색광 및 상기 제3색광이 서로 혼합된 혼색광이 방출될 수 있다.
- [0161] 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.
- [0162] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자는, i) 제1전극, 유기층, 제2전극 및 제2캐핑층이 순차적으로 적층된 구조, ii) 제1캐핑층, 제1전극, 유기층 및 제2전극이 순차적으로 적층된 구조 또는 iii) 제1캐핑층, 제1전극, 유기층, 제2전극 및 제2캐핑층이 순차적으로 적층된 구조를 갖고, 상기 제1캐핑층 및 제2캐핑층 중 적어도 하나에 상기 헤테로시클릭 화합물이 포함될 수 있다.
- [0163] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.
- [0164] [도 1에 대한 설명]
- [0165] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 유기 발광 소자(10)는 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)을 포함한다.
- [0166] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0167] [제1전극(110)]
- [0168] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

- [0169] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록, 제1전극용 물질은, 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다.
- [0170] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0171] 상기 제1전극(110)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0172] [유기층(150)]
- [0173] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.
- [0174] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극(110)과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.
- [0175] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]
- [0176] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0177] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.
- [0178] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조를 갖거나, 제1전극(110)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/발광 보조층, 정공 주입층/발광 보조층, 정공 수송층/발광 보조층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 다층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0179] 상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMTPD, 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:



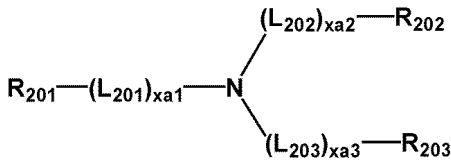
[0180]



[0181]

[0182]

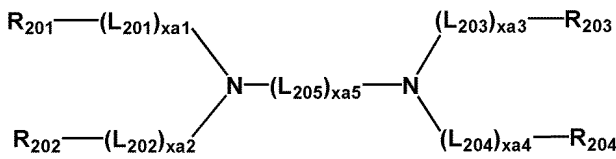
<화학식 201>



[0183]

[0184]

<화학식 202>



[0185]

[0186]

상기 화학식 201 및 202 중,

[0187]

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

[0188]

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

[0189]

x_{a1} 내지 x_{a4} 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0190]

x_{a5} 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0191]

R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환

된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

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

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

[0194] L_{201} 내지 L_{205} 는 서로 독립적으로,

[0195] 페닐렌기, 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

[0196] 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;

[0197] 중에서 선택되고,

[0198] 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.

[0199] 다른 구현예에 따르면, xa_1 내지 xa_4 는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

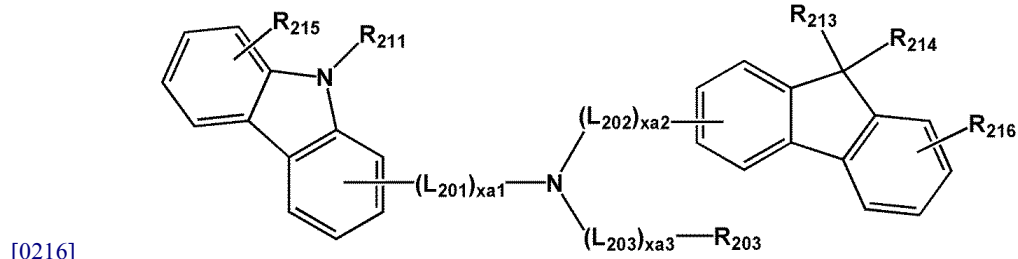
[0200] 또 다른 구현예에 따르면, xa_5 는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.

[0201] 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

[0202] 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,

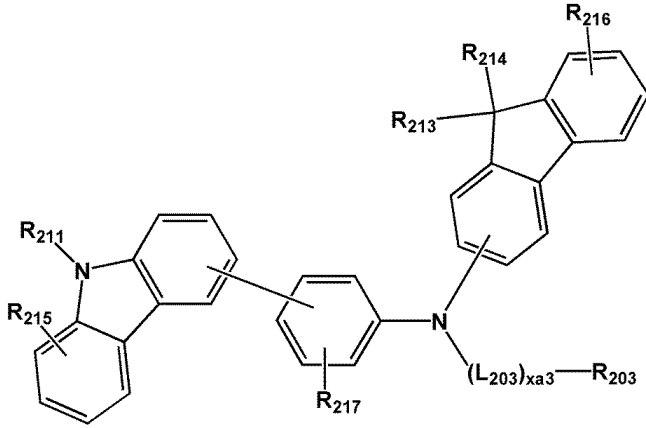
아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 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, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;

- [0203] 중에서 선택될 수 있고,
- [0204] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0205] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₃ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0206] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜레닐기; 및
- [0207] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜레닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜레닐기;
- [0208] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0209] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R₂₀₁과 R₂₀₂은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R₂₀₃과 R₂₀₄은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0210] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 중 적어도 하나는,
- [0211] 카바졸일기; 및
- [0212] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜레닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;
- [0213] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0214] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:
- [0215] <화학식 201A>



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

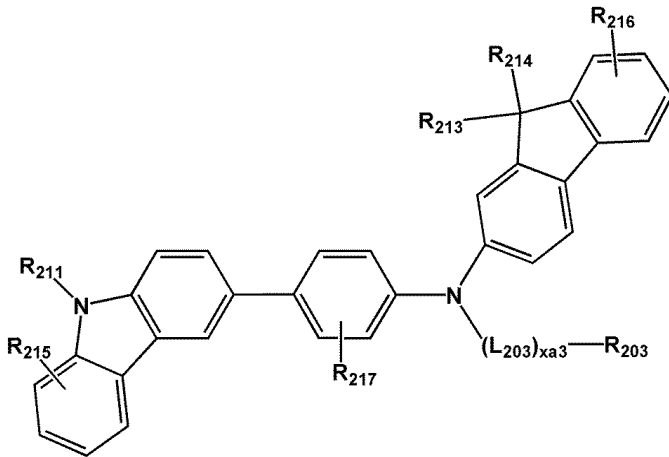
[0218] <화학식 201A(1)>



[0219]

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

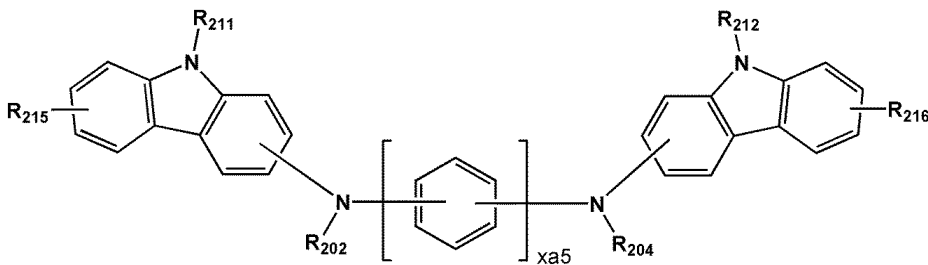
[0221] <화학식 201A-1>



[0222]

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

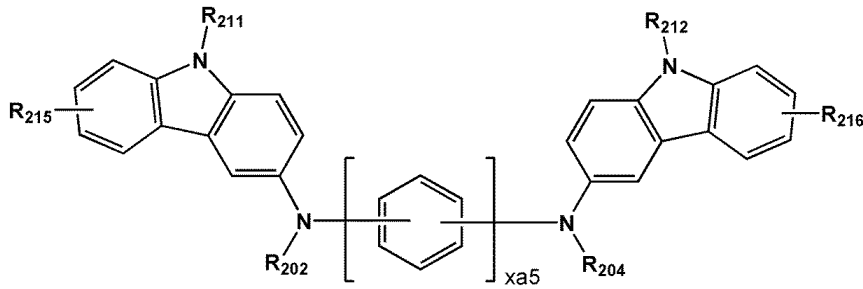
[0224] <화학식 202A>



[0225]

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

[0227] <화학식 202A-1>



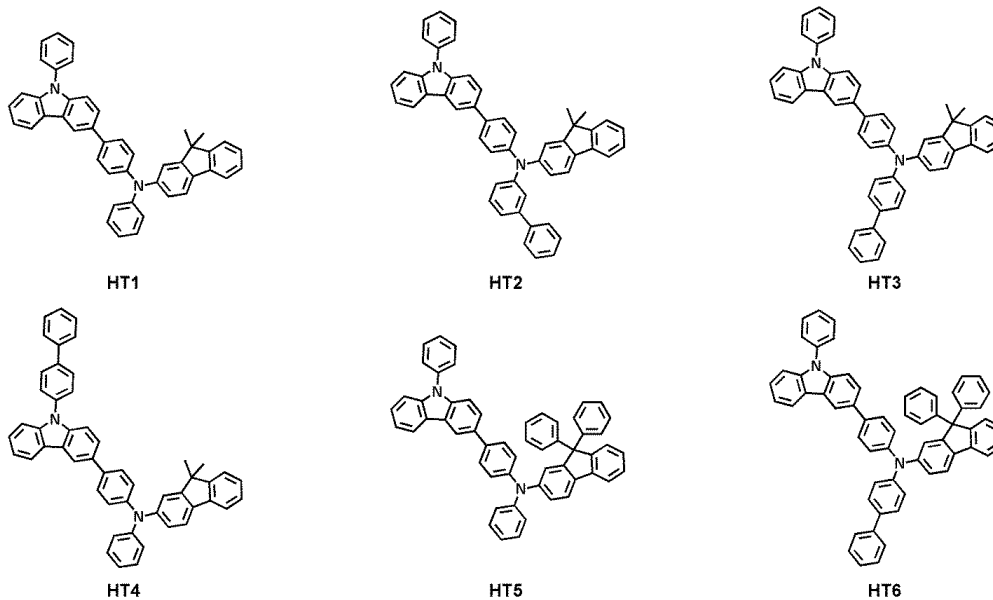
[0228] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,
 [0229] L₂₀₁ 내지 L₂₀₃, xa1 내지 xa3, xa5 및 R₂₀₂ 내지 R₂₀₄에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0230] R₂₁₁ 및 R₂₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀₃에 대한 설명을 참조하고,

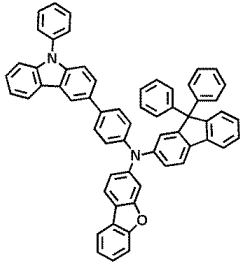
[0231] R₂₁₃ 내지 R₂₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헨테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, कोरो네닐기, 오발레닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0232] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

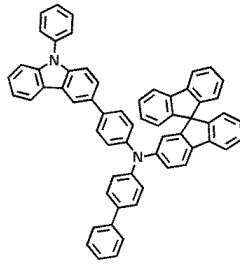
[0233]



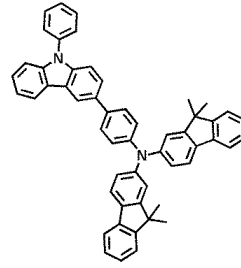
[0234]



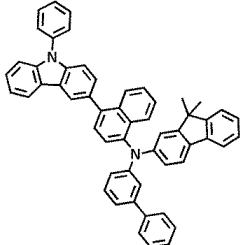
HT7



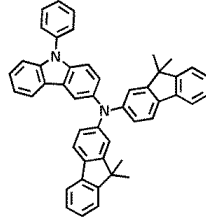
HT8



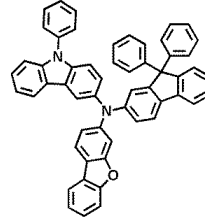
HT9



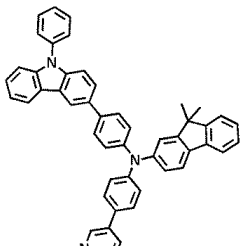
HT10



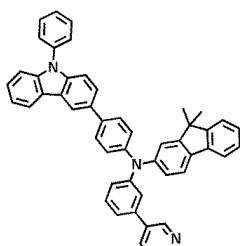
HT11



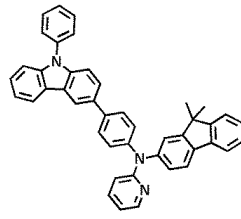
HT12



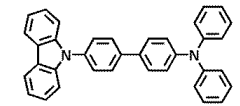
HT13



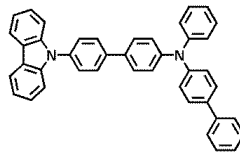
HT14



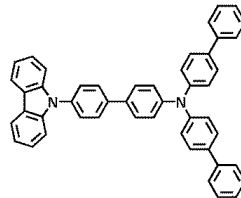
HT15



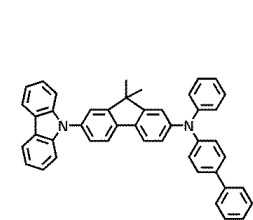
HT16



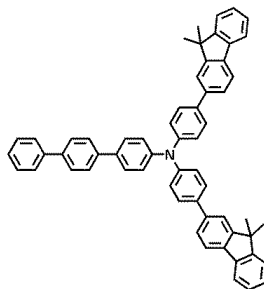
HT17



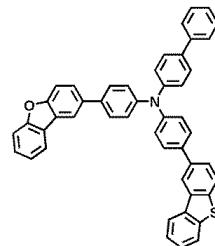
HT18



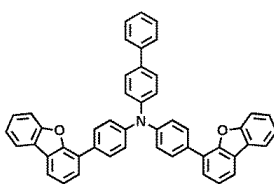
HT19



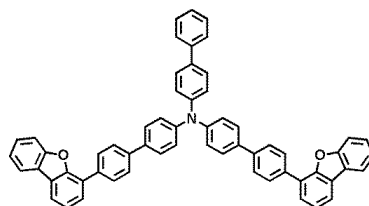
HT20



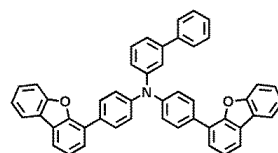
HT21



HT22



HT23

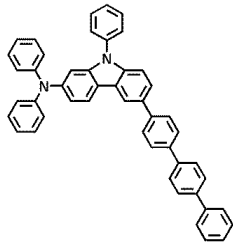


HT24

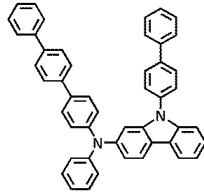
[0235]

[0236]

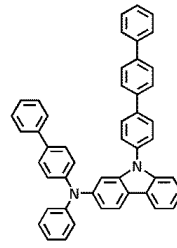
[0237]



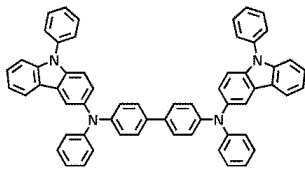
HT25



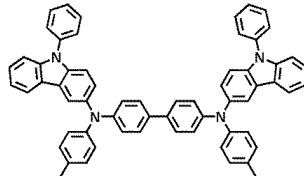
HT26



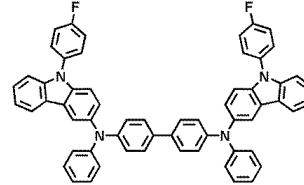
HT27



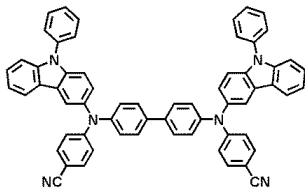
HT28



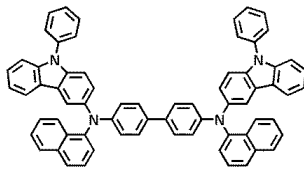
HT29



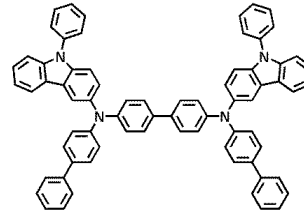
HT30



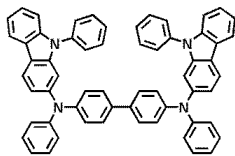
HT31



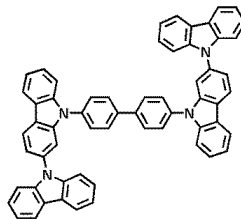
HT32



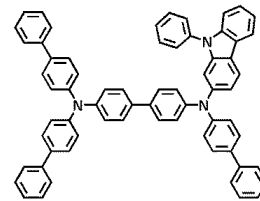
HT33



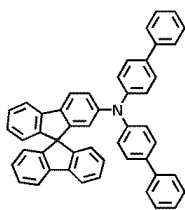
HT34



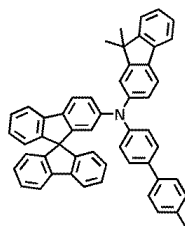
HT35



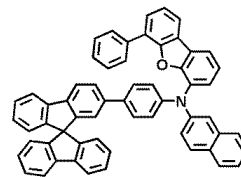
HT36



HT37



HT38



HT39

[0238]

[0239]

[0240]

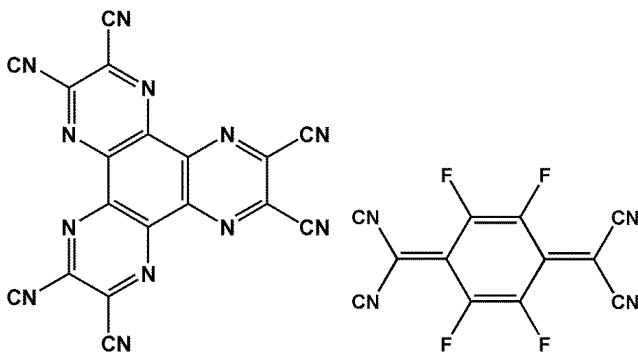
[0241]

[0242]

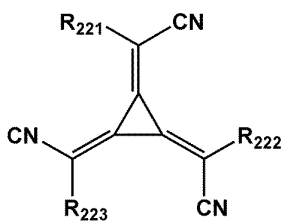
상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 하나를 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 9000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인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

- [0243] [p-도펀트]
- [0244] 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.
- [0245] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.
- [0246] 일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다.
- [0247] 상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0248] 예를 들어, 상기 p-도펀트는,
- [0249] TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체;
- [0250] 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;
- [0251] HAT-CN (1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및
- [0252] 하기 화학식 221로 표시되는 화합물;
- [0253] 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0254] <HAT-CN> <F4-TCNQ>



- [0255]
- [0256] <화학식 221>



- [0257]
- [0258] 상기 화학식 221 중,
- [0259] 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.

- [0260] [유기층(150) 중 발광층]
- [0261] 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.

- [0262] 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있다.
- [0263] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0264] 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.
- [0265] 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.
- [0266] [발광층 중 호스트]
- [0267] 상기 호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있다.
- [0268] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 더 포함할 수 있다.
- [0269] <화학식 301>
- [0270] $[Ar_{301}]_{xb11}-[(L_{301})_{xb1}-R_{301}]_{xb21}$
- [0271] 상기 화학식 301 중,
- [0272] Ar_{301} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0273] $xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0274] 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,
- [0275] $xb1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0276] 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,
- [0277] $xb21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0278] 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.
- [0279] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar_{301} 은,
- [0280] 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, 나프타

센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;
및

[0281] 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, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;

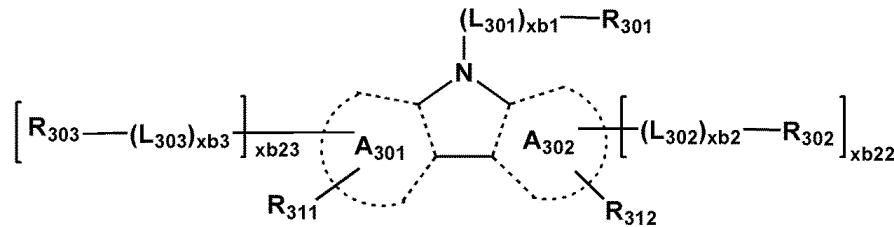
[0282] 중에서 선택되고,

[0283] Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0284] 상기 화학식 301 중 xb1이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₃₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

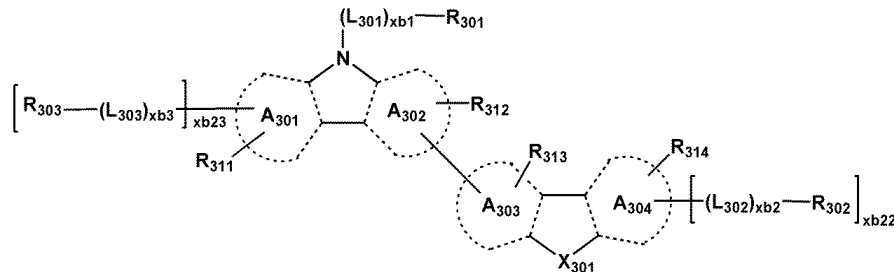
[0285] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0286] <화학식 301-1>



[0287]

[0288] <화학식 301-2>



[0289]

[0290] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0291] 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,

[0292] X₃₀₁은 O, S 또는 N-[(L₃₀₄)_{xb4}-R₃₀₄]이고,

[0293] 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,

[0294] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0295] L₃₀₁, xb1, R₃₀₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

- [0296] L₃₀₂ 내지 L₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L₃₀₁에 대한 설명을 참조하고,
- [0297] xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,
- [0298] R₃₀₂ 내지 R₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R₃₀₁에 대한 설명을 참조한다.
- [0299] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L₃₀₁ 내지 L₃₀₄는 서로 독립적으로,
- [0300] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및
- [0301] 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, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 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, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;
- [0302] 중에서 선택되고,
- [0303] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.
- [0304] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R₃₀₁ 내지 R₃₀₄는 서로 독립적으로,
- [0305] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤

일기, 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

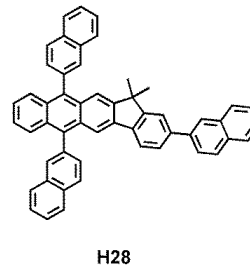
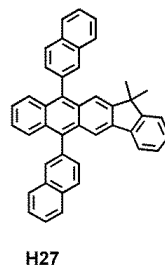
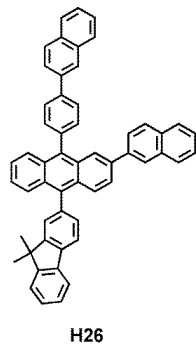
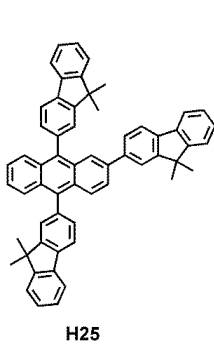
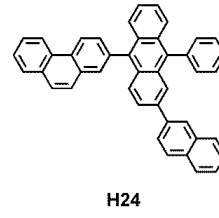
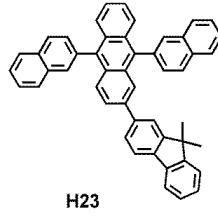
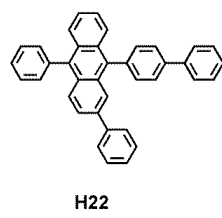
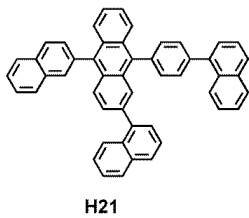
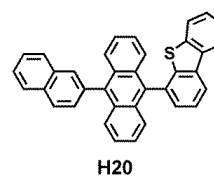
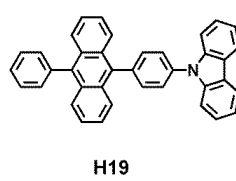
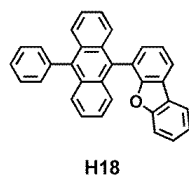
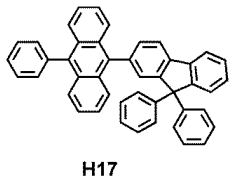
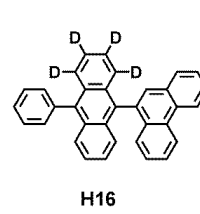
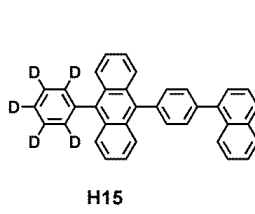
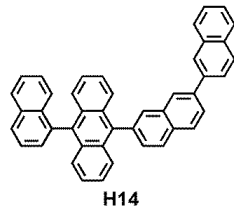
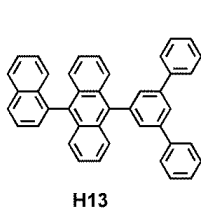
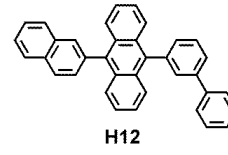
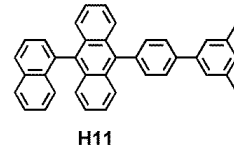
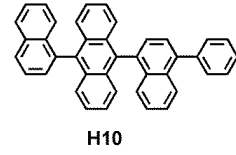
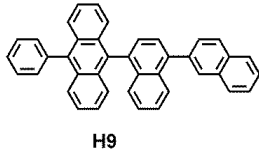
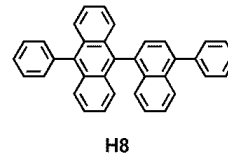
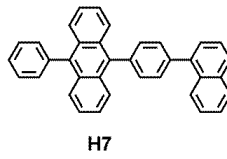
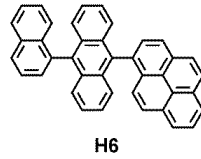
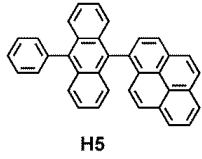
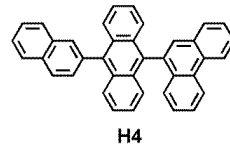
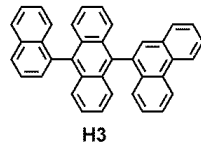
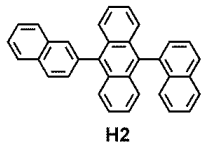
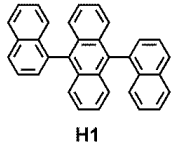
[0306] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 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;

[0307] 중에서 선택되고,

[0308] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0309] 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.

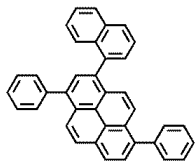
[0310] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



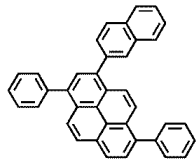
[0311]

[0312]

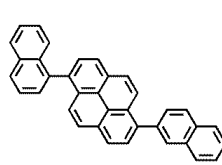
[0313]



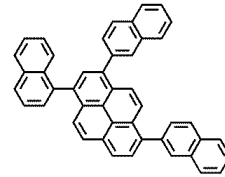
H29



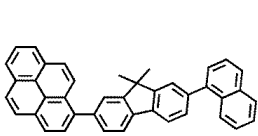
H30



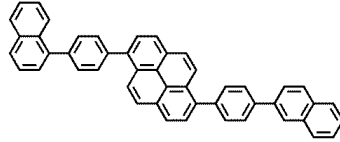
H31



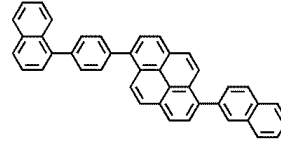
H32



H33

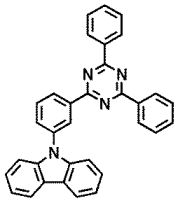


H34

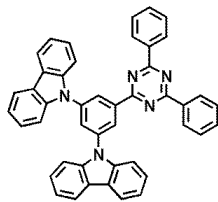


H35

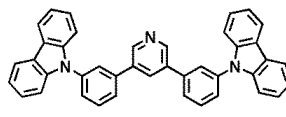
[0314]



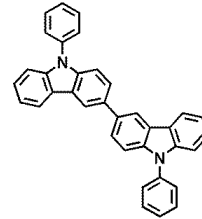
H36



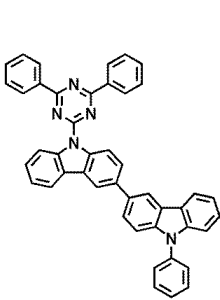
H37



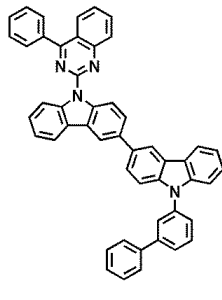
H38



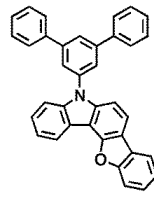
H39



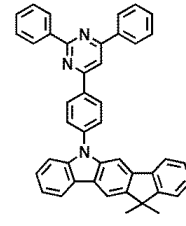
H40



H41

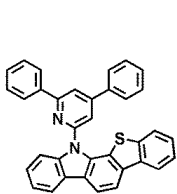


H42

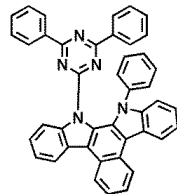


H43

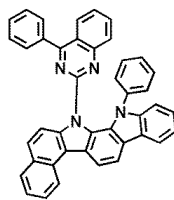
[0315]



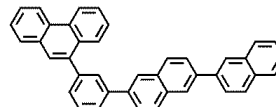
H44



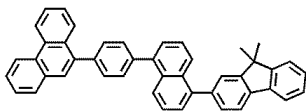
H45



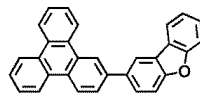
H46



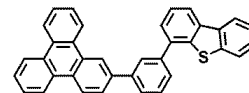
H47



H48

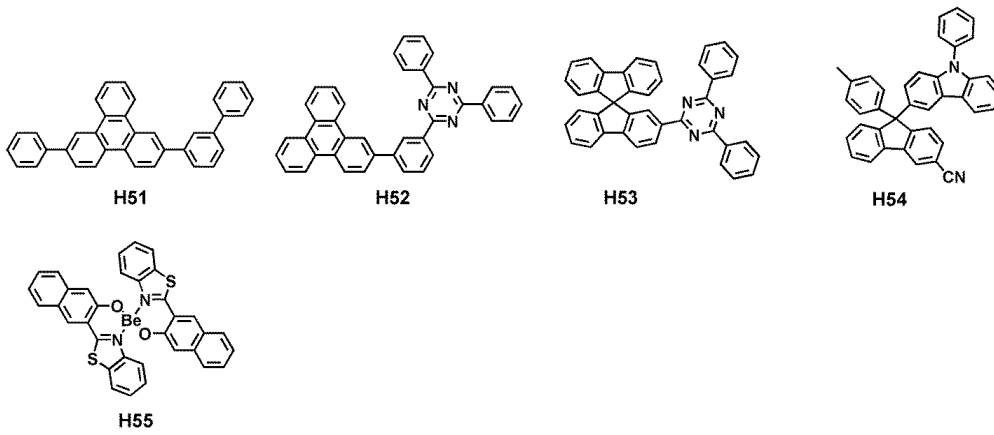


H49



H50

[0316]



[0317]

[0318]

[0319]

[0320]

[0321]

[0322]

[0323]

[0324]

[0325]

[0326]

[0327]

[0328]

[0329]

[유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]

상기 인광 도펀트는 전술한 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함할 수 있다.

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

다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 i) X₄₀₁은 질소이고, X₄₀₂는 탄소이거나, 또는 ii) X₄₀₁과 X₄₀₂가 모두 질소일 수 있다.

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 R₄₀₁ 및 R₄₀₂는 서로 독립적으로,

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 페닐기, 나프틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기 및 노르보네닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

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

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

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

중에서 선택되고,

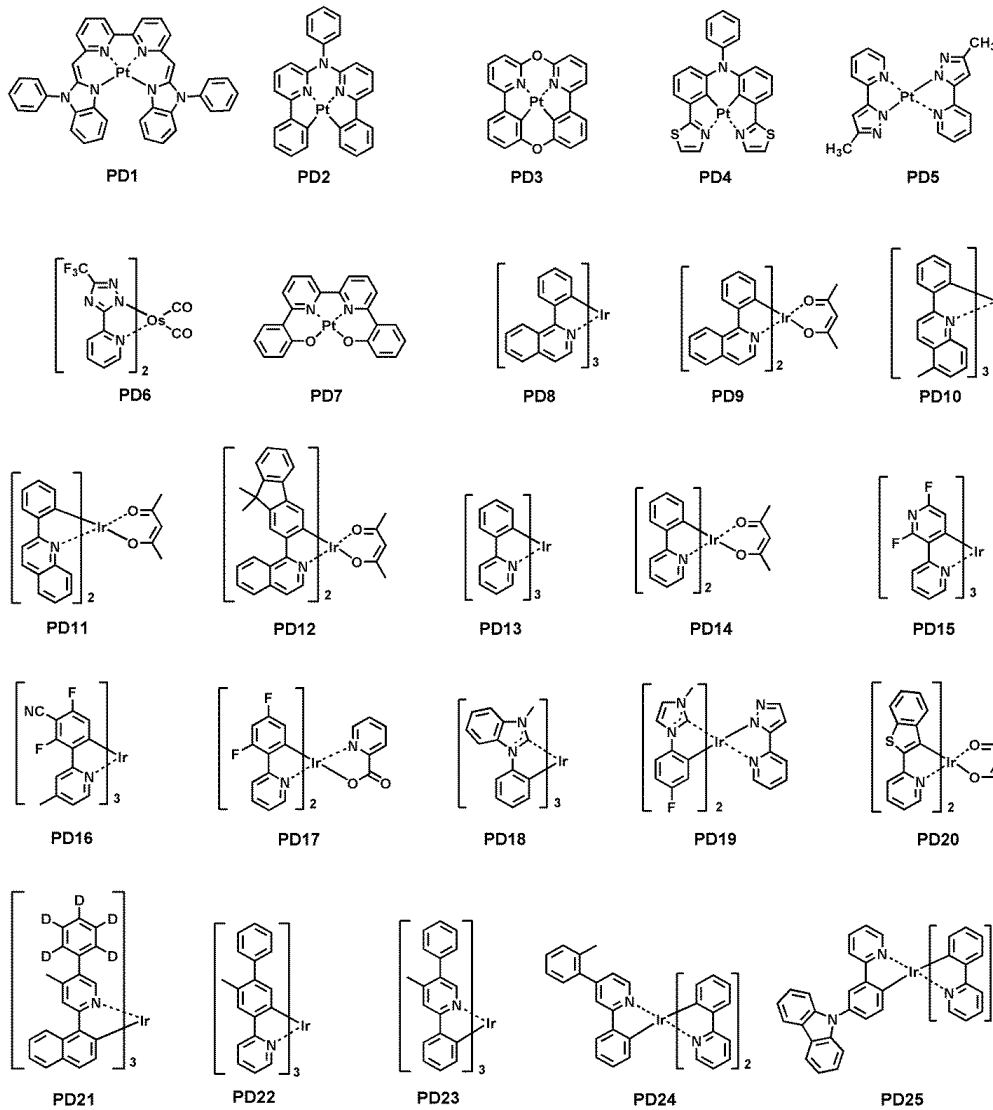
상기 Q₄₀₁ 내지 Q₄₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기 및 나프틸기 중에서 선

택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

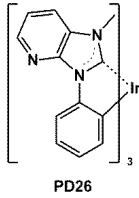
[0330] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 401 중 xc1이 2 이상일 경우, 2 이상의 L₄₀₁ 중 2개의 A₄₀₁은 선택적으로 (optionally), 연결기인 X₄₀₇을 통하여 서로 연결되거나, 2개의 A₄₀₂는 선택적으로, 연결기인 X₄₀₈을 통하여 서로 연결될 수 있다 (하기 화합물 PD1 내지 PD4 및 PD7 참조). 상기 X₄₀₇ 및 X₄₀₈은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(=O)-*, *-N(Q₄₁₃)-*, *-C(Q₄₁₃)(Q₄₁₄)-* 또는 *-C(Q₄₁₃)=C(Q₄₁₄)-* (여기서, Q₄₁₃ 및 Q₄₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기임)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0331] 상기 화학식 401 중 L₄₀₂는 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기 L₄₀₂는 할로겐, 디케톤 (예를 들면, 아세틸아세토네이트), 카르복실산(예를 들면, 피콜리네이트), -C(=O), 이소니트릴, -CN 및 포스포러스 함유 물질(예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphite)) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

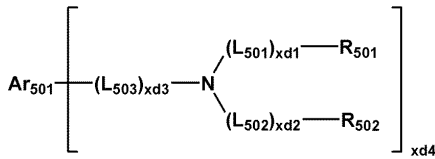
[0332] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD26 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0335]



- [0336]
- [0337] [발광층 중 형광 도펀트]
- [0338] 상기 형광 도펀트는 아릴아민 화합물 또는 스티릴아민 화합물을 포함할 수 있다.
- [0339] 상기 형광 도펀트는 하기 화학식 501로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:
- [0340] <화학식 501>



- [0341]
- [0342] 상기 화학식 501 중,
- [0343] Ar₅₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0344] L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0345] xd1 내지 xd3는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
- [0346] R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0347] xd4는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.
- [0348] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar₅₀₁은,
- [0349] 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹; 및
- [0350] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹;
- [0351] 중에서 선택될 수 있다.
- [0352] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로,
- [0353] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페

릴렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및

[0354] 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 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기;

[0355] 중에서 선택될 수 있다.

[0356] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로,

[0357] 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 및 피리디닐기; 및

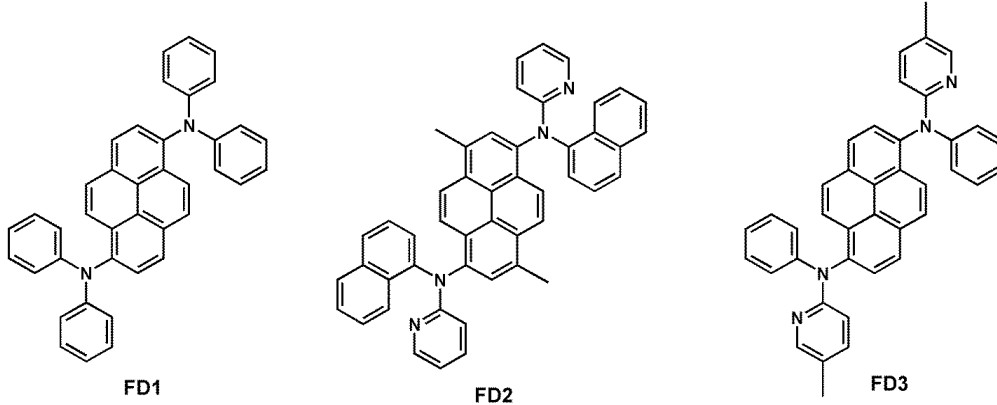
[0358] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 및 -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;

[0359] 중에서 선택되고,

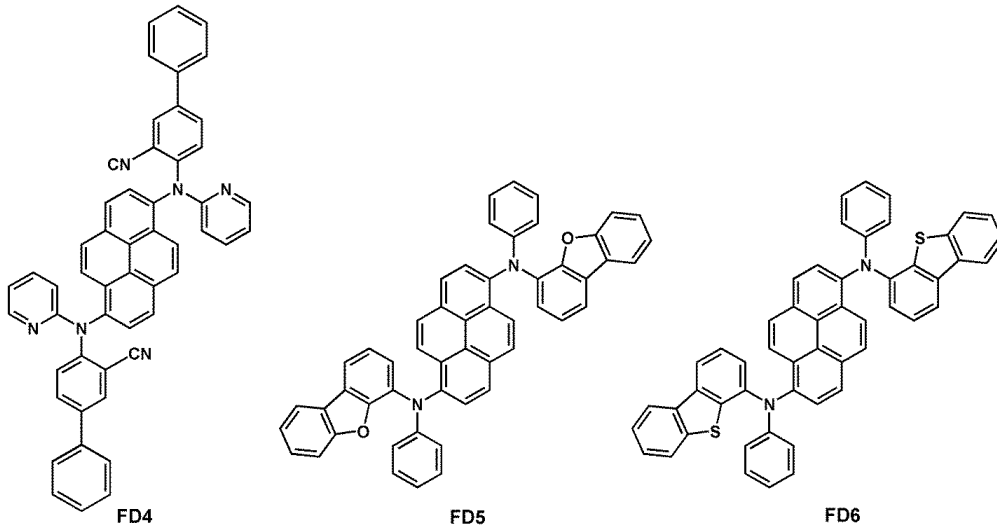
[0360] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0361] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd4는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

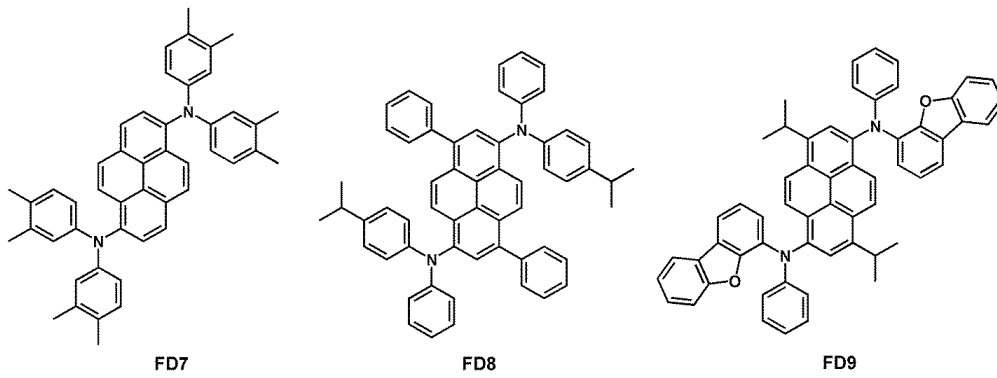
[0362] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:



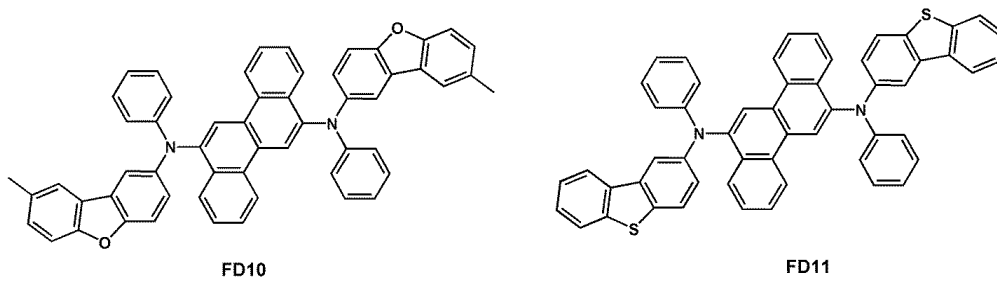
[0363]



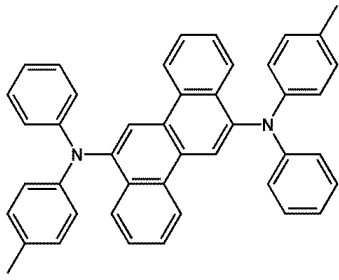
[0364]



[0365]

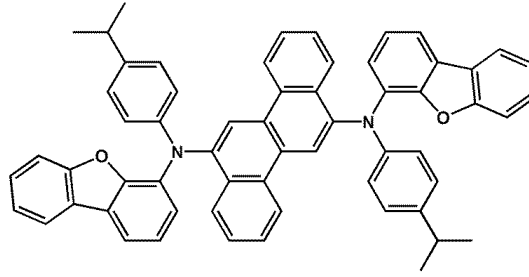


[0366]

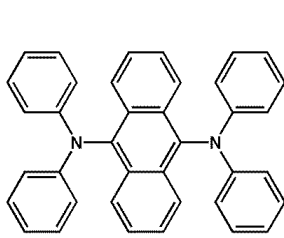


FD12

[0367]

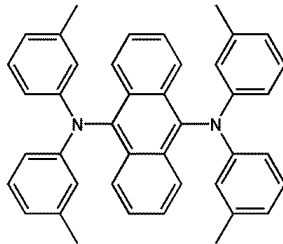


FD13

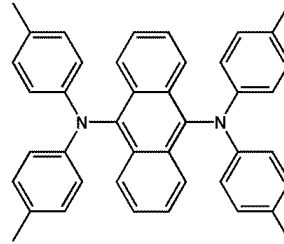


FD14

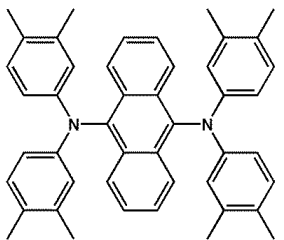
[0368]



FD15

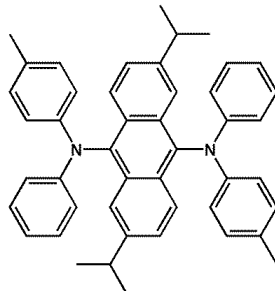


FD16

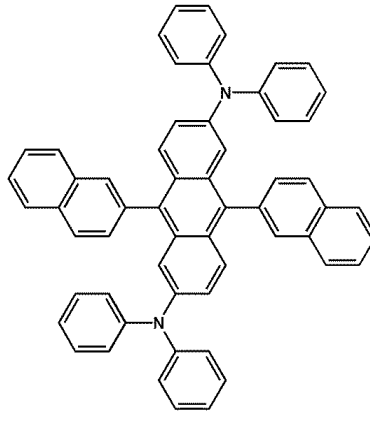


FD17

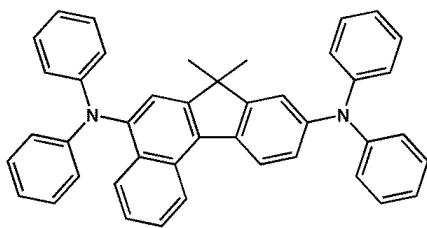
[0369]



FD18

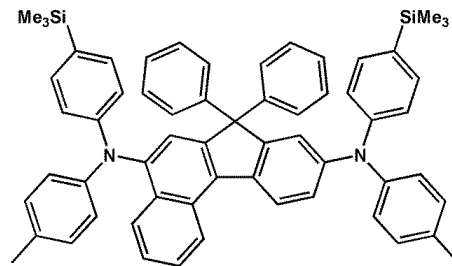


FD19

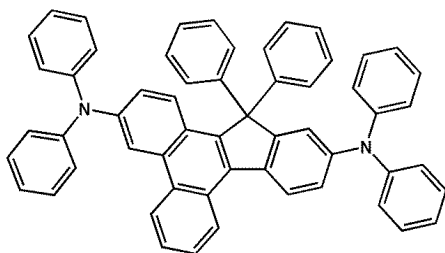


FD20

[0370]



FD21



FD22

[0371]

[0372]

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

- [0384] <화학식 601>
- [0385] $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$
- [0386] 상기 화학식 601 중,
- [0387] Ar_{601} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0388] $xe11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0389] L_{601} 은, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0390] $xe1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0391] R_{601} 은, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{601})(Q_{602})(Q_{603})$, $-C(=O)(Q_{601})$, $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$ 중에서 선택되고,
- [0392] 상기 Q_{601} 내지 Q_{603} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0393] $xe21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0394] 일 구현예에 따르면, 상기 $xe11$ 개의 Ar_{601} 및 $xe21$ 개의 R_{601} 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 합질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0395] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar_{601} 은,
- [0396] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스퀴아IRO-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹; 및
- [0397] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스퀴아IRO-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그

룹 및 아자카바졸 그룹;

[0398]

중에서 선택될 수 있고,

[0399]

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

[0400]

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

[0401]

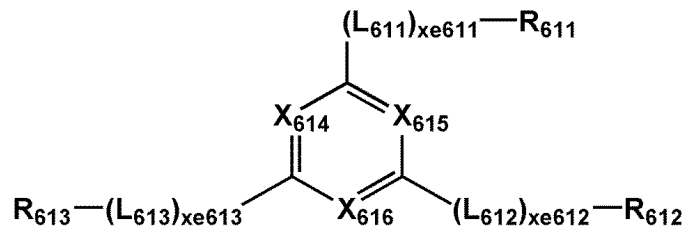
다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0402]

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

[0403]

<화학식 601-1>



[0404]

상기 화학식 601-1 중,

[0405]

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,

[0406]

L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0407]

xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0408]

R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0409]

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.

[0410]

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

[0411]

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

[0412]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아IRO-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, 옥사졸일

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

[0414]

중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0415]

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

[0416]

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

[0417]

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

[0418]

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

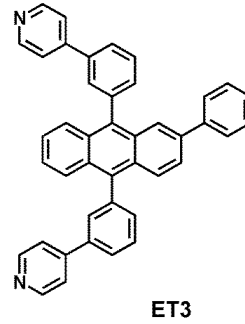
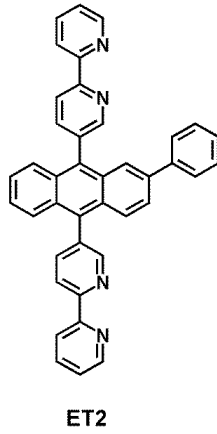
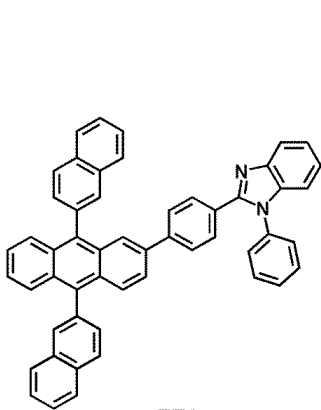
사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0419] $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$;

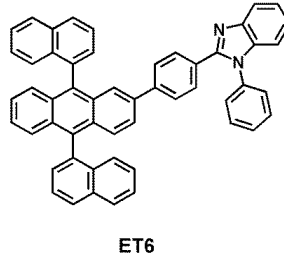
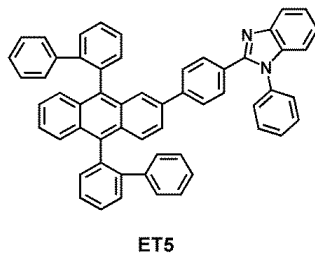
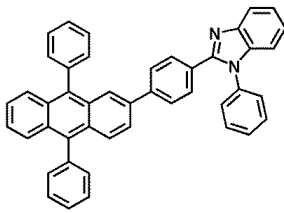
[0420] 중에서 선택되고,

[0421] 상기 Q_{601} 및 Q_{602} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

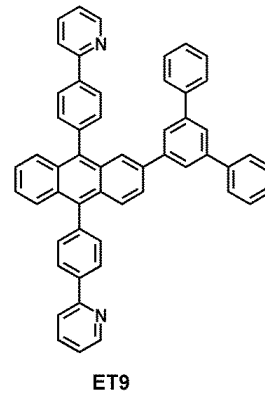
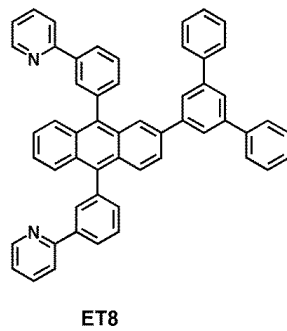
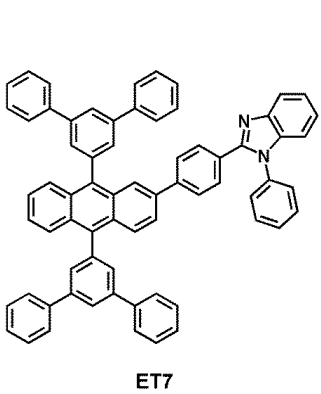
[0422] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



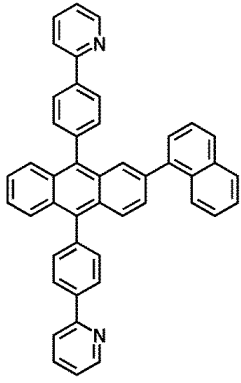
[0423]



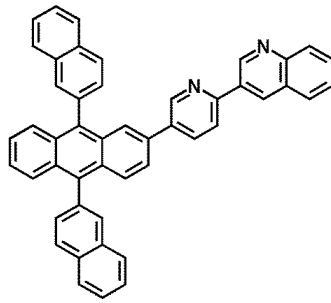
[0424]



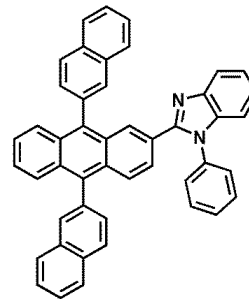
[0425]



ET10

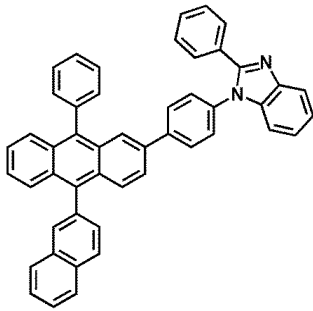


ET11

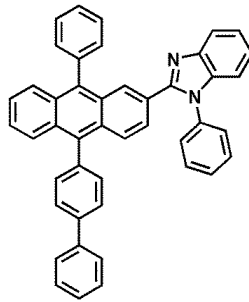


ET12

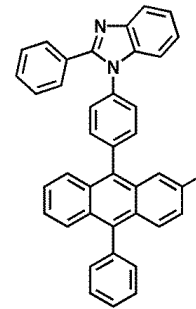
[0426]



ET13

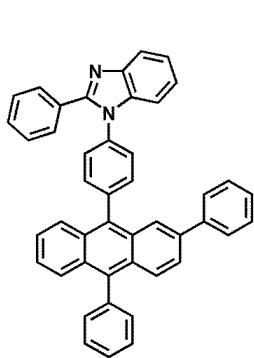


ET14

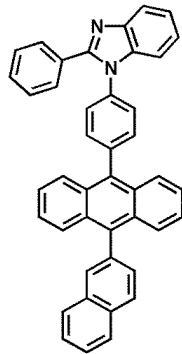


ET15

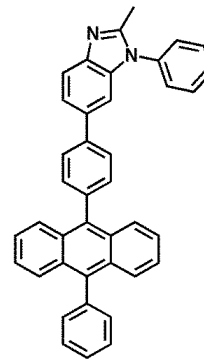
[0427]



ET16

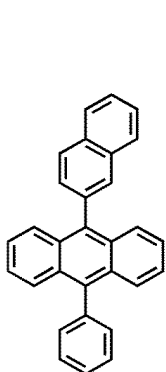


ET17

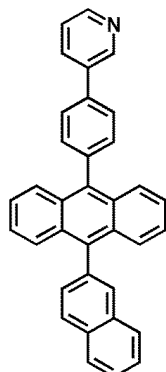


ET18

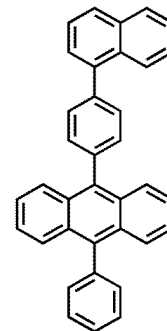
[0428]



ET19

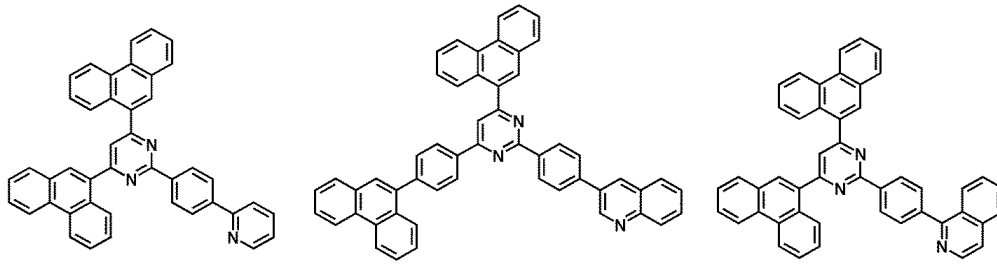


ET20

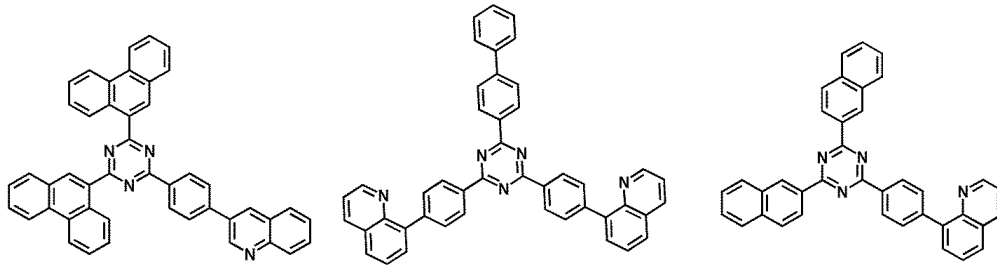


ET21

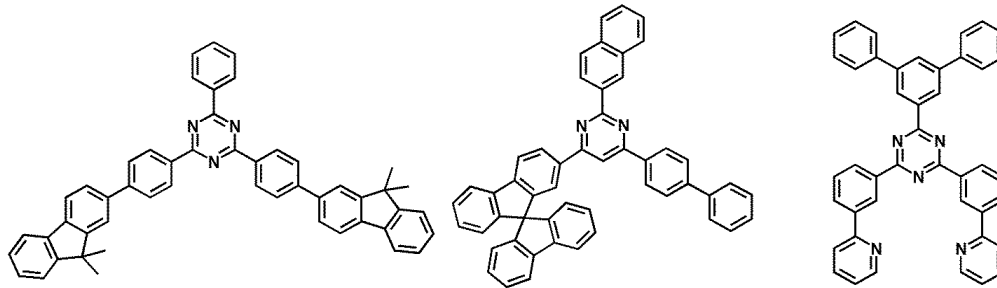
[0429]



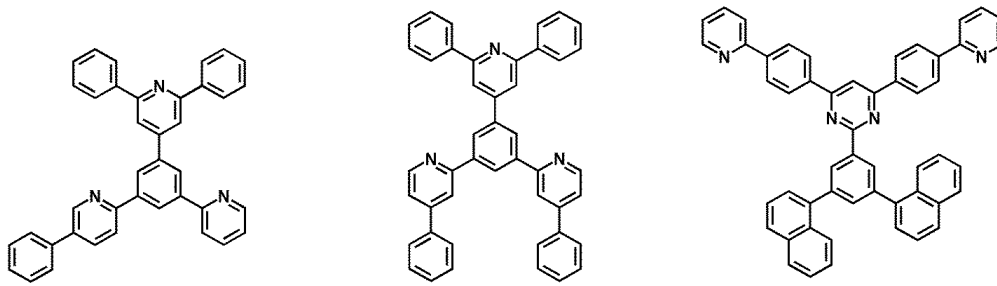
[0430]



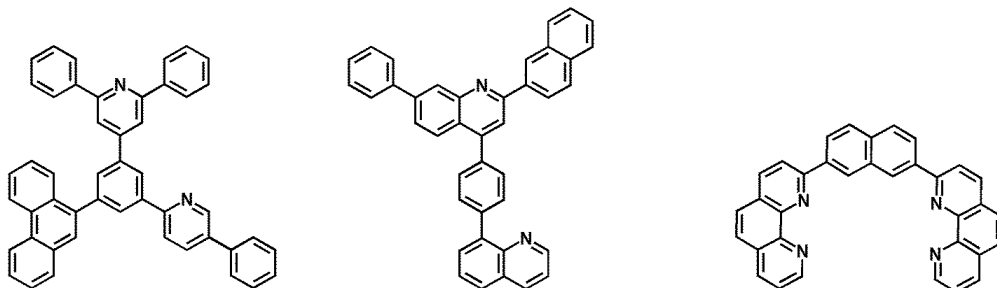
[0431]



[0432]

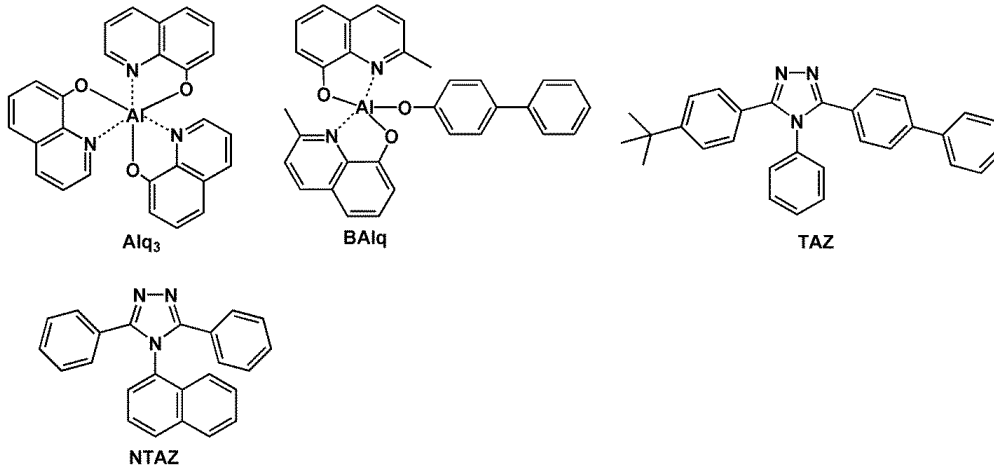


[0433]



[0434]

[0435] 또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, BA1q, 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.



[0436]

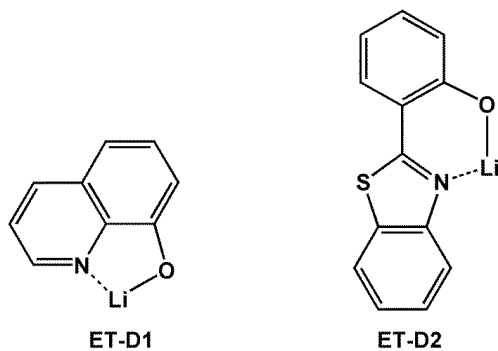
[0437] 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성 또는 전자 조절 특성을 얻을 수 있다.

[0438] 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.

[0439] 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.

[0440] 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.

[0441] 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.



[0442]

[0443] 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.

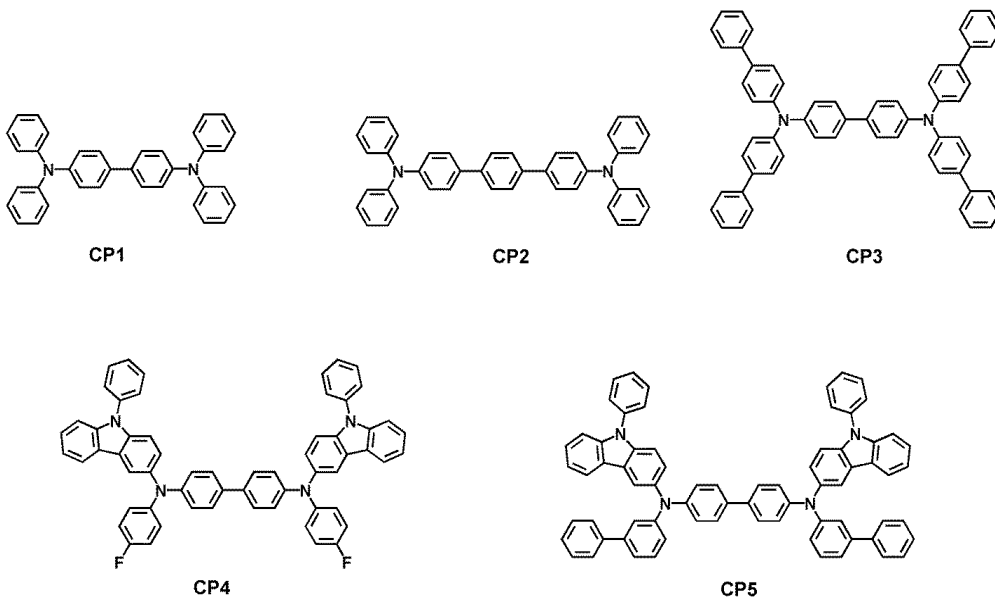
[0444] 상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0445] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희

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

- [0446] 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.
- [0447] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.
- [0448] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.
- [0449] 상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로젠화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.
- [0450] 상기 알칼리 금속 화합물은, Li_2O , Cs_2O , K_2O 등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI 등과 같은 알칼리 금속 할로젠화물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속 화합물은, LiF, Li_2O , NaF, LiI, NaI, CsI, KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0451] 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.
- [0452] 상기 희토류 금속 화합물은, YbF_3 , ScF_3 , ScO_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , 및 TbF_3 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은 YbF_3 , ScF_3 , TbF_3 , YbI_3 , ScI_3 , TbI_3 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0453] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배워진 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0454] 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.
- [0455] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 상술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0456] [제2전극(190)]
- [0457] 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.
- [0458] 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.
- [0459] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0460] [도 2 내지 4에 대한 설명]

- [0461] 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.
- [0462] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.
- [0463] 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.
- [0464] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.
- [0465] 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.
- [0466] 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.
- [0467] 일 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민계 화합물을 포함할 수 있다.
- [0468] 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.
- [0469] 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.



- [0470] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1 내지 4를 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0471]
- [0472] 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층은 각각, 진공 증착법, 스프인 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.

- [0473] 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.
- [0474] 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.
- [0475] [치환기의 일반적인 정의]
- [0476] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0477] 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.
- [0478] 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.
- [0479] 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.
- [0480] 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.
- [0481] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리아졸리딘닐기(1,2,3,4-oxatriazolidinyl), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranlyl), 테트라히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0482] 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.
- [0483] 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-디히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0484] 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 의미

한다. 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.

[0485] 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.

[0486] 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.

[0487] 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.

[0488] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 구체예에는, 카바졸일기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0489] 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.

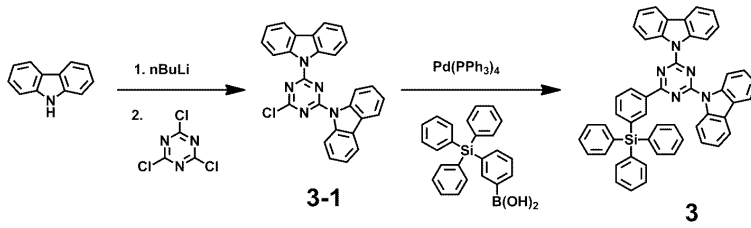
[0490] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이란, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹과 동일한 구조를 갖되, 고리-형성 원자로서, 탄소(탄소수는 1 내지 60일 수 있음) 외에, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 그룹을 의미한다.

[0491] 본 명세서 중, 상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0492] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

- [0493] 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;
- [0494] 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;
- [0495] 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
- [0496] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0497] 중에서 선택되고,
- [0498] 상기 Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0499] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu^t"은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"는 메톡시기를 의미한다.
- [0500] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.
- [0501] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.
- [0502] 본 명세서 중 * 및 *'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.
- [0503] 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.
- [0504] [실시예]

[0505] **합성예 1: 화합물 3의 합성**



[0506]

[0507] **중간체 3-1의 합성**

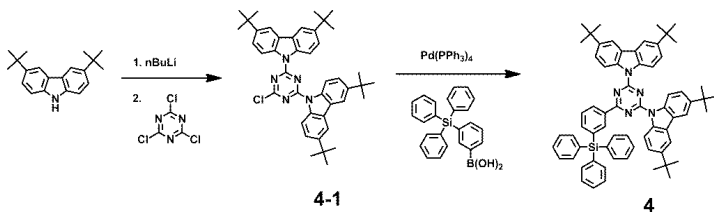
[0508] 카바졸을 nBuLi과 반응한 후 염화사이아누르(cyanuric chloride)와 반응시켜서 중간체 3-1을 얻었다. 상기 중간체 3-1을 LC-MS로 확인하였다.

[0509] $C_{27}H_{16}N_5Cl$: M+1 445.1

[0510] **화합물 3의 합성**

[0511] 중간체 3-1 2.3g, (3-(트리페닐실릴)페닐)보론산 (CAS#=1253912-58-1) 2.4 g, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.24 g, 탄산칼륨 1.8 g을 반응 용기에 넣고 톨루엔 40 mL, 에탄올 10 mL, 증류수 10mL에 녹이고 24시간 동안 환류하였다. 반응이 완결된 후 반응 용액을 에틸아세테이트로 추출하고 수집한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 얻은 잔류물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 분리하고 정제하여 1.6 g (수율: 42%)의 화합물 3을 얻었다. 상기 화합물 3을 LC-MS 및 1H -NMR로 확인하였다.

[0512] **합성예 2: 화합물 4의 합성**



[0513]

[0514] **중간체 4-1의 합성**

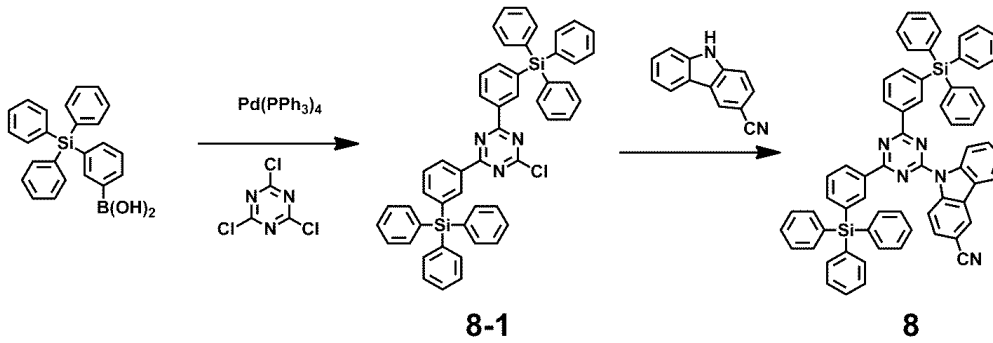
[0515] 3,4-di-tert-부틸-9H-카바졸을 nBuLi과 반응한 후 cyanuric chloride와 반응시켜서 중간체 4-1을 얻었다. 상기 중간체 4-1을 LC-MS로 확인하였다.

[0516] $C_{43}H_{48}ClN_5$: M+1 670.34

[0517] **화합물 4의 합성**

[0518] 중간체 4-1 1.9g, (3-(트리페닐실릴)페닐)보론산 (CAS#=1253912-58-1) 1.95 g, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.20 g, 탄산칼륨 1.47 g을 반응 용기에 넣고 톨루엔 40 mL, 에탄올 10 mL, 증류수 10mL에 녹이고 24시간 동안 환류하였다. 반응이 완결된 후 반응 용액을 에틸아세테이트로 추출하고 수집한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 얻은 잔류물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 분리하고 정제하여 2.28 g (수율: 55%)의 화합물 4를 얻었다. 상기 화합물 4를 LC-MS 및 1H -NMR로 확인하였다.

[0519] **합성예 3: 화합물 8의 합성**



[0520]

[0521] **중간체 8-1의 합성**

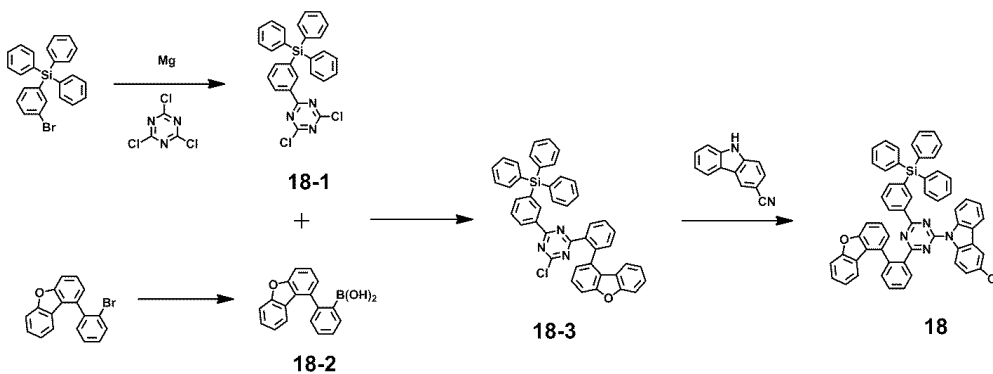
[0522] (3-(트리페닐실릴)페닐)보론산 (CAS#=1253912-58-1)을 Pd 촉매하에서 cyanuric chloride와 반응하여 중간체 8-1을 얻었다. 상기 중간체 8-1을 LC-MS로 확인하였다.

[0523] $C_{51}H_{38}ClN_3Si_2$: M+1 784.43

[0524] **화합물 8의 합성**

[0525] 중간체 8-1 3.3 g, 9H-카바졸 -3-카보니트릴(57102-93-9) 0.81g, 인산칼륨 1.8g, DMF 30mL 를 반응용기에 넣고 160도 조건에서 24시간 환류하였다. 반응이 완결된 후 반응 용액을 에틸아세이트로 추출하고 수집한 유기층을 마그네슘술페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 얻은 잔류물을 실리카젤 컬럼크로마토그래피로 분리하고 정제하여 2.5 g (수율: 62 %)의 화합물 8을 얻었다. 상기 화합물 8을 LC-MS 및 1H -NMR로 확인하였다.

[0526] **합성예 4: 화합물 18의 합성**



[0527]

[0528] **중간체 18-1의 합성**

[0529] (3-bromophenyl)triphenylsilane(CAS#=185626-73-7)을 마그네슘과 반응한 후 cyanuric chloride와 반응하여 중간체 18-1을 얻었다. 상기 중간체 18-1을 LC-MS로 확인하였다.

[0530] $C_{27}H_{19}Cl_2N_3Si$: M+1 484.08

[0531] **중간체 18-2의 합성**

[0532] 1-(2-bromophenyl)dibenzo[b,d]furan(CAS#=1659313-53-7)을 nBuLi과 반응한후 트리메틸보레이트와 반응하여 중간체 18-2을 얻었다. 상기 중간체 18-2을 LC-MS로 확인하였다.

[0533] $C_{18}H_{13}BO_3$: M+1 289.12

[0534] **중간체 18-3의 합성**

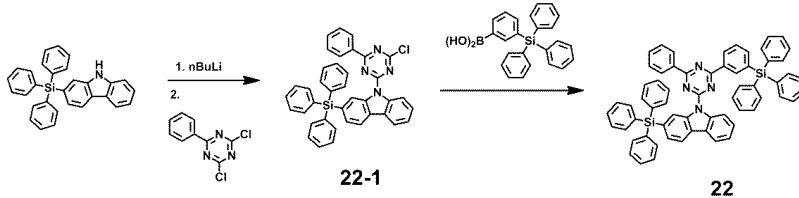
[0535] 중간체 18-1과 중간체 18-2를 Pd 조건에서 스즈키 커플링(Suzuki coupling)하여 중간체 18-3을 얻었다. 상기 중간체 18-3을 LC-MS로 확인하였다.

[0536] $C_{45}H_{30}ClN_3OSi$: M+1 692.19

[0537] 화합물 18의 합성

[0538] 중간체 18-3 1.9 g, 9H-카바졸-3-카보니트릴(57102-93-9) 0.53g, 인산칼륨 1.2g, DMF 20mL 를 반응용기에 넣고 160도 조건에서 24시간 환류하였다. 반응이 완결된 후 반응 용액을 에틸아세테이트로 추출하고 수집한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 얻은 잔류물을 실리카젤 컬럼크로마토그래피로 분리하고 정제하여 1.4 g (수율: 59 %)의 화합물 18을 얻었다. 상기 화합물 18을 LC-MS 및 1H -NMR로 확인하였다.

[0539] 합성예 5: 화합물 22의 합성



[0540]

[0541] 중간체 22-1의 합성

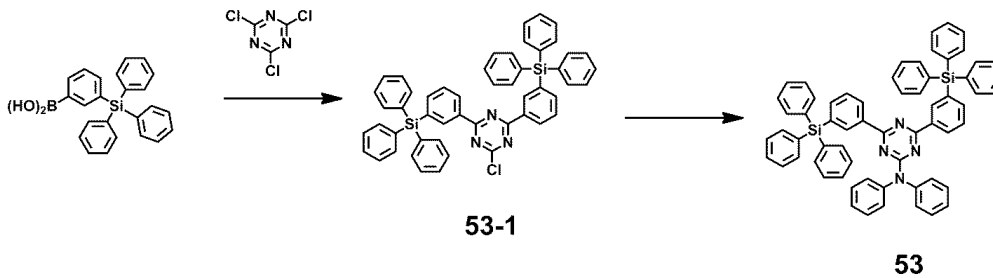
[0542] 2-(트리페닐실릴)-9H-카바졸(CAS# = 1262866-95-4)을 nBuLi과 반응시킨후 2,4-디클로로-6-페닐트리아진(CAS# = 1700-02-3)과 반응하여 중간체 22-1을 얻었다.

[0543] $C_{39}H_{27}ClN_4Si$: M+1 615.18

[0544] 화합물 22의 합성

[0545] 중간체 22-1 2.3g, (3-(트리페닐실릴)페닐)보론산 (CAS#=1253912-58-1) 1.71 g, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.17 g, 탄산칼륨 1.30 g을 반응 용기에 넣고 톨루엔 40 mL, 에탄올 10 mL, 증류수 10mL에 녹이고 24시간 동안 환류하였다. 반응이 완결된 후 반응 용액을 에틸아세테이트로 추출하고 수집한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 얻은 잔류물을 실리카젤 컬럼크로마토그래피로 분리하고 정제하여 1.95 g (수율: 57 %)의 화합물 22를 얻었다. 상기 화합물 22를 LC-MS 및 1H -NMR로 확인하였다.

[0546] 합성예 6: 화합물 53의 합성



[0547]

[0548] 중간체 53-1의 합성

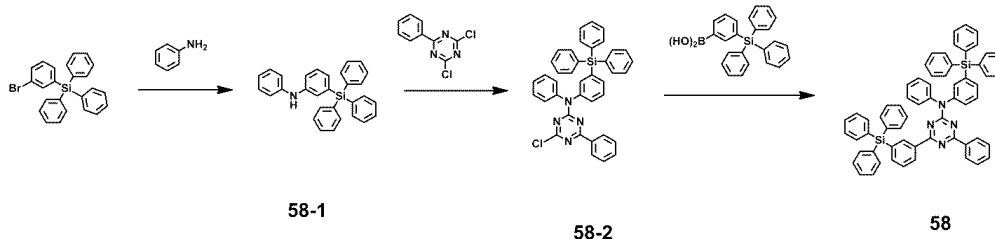
[0549] (3-(트리페닐실릴)페닐)보론산 (CAS#=1253912-58-1)과 cyanuric chloride를 Pd 촉매 조건하에서 반응하여 중간체 53-1을 얻었다. 상기 중간체 53-1을 LC-MS로 확인하였다.

[0550] $C_{51}H_{38}ClN_3Si_2$: M+1 784.33

[0551] 화합물 53의 합성

[0552] 중간체 53-1 2.9 g, 디페닐아민 0.8g, Pd_2dba_3 0.17g, $P(tBu)_3$ 0.1 mL, 소듐 tert-부톡시드 1.1g을 반응 용기에 넣고 톨루엔 30 mL에 녹이고 24시간 동안 환류하였다. 반응이 완결된 후 반응 용액을 에틸아세테이트로 추출하고 수집한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 얻은 잔류물을 실리카젤 컬럼크로마토그래피로 분리하고 정제하여 2.1 g (수율: 49 %)의 화합물 53을 얻었다. 상기 화합물 53을 LC-MS 및 1H -NMR로 확인하였다.

[0553] **합성예 7: 화합물 58의 합성**



[0554]

[0555] 중간체 58-1의 합성

[0556] (3-브로모페닐)트리페닐실란 (CAS# = 185626-73-7)을 Pd촉매 조건하에서 아닐린과 반응하여 중간체 58-1을 얻었다. 상기 중간체 58-1을 LC-MS로 확인하였다.

[0557] C₃₀H₂₅NSi : M+1 428.22

[0558] 중간체 58-2의 합성

[0559] 상기 중간체 58-1을 Pd 촉매 조건하에서 디클로로-6-페닐트리아진(CAS# = 1700-02-3)과 반응하여 58-2을 얻었다. 상기 중간체 58-2을 LC-MS로 확인하였다.

[0560] C₃₉H₂₉ClN₄Si : M+1 617.32

[0561] 화합물 58의 합성

[0562] 중간체 58-2 3.4 g, (3-(트리페닐실릴)페닐)보론산 (CAS#=1253912-58-1) 2.52 g, 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 0.25 g, 탄산칼륨 1.9 g을 반응 용기에 넣고 톨루엔 40 mL, 에탄올 10 mL, 증류수 10mL에 녹이고 24시간 동안 환류하였다. 반응이 완결된 후 반응 용액을 에틸아세테이트로 추출하고 수집한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 얻은 잔류물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 분리하고 정제하여 3.08 g (수율: 61%)의 화합물 58을 얻었다. 상기 화합물 58을 LC-MS 및 ¹H-NMR로 확인하였다.

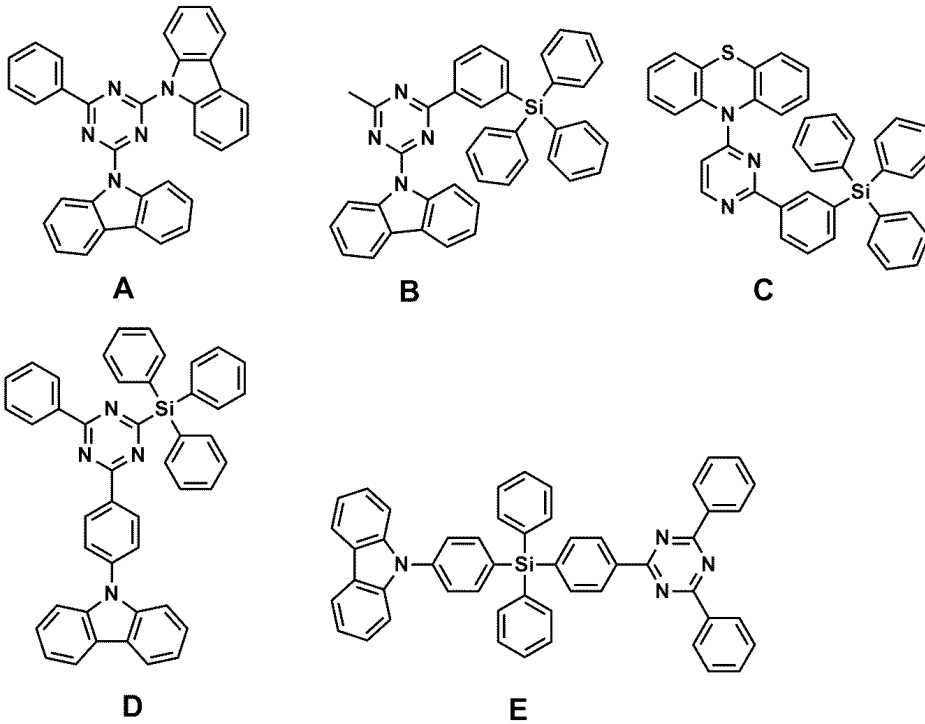
[0563] 상기 합성예 1 내지 7에서 합성된 화합물들의 ¹H NMR 및 MS/FAB을 하기 표 1에 나타내었다.

[0564] 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

[0565]

화합물	¹ H NMR (CDCl ₃ , 400 MHz)	MS/FAB	
		Found	calc.
3	8.54 (d, 2H), 8.37 (d, 1H), 8.19 (d, 2H), 7.92 (d, 2H), 7.87 (s, 1H), 7.63 (t, 1H), 7.57-7.54 (m, 3H), 7.5 (t, 2H), 7.45-7.32 (m, 17H), 7.2 (t, 2H), 7.12 (t, 2H)	746.33	745.27
4	8.95(s, 2H), 8.37-8.32 (m, 3H), 7.87-7.82 (m, 3H), 7.65-7.60 (m, 2H), 7.55 (d, 1H), 7.49 (d, 2H), 7.45-7.32 (m, 15H), 7.11 (d, 2H), 1.43 (s, 12H)	970.69	969.52
8	8.54 (d, 1H), 8.36 (d, 2H), 7.93 (s, 2H), 7.88-7.74 (m, 2H), 7.76 (t, 2H), 7.56 (d, 2H), 7.45-7.32 (m, 30H), 7.29-7.22 (m, 2H), 7.12 (t, 1H)	940.28	939.32
18	8.55 (d, 1H), 8.3 (d, 1H), 7.98-7.90 (m, 4H), 7.82 (d, 1H), 7.8 (s, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.67-7.50 (m, 7H), 7.44-7.40 (m, 7H), 7.32-7.22 (m, 20H), 7.11 (t, 1H)	848.33	847.28
22	8.55(d, 1H), 8.37-8.32 (m, 3H), 8.22 (d, 1H), 7.94 (d, 1H), 7.87 (s, 1H), 7.69-7.62 (m, 2H), 7.56 (d, 1H), 7.51-7.45 (m, 15H), 7.39-7.32 (m, 19H), 7.26 (t, 1H), 7.16 (t, 1H)	915.23	914.33
53	8.38(d, 1H), 7.87 (s, 1H), 7.62 (t, 1H), 7.56 (d, 1H), 7.46 (m, 12H), 7.38 (d, 18H), 7.22 (t, 4H), 7.09 (d, 4H), 6.99 (t, 2H)	917.33	916.34
58	8.38-8.32 (m, 3H), 7.88 (s, 1H), 7.62 (t, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.50-7.35 (m, 34H), 7.30 (s, 1H), 7.24 (t, 2H), 7.17 (t, 1H), 7.12 (d, 1H), 7.05 (t, 1H)	917.29	916.34



[0576]

[0577] **평가예 1**

[0578]

상기 실시예 1 내지 7 및 비교예 1 내지 5에서 제작된 유기 발광 소자의 특성을 평가하기 위하여 전류 밀도 10mA/cm²에서의 구동 전압, 전류 밀도 및 최대 양자 효율을 측정하였다. 유기 발광 소자의 구동 전압 및 전류 밀도는 소스 미터(Keithley Instrument사, 2400 series)를 이용하여 측정하였으며, 최대 양자 효율은 하마마츠 포토닉스 사의 외부 양자 효율 측정 장치 C9920-2-12를 사용하여 측정하였다. 최대 양자 효율 평가에 있어서 가장 감도의 교정을 한 휘도계를 이용하여 휘도/전류 밀도를 측정하고, 완전확산 반사면을 상정한 각도 휘도 분포(Lambertian)을 가정하여 최대 양자 효율을 환산하였다. 유기 발광 소자의 특성 평가 결과는 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

[0579]

구분	발광층 중 호스트	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	최대양자효율 (%)	발광색
실시예 1	화합물 3	3.6	2.3	18.9	청색
실시예 2	화합물 4	3.8	2.3	18.2	청색
실시예 3	화합물 8	4.1	2.3	17.3	청색
실시예 4	화합물 18	4.5	2.3	20.2	청색
실시예 5	화합물 22	3.9	2.3	21.3	청색
실시예 6	화합물 53	4.1	2.3	19.1	청색
실시예 7	화합물 58	4.3	2.3	21.5	청색
비교예 1	A	4.6	2.3	13.3	청색
비교예 2	B	4.7	2.3	12.9	청색
비교예 3	C	4.9	2.3	13.1	청색
비교예 4	D	4.3	2.3	8.9	청색
비교예 5	E	5.1	2.3	14.3	청색

[0580]

상기 표 2로부터, 본 발명의 화합물을 발광층의 호스트 재료로 사용한 경우, 비교예 화합물을 호스트로 사용한 경우에 대비하여, 구동 전압이 저하되고, 발광 효율 및 최대 양자 효율이 증가하는 효과를 얻을 수 있다.

[0581]

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 정해져

야 할 것이다.

부호의 설명

- [0582] 10: 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)	杂环化合物和包括其的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020200062465A	公开(公告)日	2020-06-04
申请号	KR1020180147692	申请日	2018-11-26
[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	안희춘 김형민 이예슬 임이랑 고수병 김영국		
发明人	안희춘 김형민 엄현아 이예슬 임이랑 고수병 김영국		
IPC分类号	H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0094 C07F7/0812 H01L51/5024 C07F7/0814 H01L51/0059 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0085 H01L51/5016 C09K11/06 C09K2211/1018 H01L51/0061 H01L51/5012 H01L51/504 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5076 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/5096 H01L2251/552		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

杂环化合物由式1表示。有机发光装置包括：第一电极；以及第二电极。面对第一电极的第二电极；在第一电极和第二电极之间并包括发光层的有机层，其中有机发光器件包括杂环化合物中的至少一个。

10

190

150

110