



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0104087
(43) 공개일자 2019년09월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0069 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0024720
(22) 출원일자 2018년02월28일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
예지명
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
김명숙
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(74) 대리인
리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

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

대표도 - 도1

10

190

150

110

(52) CPC특허분류

C09K 2211/1051 (2013.01)

C09K 2211/1096 (2013.01)

(72) 발명자

유병욱

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

고수병

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

윤지환

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

황재훈

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

명세서

청구범위

청구항 1

제1전극;

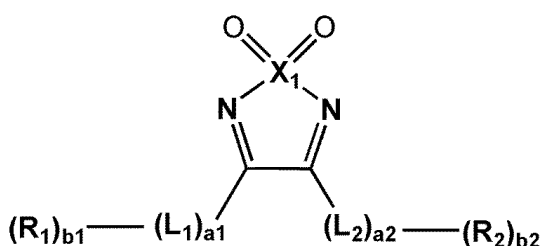
상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;

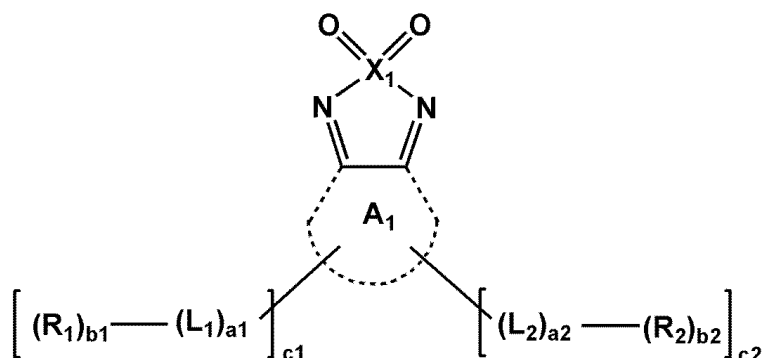
을 포함하고,

상기 발광층은 하기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 화합물을 포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 1A>



<화학식 1B>



상기 화학식 1A 및 화학식 1B 중,

고리 A₁는 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

X₁은 S 또는 Se이고,

L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

a₁ 및 a₂는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a₁이 2 이상일 경우 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고, a₂가 2 이상일 경우 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하고,

a₁이 0일 경우 *-(L₁)_{a1}-*'은 단일결합이고, a₂가 0일 경우 *-(L₂)_{a2}-*'은 단일결합이고,

R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된

C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 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 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -N(Q₁)(Q₂), -P(=O)(Q₁)(Q₂), -P(=S)(Q₁)(Q₂), -S(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -S(=O)₂(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되며,

R₁ 및 R₂ 중 적어도 하나는 전자 주개 그룹(electron donating group)이고,

b₁ 및 b₂는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

b₁이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁은 서로 동일하거나 상이하고, b₂가 2 이상일 경우 2 이상의 R₂는 서로 동일하거나 상이하고,

c₁ 및 c₂는 서로 독립적으로 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

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

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, 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, -F, -Cl, -Br,

-I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

* 및 *'는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

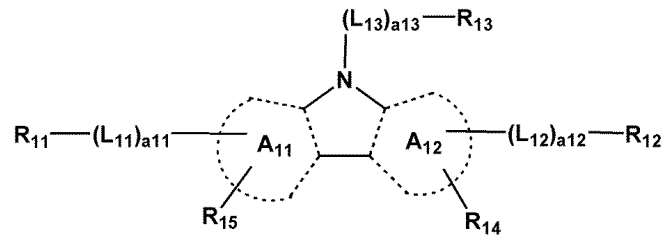
청구항 2

제1항에 있어서,

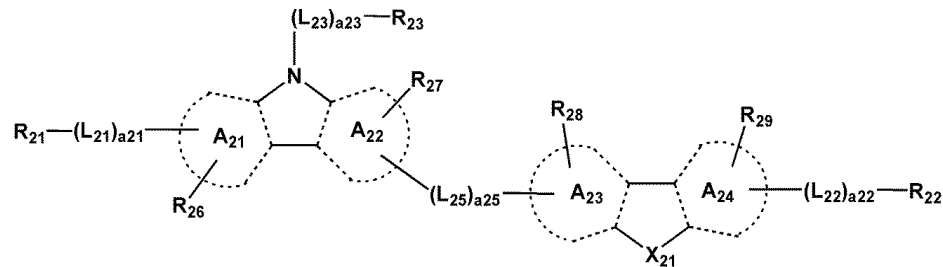
상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 상기 도펀트는 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 화합물을 포함하고,

상기 호스트는 하기 화학식 11-HT로 표시되는 화합물, 하기 화학식 21-HT로 표시되는 화합물, 하기 화학식 31-HT로 표시되는 화합물, 하기 화학식 41-HT로 표시되는 화합물, 하기 화학식 51-HT로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 61-ET로 표시되는 화합물, 하기 화학식 71-ET로 표시되는 화합물로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자:

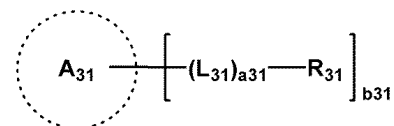
<화학식 11-HT>



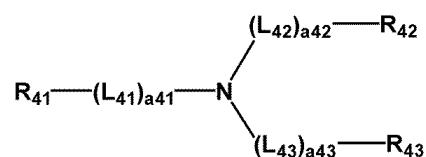
<화학식 21-HT>



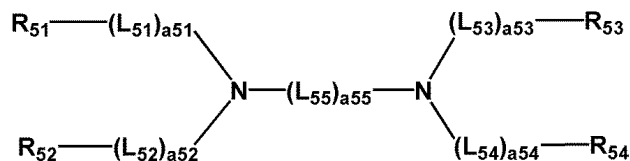
<화학식 31-HT>



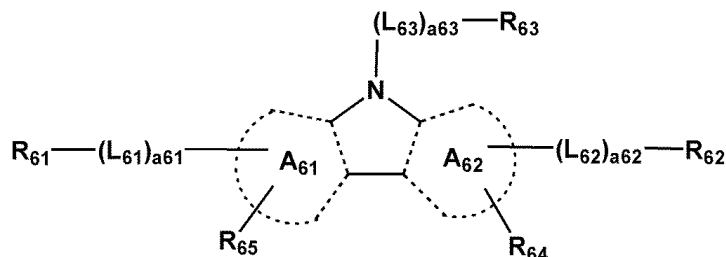
<화학식 41-HT>



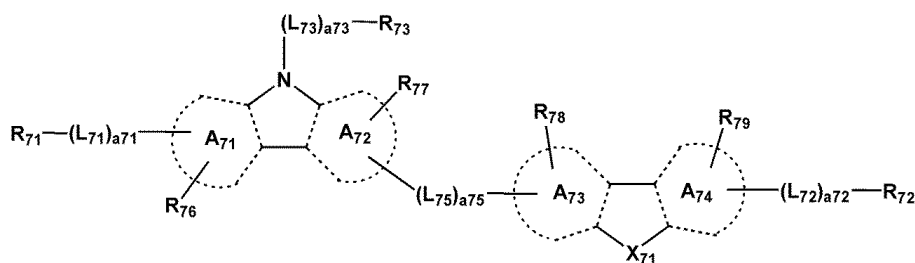
<화학식 51-HT>



<화학식 61-ET>



<화학식 71-ET>



상기 화학식 11-HT, 21-HT, 31-HT, 41-HT 및 51-HT 중,

X_{21} 은 O, S, N-[(L_{24}) a_{24} -R $_{24}$], B-[(L_{24}) a_{24} -R $_{24}$], P-[(L_{24}) a_{24} -R $_{24}$], C(R $_{24}$)(R $_{25}$) 또는 Si(R $_{24}$)(R $_{25}$)이고,

A $_{11}$, A $_{12}$ 및 A $_{21}$ 내지 A $_{24}$ 는 서로 독립적으로, C $_5$ -C $_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는 π 전자 결핍성 질소-비함유 C $_2$ -C $_{30}$ 헤테로시클릭 그룹이고,

A $_{31}$ 은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있는 치환 또는 비치환된 C $_5$ -C $_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있는 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-비함유 C $_2$ -C $_{30}$ 헤테로시클릭 그룹이되, A $_{31}$ 은 치환 또는 비치환된 스파이로바이플루오렌 그룹 및 치환 또는 비치환된 안트라센 그룹이 아니고,

L $_{11}$ 내지 L $_{13}$, L $_{21}$ 내지 L $_{25}$, L $_{31}$, L $_{41}$ 내지 L $_{43}$ 및 L $_{51}$ 내지 L $_{55}$ 는 서로 독립적으로,

단일 결합, C $_5$ -C $_{30}$ 카보시클릭 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 C $_2$ -C $_{30}$ 헤테로시클릭 그룹; 및

수소, 중수소, 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, π 전자 결핍성 질소-비함유 C $_1$ -C $_{10}$ 헤테로시클로알킬기, C $_3$ -C $_{10}$ 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C $_1$ -C $_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, C $_6$ -C $_{60}$ 아릴기, C $_6$ -C $_{60}$ 아릴옥시기, C $_6$ -C $_{60}$ 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C $_1$ -C $_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -Si(Q $_{51}$)(Q $_{52}$)(Q $_{53}$), -N(Q $_{51}$)(Q $_{52}$) 및 -B(Q $_{51}$)(Q $_{52}$) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C $_5$ -C $_{30}$ 카보시클릭 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 C $_2$ -C $_{30}$ 헤테로시클릭 그룹;

중에서 선택되고,

a $_{11}$ 내지 a $_{13}$, a $_{21}$ 내지 a $_{25}$, a $_{31}$, a $_{41}$ 내지 a $_{43}$ 및 a $_{51}$ 내지 a $_{55}$ 는 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

R_{11} , R_{12} , R_{14} , R_{15} , R_{21} , R_{22} 및 R_{24} 내지 R_{29} 는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, 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, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, 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, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, $-Si(Q_{51})(Q_{52})(Q_{53})$, $-N(Q_{51})(Q_{52})$ 및 $-B(Q_{51})(Q_{52})$ 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, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

$-Si(Q_{41})(Q_{42})(Q_{43})$, $-N(Q_{41})(Q_{42})$ 및 $-B(Q_{41})(Q_{42})$;

중에서 선택되고,

R_{13} , R_{23} , R_{31} , R_{41} 내지 R_{43} 및 R_{51} 내지 R_{54} 는 서로 독립적으로,

C_3 - C_{10} 시클로알킬기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, 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, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, $-Si(Q_{51})(Q_{52})(Q_{53})$, $-N(Q_{51})(Q_{52})$ 및 $-B(Q_{51})(Q_{52})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

$-Si(Q_{41})(Q_{42})(Q_{43})$, $-N(Q_{41})(Q_{42})$ 및 $-B(Q_{41})(Q_{42})$;

중에서 선택되고,

R_{51} 과 R_{52} 는 선택적으로, 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고, R_{53} 과 R_{54} 는 선택적으로, 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,

b31은 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

상기 Q_{41} 내지 Q_{43} 및 Q_{51} 내지 Q_{53} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 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, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 -

C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

상기 화학식 61-ET 및 71-ET 중

X₇₁은 O, S, N-[(L₇₄)_{a74}-R₇₄], B-[(L₇₄)_{a74}-R₇₄], P-[(L₇₄)_{a74}-R₇₄], C(R₇₄)(R₇₅) 또는 Si(R₇₄)(R₇₅)이고,

A₆₁, A₆₂ 및 A₇₁ 내지 A₇₄는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹이고,

L₆₁ 내지 L₆₃ 및 L₇₁ 내지 L₇₅는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

a₆₁ 내지 a₆₃ 및 a₇₁ 내지 a₇₅는 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

R₆₁ 내지 R₆₅ 및 R₇₁ 내지 R₇₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)₂(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

상기 화학식 61-ET의 i) A₆₁ 및 A₆₂ 적어도 하나는 π 전자 결핍성 질소-함유 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹이거나, ii) R₆₁ 내지 R₆₅ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

상기 화학식 71-ET의 i) A₇₁ 내지 A₇₄ 적어도 하나는 π 전자 결핍성 질소-함유 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹이거나, ii) R₇₁ 내지 R₇₃ 및 R₇₆ 내지 R₇₉ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

상기 치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 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,

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)₂(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, -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)₂(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

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

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 터페닐기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

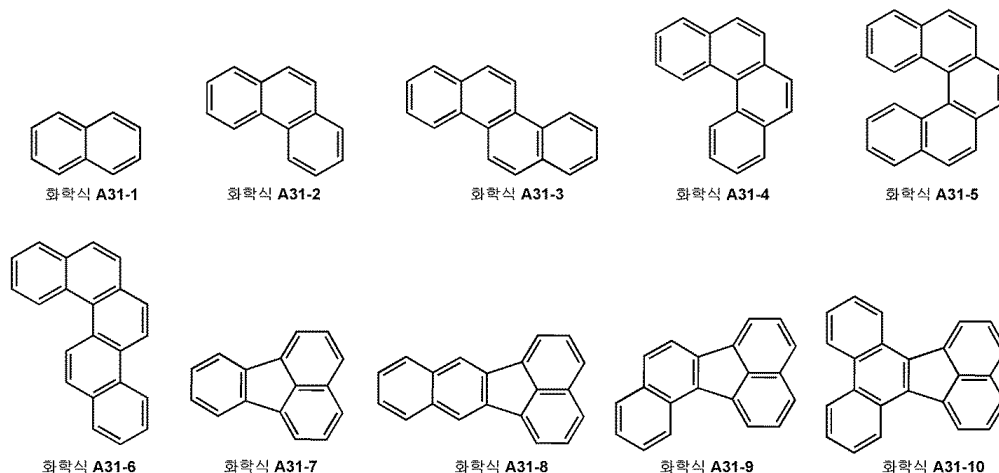
청구항 3

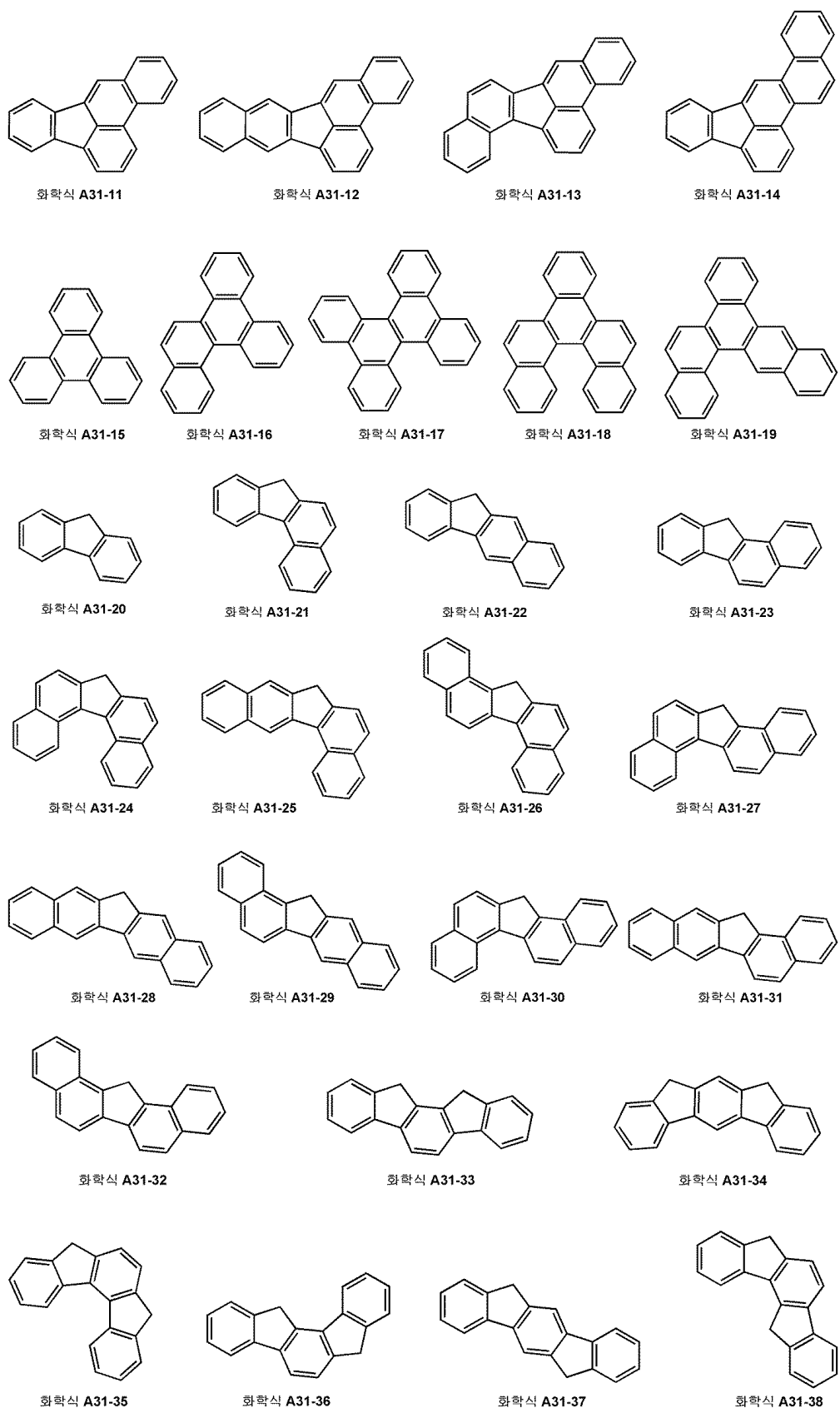
제2항에 있어서,

A₁₁, A₁₂ 및 A₂₁ 내지 A₂₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피롤 그룹, 시클로펜텐 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 인돌 그룹, 인텐 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹 중에서 선택되고,

A₃₁은 하기 화학식 A31-1 내지 A31-38로부터 유래된 그룹 중에서 선택되고,

A₆₁, A₆₂ 및 A₇₁ 내지 A₇₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피롤 그룹, 시클로펜텐 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 인돌 그룹, 인텐 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹 및 벤조퀴녹살린 그룹 중에서 선택된, 유기 발광 소자:





청구항 4

제1항에 있어서,

상기 발광층에 포함된 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 화합물은 700nm 이상의 최대 발광 파장을 갖는 근 적외선(NIR) 발광 화합물인, 유기 발광 소자.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 발광층에 포함된 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시된 화합물은 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고, 상기 발광층이 지연 형광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 6

제1항에 있어서, 상기 유기층이,

상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역; 및

상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역;

을 더 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 7

제6항에 있어서,

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

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

청구항 8

제6항에 있어서,

상기 정공 수송 영역이 p-도펀트를 포함하고,

상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하인, 유기 발광 소자.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 p-도펀트는 시아노기-함유 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 10

제6항에 있어서,

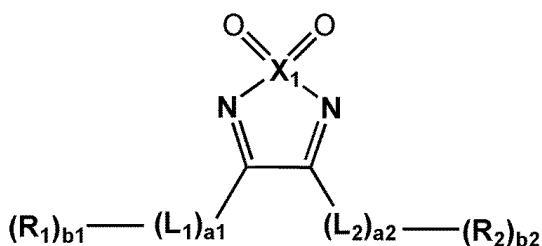
상기 전자 수송 영역이 트리아졸-함유 화합물 또는 벤조트리아졸-함유 화합물을 포함하고,

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

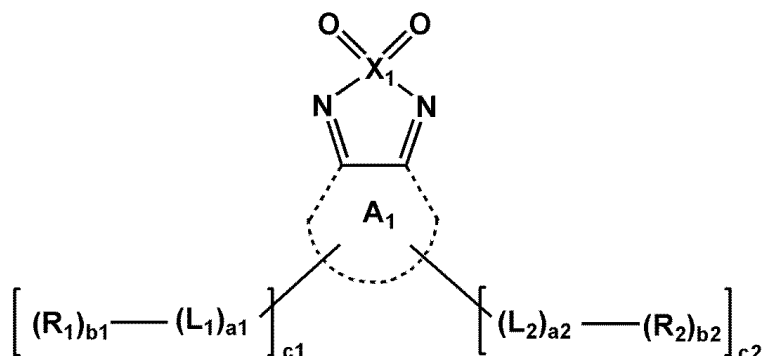
청구항 11

하기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 1A>



<화학식 1B>



상기 화학식 1A 및 화학식 1B 중,

고리 A₁는 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

X₁은 S 또는 Se이고,

L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

a₁ 및 a₂는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a₁이 2 이상일 경우 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고, a₂가 2 이상일 경우 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하고,

a₁이 0일 경우 *-(L₁)_{a1}-*'은 단일결합이고, a₂가 0일 경우 *-(L₂)_{a2}-*'은 단일결합이고,

R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 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 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -N(Q₁)(Q₂), -P(=O)(Q₁)(Q₂), -P(=S)(Q₁)(Q₂), -S(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -S(=O)₂(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되되,

R₁ 및 R₂ 중 적어도 하나는 전자 주개 그룹(electron donating group)이고,

단, 화학식 1A에서, (R₁)_{b1}-(L₁)_{a1}-* 및 (R₂)_{b2}-(L₂)_{a2}-*는 할로젠, 페녹시, 페닐티오, 알킬티오 또는 알콕시 그룹은 아니고,

b₁ 및 b₂는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

b₁이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁은 서로 동일하거나 상이하고, b₂가 2 이상일 경우 2 이상의 R₂는 서로 동일하거나 상이하고,

c₁ 및 c₂는 서로 독립적으로 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴

기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

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

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

* 및 *'는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 12

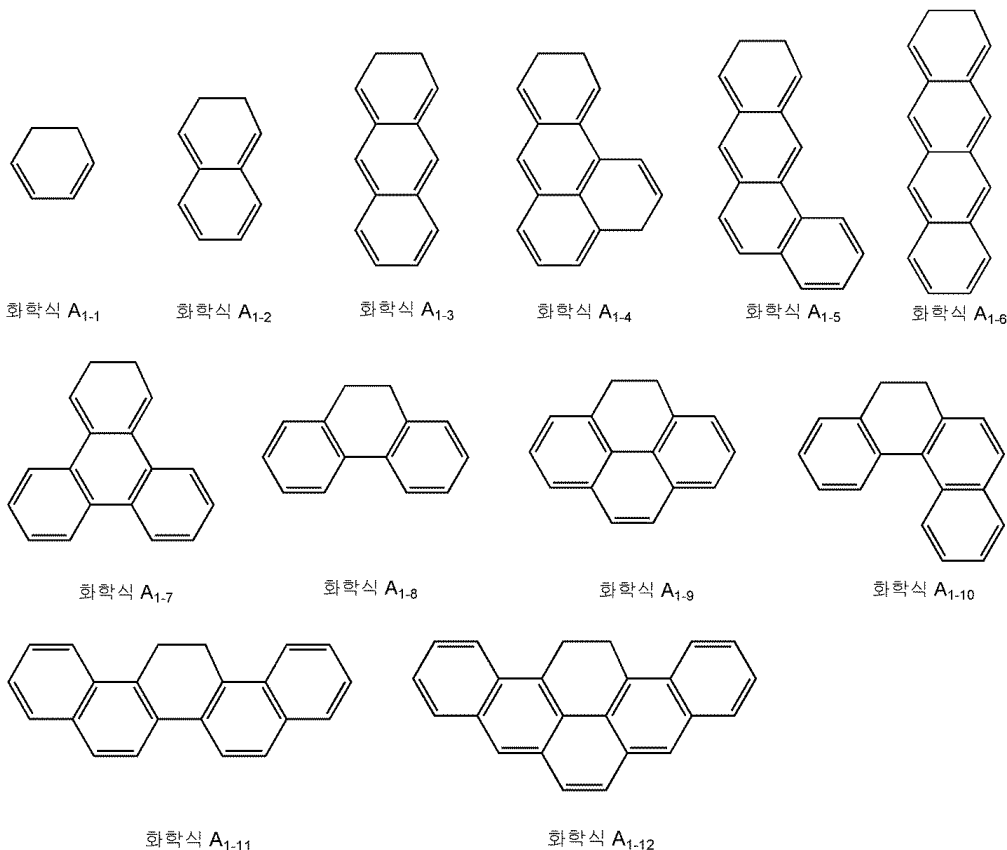
제11항에 있어서,

상기 고리 A₁는 시클로헥사디엔(cyclohexadiene) 그룹, 디히드로나프탈렌(dihydronaphthalene) 그룹, 디히드로안트라센 그룹(dihydroanthracene), 디히드로벤조안트라센 그룹(dihydrobenzoanthracene), 디히드로페난트렌(dihydrophenanthrene) 그룹, 디히드로벤조페난트렌(dihydrobenzophenanthrene) 그룹, 디히드로트리페닐렌(dihydrotriphenylene) 그룹, 디히드로나프타센(dihydronaphthacene) 그룹, 디히드로파이렌(dihdropyrene) 그룹, 디히드로크라이센(dihydrochrysene) 그룹, 디히드로피센(dihdropicene) 및 디히드로벤조펜타펜(dihydrobenzopentaphene) 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 13

제11항에 있어서,

상기 고리 A₁는 하기 화학식 A₁₋₁ 내지 화학식 A₁₋₁₂ 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:



청구항 14

제11항에 있어서,

상기 L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로, 페닐렌(phenylene)기, 펜탈레닐렌(pentalenylen)기, 인덴일렌(indenylen)기, 나프틸렌(naphthylene)기, 아줄레닐렌(azulenylene)기, 헵탈레닐렌(heptalenylene)기, 인다세닐렌(indacenylene)기, 아세나프틸렌(acenaphthylene)기, 플루오레닐렌(fluorenylen)기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌(phenalenylene)기, 페난트레닐렌(phenanthrenylene)기, 안트라세닐렌(anthracenylene)기, 플루오란테닐렌(fluoranthenylene)기, 트리페닐레닐렌(triphenylenylene)기, 파이레닐렌(pyrenylene)기, 크라이세닐렌(chrysenylene)기, 나프타세닐렌(naphthacenylene)기, 피세닐렌(picenylene)기, 페릴레닐렌(perylene)기, 펜타페닐렌(pentaphenylene)기, 헥사세닐렌(hexacenylene)기, 펜타세닐렌(pentacenylene)기, 루비세닐렌(rubicenylene)기, 코로네닐렌(coronenylene)기, 오발레닐렌(ovalenylen)기, 피롤일렌(pyrrolylen)기, 티오펜일렌(thiophenylen)기, 퓨라닐렌(furanylen)기, 이미다졸일렌(imidazolylene)기, 피라졸일렌(pyrazolylene)기, 티아졸일렌(thiazolylene)기, 이소티아졸일렌(isothiazolylene)기, 옥사졸일렌(oxazolylene)기, 이소옥사졸일렌(isooxazolylene)기, 피리디닐렌(pyridinylen)기, 피라지닐렌(pyrazinylen)기, 피리미디닐렌(pyrimidinylen)기, 피리다지닐렌(pyridazinylen)기, 이소인돌일렌(isoindolylen)기, 인돌일렌(indolylen)기, 인다졸일렌(indazolylene)기, 푸리닐렌(purinylen)기, 퀴놀리닐렌(quinolinylen)기, 이소퀴놀리닐렌(isoquinolinylen)기, 벤조퀴놀리닐렌(benzoquinolinylen)기, 프탈라지닐렌(phthalazinylene)기, 나프티리디닐렌(naphthyridinylen)기, 퀴녹살리닐렌(quinoxalinylen)기, 퀴나졸리닐렌(quinazolinylen)기, 시놀리닐렌(cinnolinylen)기, 카바졸일렌(carbazolylene)기, 페난트리디닐렌(phenanthridinylen)기, 아크리디닐렌(acridinylen)기, 페난트롤리닐렌(phenanthrolinylen)기, 페나지닐렌(phenazinylen)기, 벤조이미다졸일렌(benzoimidazolylene)기, 벤조퓨라닐렌(benzofuranylen)기, 벤조티오펜일렌(benzothiophenylen)기, 이소벤조티아졸일렌(isobenzothiazolylene)기, 벤조옥사졸일렌(benzooxazolylene)기, 이소벤조옥사졸일렌(isobenzooxazolylene)기, 트리아졸일렌(triazolylene)기, 테트라졸일렌(tetrazolylene)기, 옥사디아졸일렌

(oxadiazolylene)기, 트리아지닐렌(triazinylene)기, 디벤조퓨라닐렌(dibenzofuranylene)기, 디벤조티오펜일렌(dibenzothiophenylene)기, 벤조카바졸일렌기 및 디벤조카바졸일렌기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기 및 이미다조피리디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인테닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 피롤일렌기, 티오펜일렌기, 퓨라닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 이소인돌일렌기, 인돌일렌기, 인다졸일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 카바졸일렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 트리아지닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜일렌기, 벤조카바졸일렌기 및 디벤조카바졸일렌기; 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 15

제11항에 있어서,

상기 a1 및 a2는 서로 독립적으로 0, 1 또는 2이되,

단, 화학식 1A에서, a1 및 a2는 동시에 0이 아닌, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 16

제11항에 있어서,

상기 R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, -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, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피

라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, -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, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및 -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂) 및 -C(=O)(Q₁); 중에서 선택되,

R₁ 및 R₂ 중 적어도 하나는 전자 주개 그룹(electron donating group)이고,

Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 각각 제11항에 기재된 바와 같은, 헤테로시클릭 화합물.

청구항 17

제11항에 있어서,

상기 R₁ 및 R₂ 는 서로 독립적으로

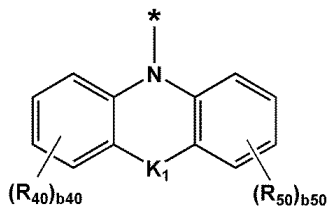
수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기; 및

하기 화학식 5-1 내지 5-6으로 표시된 그룹 중에서 선택되,

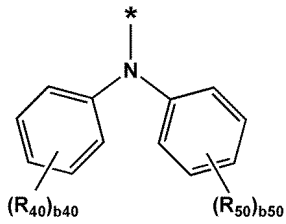
R₁ 및 R₂ 중 적어도 하나는 전자 주개 그룹(electron donating group)인, 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 5-1>

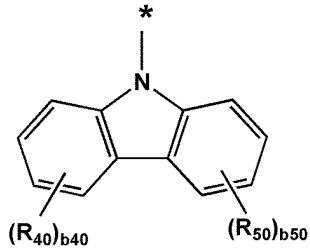
<화학식 5-2>



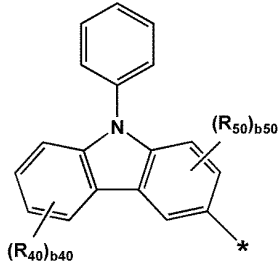
<화학식 5-3>



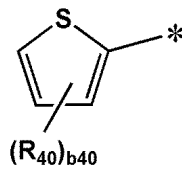
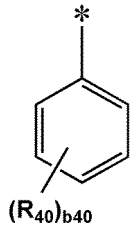
<화학식 5-4>



<화학식 5-5>



<화학식 5-6>



상기 화학식 5-1 내지 5-6 중,

K_1 은 $^{*}-C(R_{20})(R_{30})-^{*}$, $^{*}-N(R_{20})-^{*}$ 및 $^{*}-Si(R_{20})(R_{30})-^{*}$ 중에서 선택되고

R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 에 대한 설명은 제11항에 기재된 R_1 및 R_2 에 대한 설명과 같고,

b_{40} 및 b_{50} 은 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

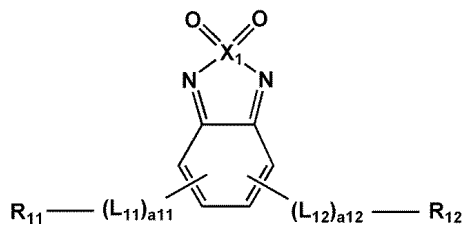
* 는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 18

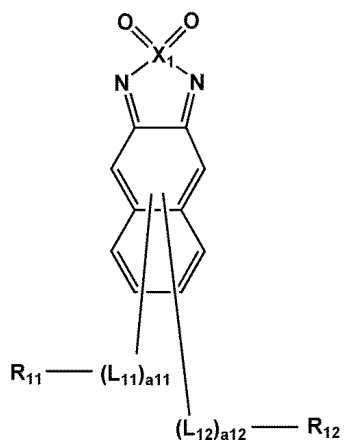
제11항에 있어서,

상기 화학식 1B로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1B-1 내지 1B-4로 표시된 화합물인, 헤테로시클릭 화합물:

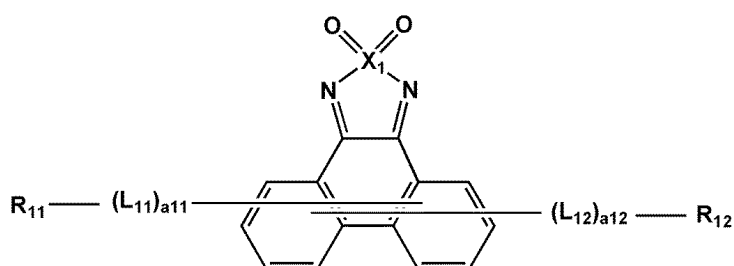
<화학식 1B-1>



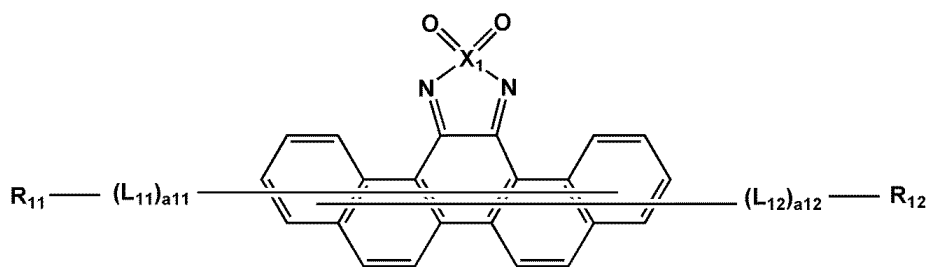
<화학식 1B-2>



<화학식 1B-3>



<화학식 1B-4>



상기 화학식 1B-1 내지 1B-4 중,

X_1 에 대한 설명은 제11항에 기재된 바와 같고,

L_{11} 및 L_{12} 에 대한 설명은 제11항에 기재된 L_1 및 L_2 에 대한 설명과 같고,

a_{11} 및 a_{12} 에 대한 설명은 제11항에 기재된 a_1 및 a_2 에 대한 설명과 같고,

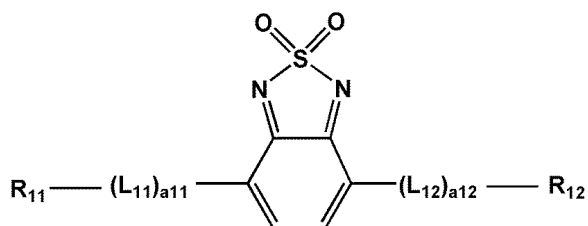
R_{11} 및 R_{12} 에 대한 설명은 제11항에 기재된 R_1 및 R_2 에 대한 설명과 같다.

청구항 19

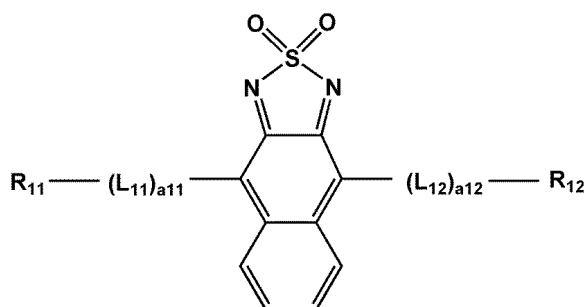
제11항에 있어서,

상기 화학식 1B로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1B-a 내지 1B-d로 표시된 화합물인, 헤테로시클릭 화합물:

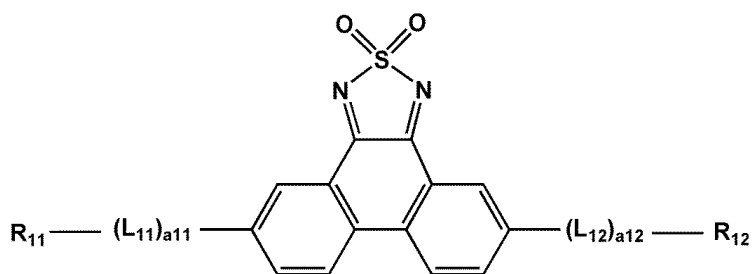
<화학식 1B-a>



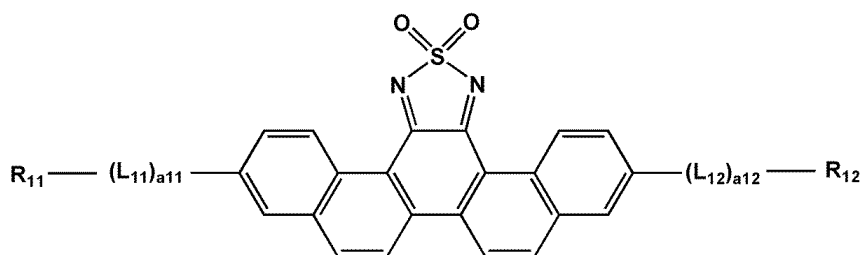
<화학식 1B-b>



<화학식 1B-c>



<화학식 1B-d>



상기 화학식 1B-a 내지 1B-d 중,

L_{11} 및 L_{12} 에 대한 설명은 제11항에 기재된 L_1 및 L_2 에 대한 설명과 같고,

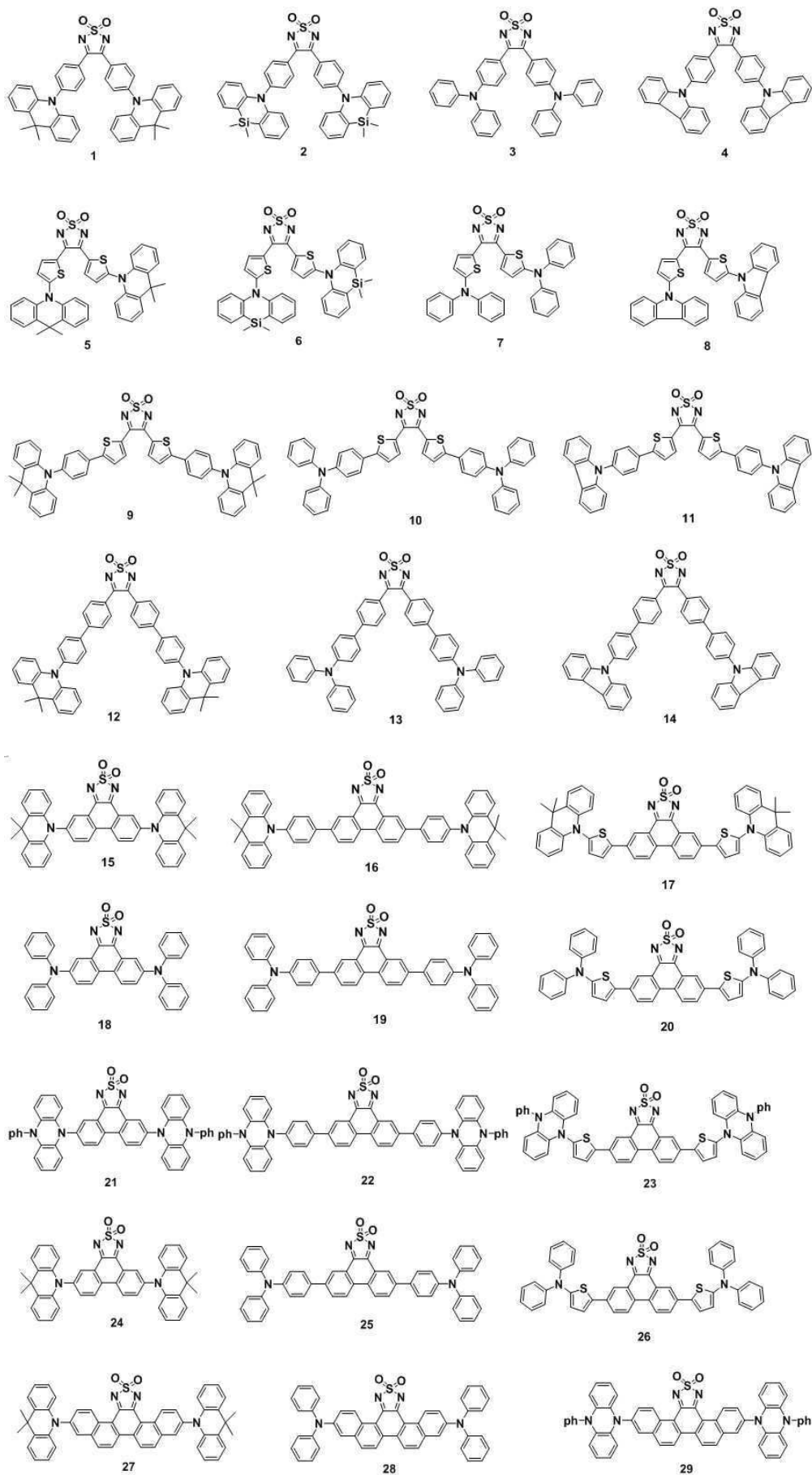
a_{11} 및 a_{12} 에 대한 설명은 제11항에 기재된 a_1 및 a_2 에 대한 설명과 같고,

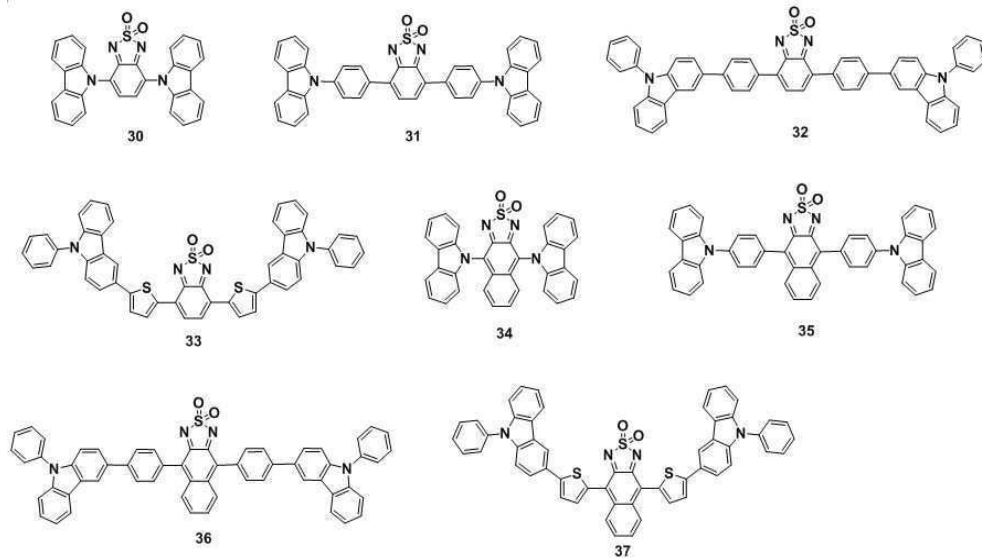
R_{11} 및 R_{12} 에 대한 설명은 제11항에 기재된 R_1 및 R_2 에 대한 설명과 같다.

청구항 20

제11항에 있어서,

상기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1 내지 37 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:





발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

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

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

발명의 내용

해결하려는 과제

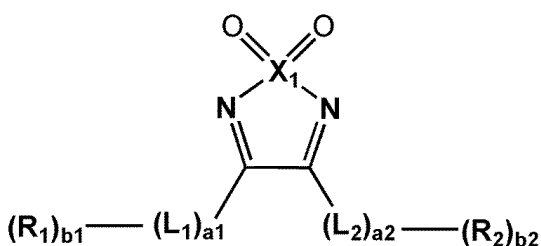
[0004] 헤테로시클릭 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0005] 일 측면에 따르면,

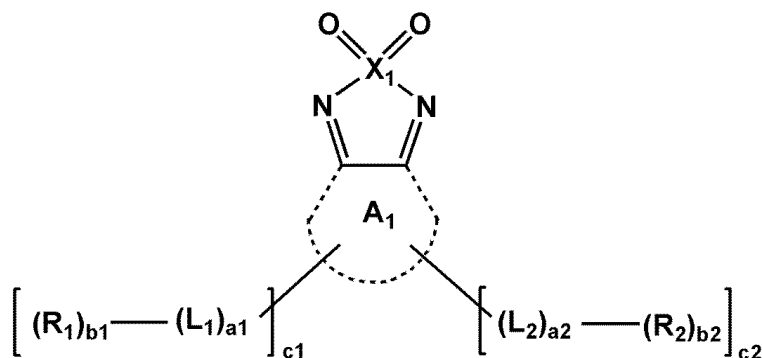
[0006] 하기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 헤테로시클릭 화합물이 제공된다.

[0007] <화학식 1A>



[0008]

[0009] <화학식 1B>



[0010]

[0011] 상기 화학식 1A 및 화학식 1B 중,

[0012] 고리 A₁는 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0013] X₁은 S 또는 Se이고,

[0014] L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0015] a₁ 및 a₂는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0016] a₁이 2 이상일 경우 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고, a₂가 2 이상일 경우 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하고,

[0017] a₁이 0일 경우 *-(L₁)_{a1}-*'은 단일결합이고, a₂가 0일 경우 *-(L₂)_{a2}-*'은 단일결합이고,

[0018] R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 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 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -N(Q₁)(Q₂), -P(=O)(Q₁)(Q₂), -P(=S)(Q₁)(Q₂), -S(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -S(=O)₂(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되,

[0019] R₁ 및 R₂ 중 적어도 하나는 전자 주개 그룹(electron donating group)이고,

[0020] b₁ 및 b₂는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0021] b₁이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁은 서로 동일하거나 상이하고, b₂가 2 이상일 경우 2 이상의 R₂는 서로 동일하거나 상이하고,

[0022] c₁ 및 c₂는 서로 독립적으로 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0023] 상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하

나는,

[0024] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0025] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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;

[0026] 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;

[0027] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, 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

[0028] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0029] 중에서 선택되고,

[0030] 상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

[0031] * 및 *'는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0032] 다른 측면에 따르면, 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 발광층이 상기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0033] 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있는 바, 고품질의 유기 발광 소자 및 유기 발광 장치의 구현이 가능하다.

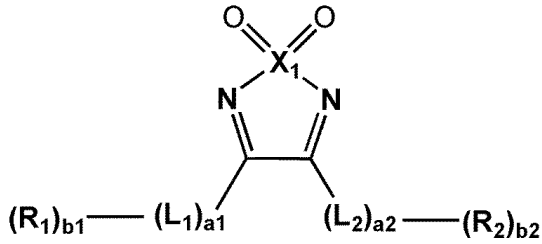
도면의 간단한 설명

[0034] 도 1 내지 4는 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 각각 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

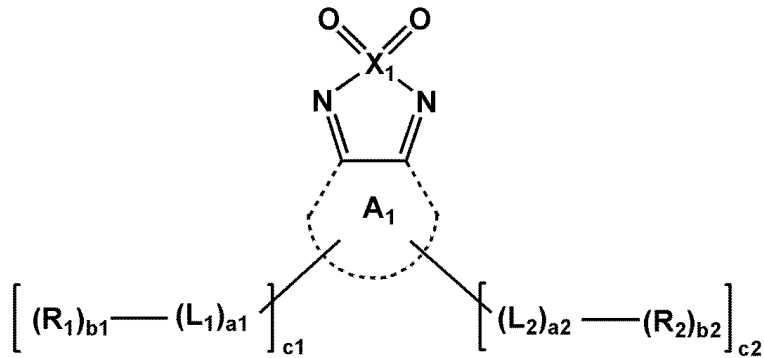
[0035] 상기 헤테로시클릭 화합물은 하기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시된다.

[0036] <화학식 1A>



[0037]

[0038] <화학식 1B>



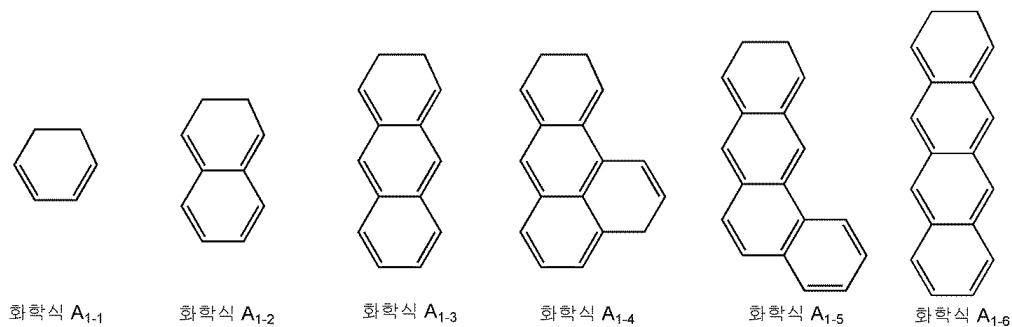
[0039]

[0040] 상기 화학식 1A 및 화학식 1B 중, 고리 A₁는 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

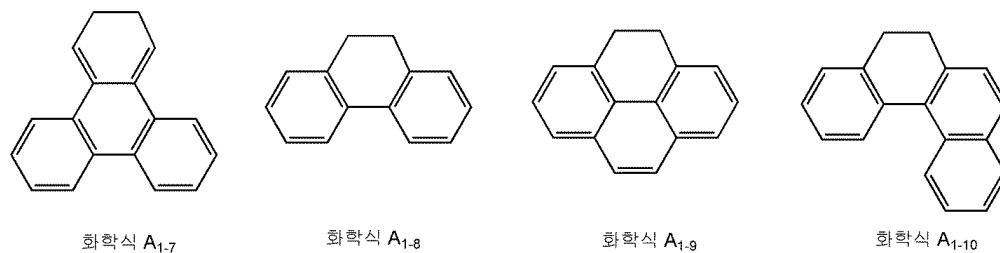
[0041] 일 구현예에 따르면, 상기 고리 A₁는 시클로헥사디엔(cyclohexadiene) 그룹, 디히드로나프탈렌(dihydronaphthalene) 그룹, 디히드로안트라센 그룹(dihydroanthracene), 디히드로벤조안트라센 그룹(dihydrobenzoanthracene), 디히드로페난트렌(dihydrophenanthrene) 그룹, 디히드로벤조페난트렌(dihydrobenzophenanthrene) 그룹, 디히드로트리페닐렌(dihydrotriphenylene) 그룹, 디히드로나프타센(dihydronaphthacene) 그룹, 디히드로파이렌(dihydropyrene) 그룹, 디히드로크라이센(dihydrochrysene) 그룹, 디히드로피센(dihdropicene) 및 디히드로벤조펜타펜 그룹(dihydrobenzopentaphene) 중에서 선택 선택될 수 있다.

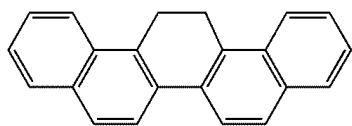
[0042] 다른 구현예에 있어서, 상기 고리 A₁는 하기 화학식 A₁₋₁ 내지 화학식 A₁₋₁₂ 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0043]

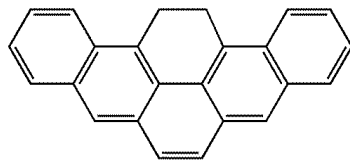


[0044]





화학식 A₁₋₁₁



화학식 A₁₋₁₂

[0045]

[0046]

상기 화학식 1A 또는 화학식 1B 중, X₁은 S 또는 Se일 수 있다. 예를 들어, X₁은 S일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0047]

상기 화학식 1A 또는 화학식 1B 중, L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0048]

일 구현예에 따르면, L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로 페닐렌(phenylene)기, 펜탈레닐렌(pentalenylene)기, 인데닐렌(indenylene)기, 나프틸렌(naphthylene)기, 아줄레닐렌(azulenylene)기, 헵탈레닐렌(heptalenylene)기, 인다세닐렌(indacenylene)기, 아세나프틸렌(acenaphthylene)기, 플루오레닐렌(fluorenylene)기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌(phenalenylene)기, 페난트레닐렌(phenanthrenylene)기, 안트라세닐렌(anthracenylene)기, 플루오란테닐렌(fluoranthenylene)기, 트리페닐레닐렌(triphenylenylene)기, 파이레닐렌(pyrenylene)기, 크라이세닐렌(chrysenylene)기, 나프타세닐렌(naphthacenylene)기, 피세닐렌(picenylene)기, 페틸레닐렌(ptylenylene)기, 펜타페닐렌(pentaphenylene)기, 헥사세닐렌(hexacenylene)기, 펜타세닐렌(pentacenylene)기, 루비세닐렌(rubicenylene)기, 코로네닐렌(coronenylene)기, 오발레닐렌(ovalenylene)기, 피롤일렌(pyrrolylene)기, 티오펜일렌(thiophenylene)기, 퓨라닐렌(furanylene)기, 이미다졸일렌(imidazolylene)기, 피라졸일렌(pyrazolylene)기, 티아졸일렌(thiazolylene)기, 이소티아졸일렌(isothiazolylene)기, 옥사졸일렌(oxazolylene)기, 이소옥사졸일렌(isooxazolylene)기, 피리디닐렌(pyridinylene)기, 피라지닐렌(pyrazinylene)기, 피리미디닐렌(pyrimidinylene)기, 피리다지닐렌(pyridazinylene)기, 이소인돌일렌(isoindolylene)기, 인돌일렌(indolylene)기, 인다졸일렌(indazolylene)기, 푸리닐렌(purinylene)기, 퀴놀리닐렌(quinolinylene)기, 이소퀴놀리닐렌(isoquinolinylene)기, 벤조퀴놀리닐렌(benzoquinolinylene)기, 프탈라지닐렌(phthalazinylene)기, 나프티리디닐렌(naphthyridinylene)기, 퀴녹살리닐렌(quinoxalinylene)기, 퀴나졸리닐렌(quinazolinylene)기, 시놀리닐렌(cinnolinylene)기, 카바졸일렌(carbazolylene)기, 페난트리디닐렌(phenanthridinylene)기, 아크리디닐렌(acridinylene)기, 페난트롤리닐렌(phenanthrolinylene)기, 페나지닐렌(phenazinylene)기, 벤조이미다졸일렌(benzoimidazolylene)기, 벤조퓨라닐렌(benzofuranylene)기, 벤조티오펜일렌(benzothiophenylene)기, 이소벤조티아졸일렌(isobenzothiazolylene)기, 벤조옥사졸일렌(benzooxazolylene)기, 이소벤조옥사졸일렌(isobenzooxazolylene)기, 트리아졸일렌(triazolylene)기, 테트라졸일렌(tetrazolylene)기, 옥사디아졸일렌(oxadiazolylene)기, 트리아지닐렌(triazinylene)기, 디벤조퓨라닐렌(dibenzofuranylene)기, 디벤조티오펜일렌(dibenzothiophenylene)기, 벤조카바졸일렌기 및 디벤조카바졸일렌기; 및

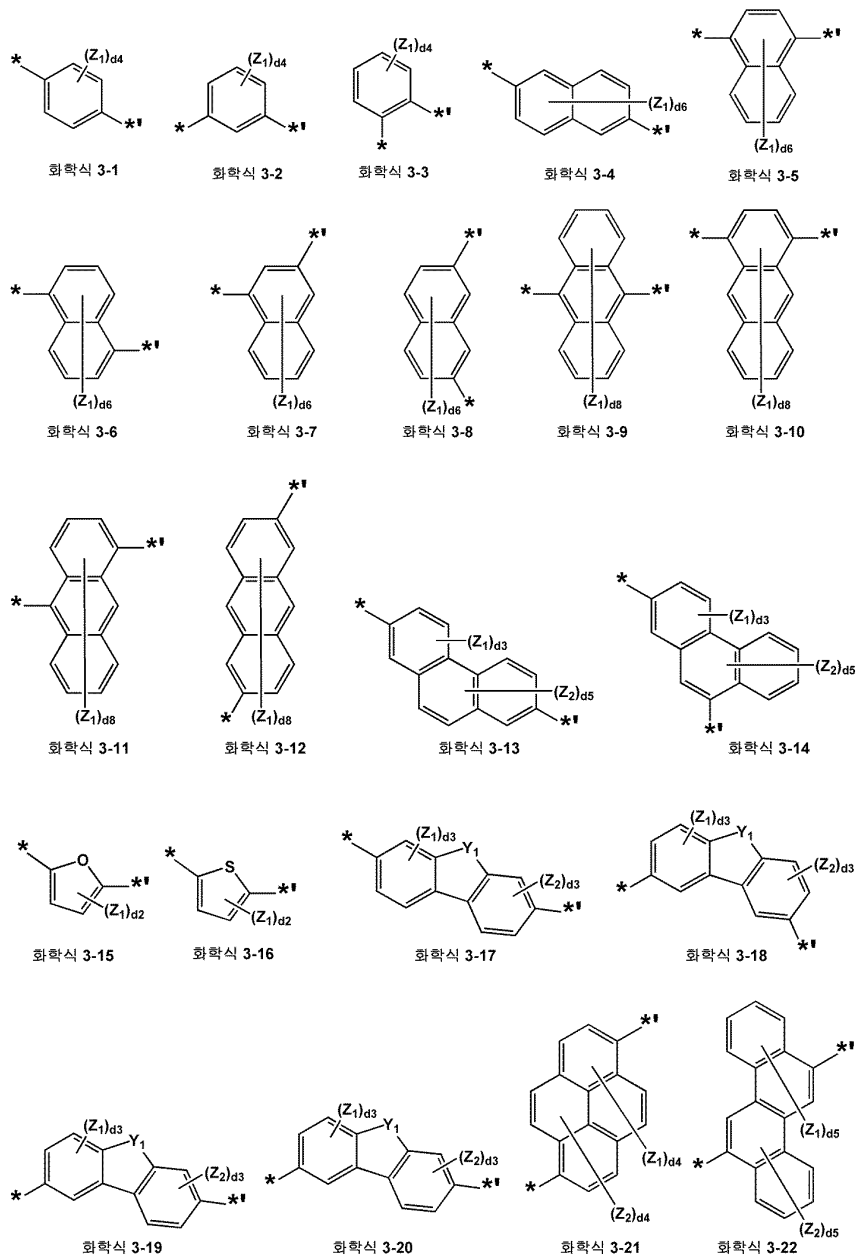
[0049]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기 및 이미다조피리디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌

기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 피롤일렌기, 티오펜일렌기, 퓨라닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 이소인돌일렌기, 인돌일렌기, 인다졸일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 카바졸일렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 트리아지닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜일렌기, 벤조카바졸일렌기 및 디벤조카바졸일렌기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0050] 예를 들어, 상기 L_1 내지 L_2 는 서로 독립적으로, 페닐렌기 또는 티오펜일렌기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0051] 다른 구현예에 따르면, 상기 L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로 하기 화학식 3-1 내지 3-22 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0053]

[0054]

[0055] 상기 화학식 3-1 내지 3-22 중,

- [0056] Y_1 은 O, S, C(Z_3)(Z_4), N(Z_5) 또는 Si(Z_6)(Z_7)이고,
- [0057] Z_1 내지 Z_7 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-비플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택되고,
- [0058] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로,
- [0059] C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기 및 퀴나졸리닐기; 및
- [0060] C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기 및 퀴나졸리닐기;
- [0061] 중에서 선택되고,
- [0062] d_2 는 0 내지 2 중에서 선택된 정수이고, d_3 는 0 내지 3 중에서 선택된 정수이고, d_4 는 0 내지 4 중에서 선택된 정수이고, d_5 는 0 내지 5 중에서 선택된 정수이고, d_6 은 0 내지 6 중에서 선택된 정수이고, d_8 은 0 내지 8 중에서 선택된 정수이고,
- [0063] * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0064] 상기 화학식 1A 또는 화학식 1B 중, a_1 및 a_2 는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택될 수 있다. a_1 은 L_1 의 개수를 나타낸 것으로, a_1 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. a_2 에 대한 설명은 상기 a_1 에 대한 설명을 참조하여 이해될 수 있다.
- [0065] a_1 이 0일 경우 $*(L_1)_{a_1}-*$ 은 단일결합이고, a_2 가 0일 경우 $*(L_2)_{a_2}-*$ 는 단일결합이다.
- [0066] 일 구현예에 따르면, 상기 a_1 및 a_2 는 서로 독립적으로 0, 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0067] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1A에서, a_1 및 a_2 는 동시에 0이 아닐 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0068] 상기 화학식 1A 및 화학식 1B 중, R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$,

$-P(=S)(Q_1)(Q_2)$, $-S(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-S(=O)_2(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되며, R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 전자 주개 그룹(electron donating group)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0069] 여기서, Q_1 내지 Q_3 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0070] 일 구현예에 따르면, 화학식 1A에서, $(R_1)_{b1}-(L_1)_{a1}-*$ 및 $(R_2)_{b2}-(L_2)_{a2}-*$ 는 할로젠, 페녹시, 페닐티오, 알킬티오 또는 알콕시 그룹은 아닐 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0071] 일 구현예에 따르면, 상기 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_2-C_{20} 알케닐기, C_2-C_{20} 알키닐기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;

[0072] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기, C_2-C_{20} 알케닐기, C_2-C_{20} 알키닐기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;

[0073] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0074] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_2-C_{20} 알케닐기, C_2-C_{20} 알키닐기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0075] $-N(Q_1)(Q_2)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$ 및 $-C(=O)(Q_1)$; 중에서 선택되며,

[0076] R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 전자 주개 그룹(electron donating group)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0077] 여기서, Q_1 내지 Q_3 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

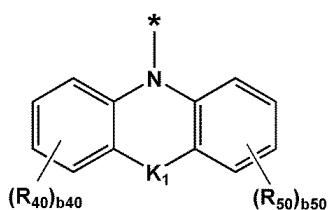
[0078] 다른 구현예에 따르면, 상기 R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로

[0079] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_2 - C_{20} 알케닐기, C_2 - C_{20} 알키닐기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기; 및

[0080] 하기 화학식 5-1 내지 5-6으로 표시된 그룹 중에서 선택되며,

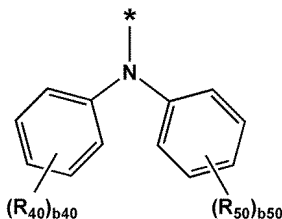
[0081] R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 전자 주개 그룹(electron donating group)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0082] <화학식 5-1>

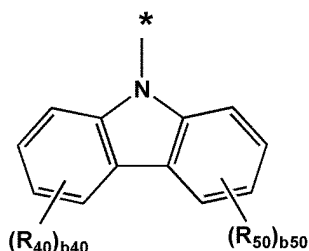


[0083]

<화학식 5-2>

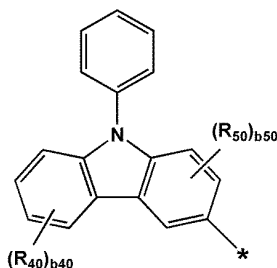


[0084] <화학식 5-3>

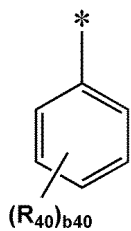


[0085]

<화학식 5-4>

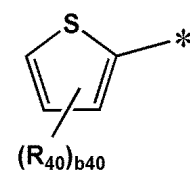


[0086] <화학식 5-5>



[0087]

<화학식 5-6>



[0088] 상기 화학식 5-1 내지 5-6 중,

[0089] K_1 은 $^*-C(R_{20})(R_{30})-^*$, $^*-N(R_{20})-^*$ 및 $^*-Si(R_{20})(R_{30})-^*$ 중에서 선택되고

[0090] R_{20} , R_{30} , R_{40} 및 R_{50} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 R_1 및 R_2 에 대한 설명과 같고,

[0091] b_{40} 및 b_{50} 은 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0092] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0093] 상기 화학식 1A 및 화학식 1B 중, b_1 및 b_2 는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있다. b_1 이 2 이상일 경우 2 이상의 R_1 은 서로 동일하거나 상이하고, b_2 가 2 이상일 경우 2 이상의 R_2 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

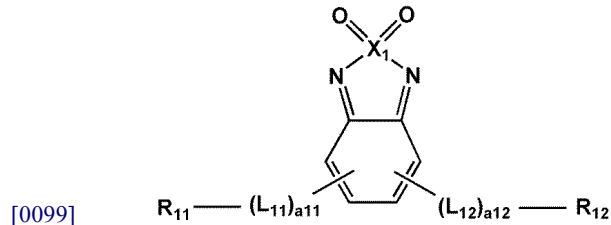
[0094] 일 구현예에 따르면, 상기 b_1 및 b_2 는 서로 독립적으로 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0095] 상기 화학식 1A 또는 화학식 1B 중, c1 및 c2는 서로 독립적으로 1 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있다.

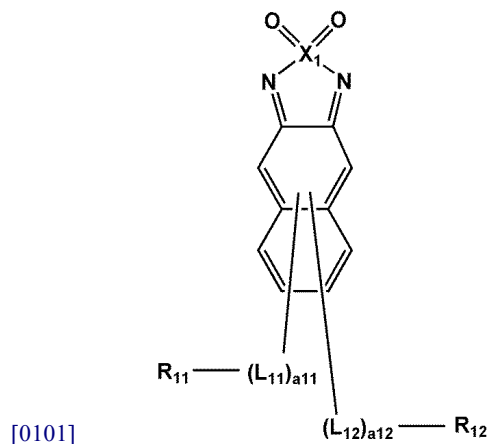
[0096] 일 구현예에 따르면, 상기 c1 및 c2는 서로 독립적으로 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0097] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1B로 표시된 화합물은 하기 화학식 1B-1 내지 1B-4로 표시된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

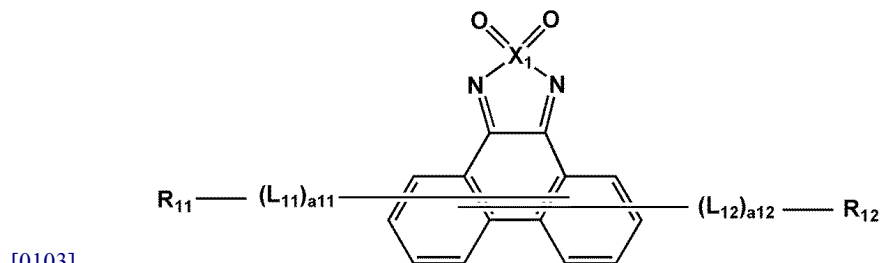
[0098] <화학식 1B-1>



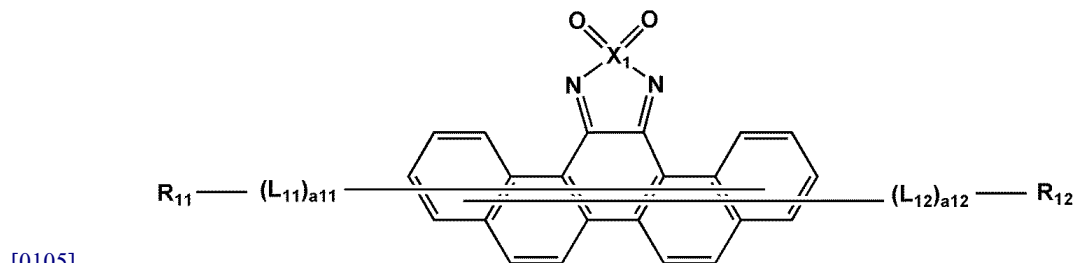
[0100] <화학식 1B-2>



[0102] <화학식 1B-3>



[0104] <화학식 1B-4>

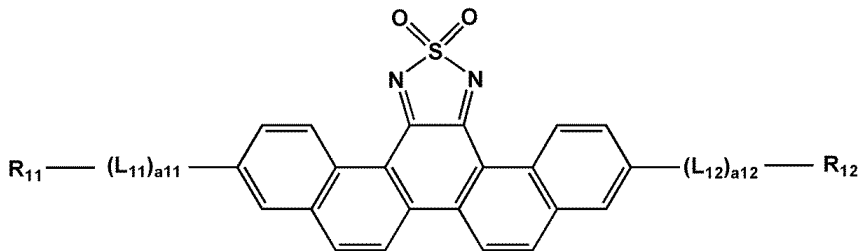
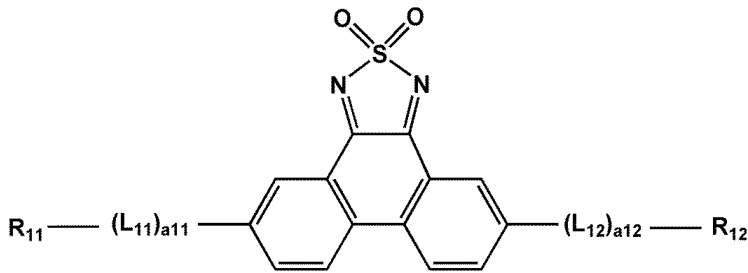
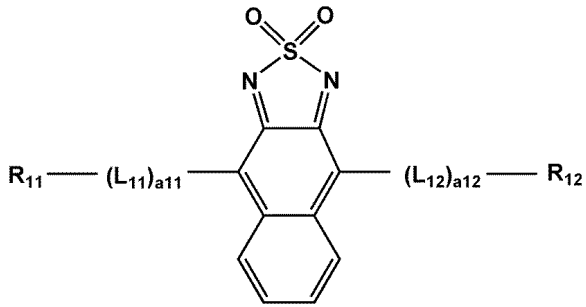
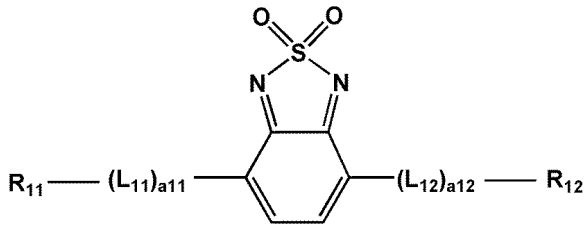


[0106] 상기 화학식 1B-1 내지 1B-4 중, X₁에 대한 설명은 상기 화학식 1B에 설명된 바와 같고, L₁₁ 및 L₁₂에 대한 설명은 상기 화학식 1B에 설명된 L₁ 및 L₂에 대한 설명과 같고, a₁₁ 및 a₁₂에 대한 설명은 상기 화학식 1B에 설명된 a₁ 및 a₂에 대한 설명과 같고, R₁₁ 및 R₁₂에 대한 설명은 상기 화학식 1B에 설명된 R₁ 및 R₂에 대한 설명과 같다.

[0107] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1B로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1B-a 내지 1B-d로 표시된 화합물일 수

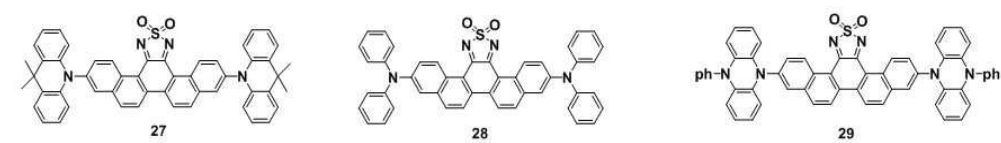
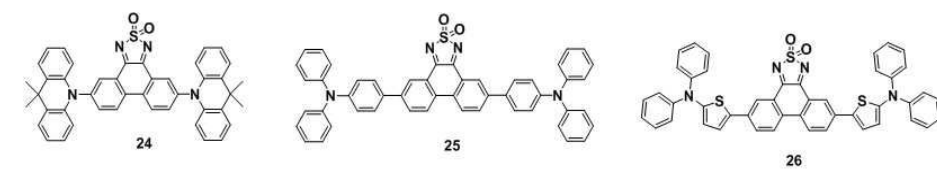
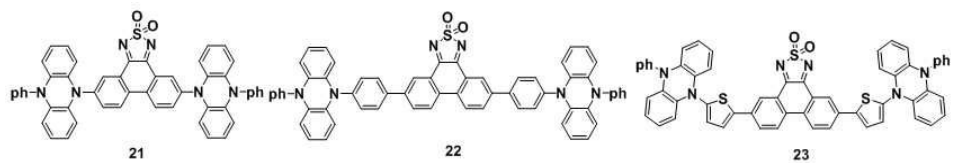
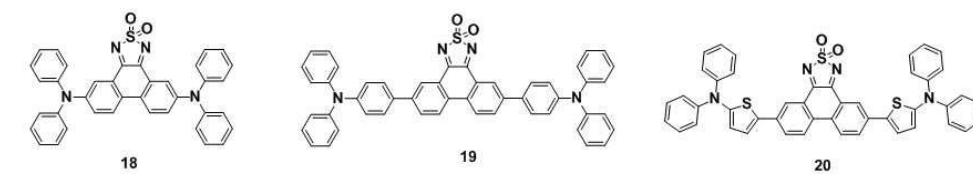
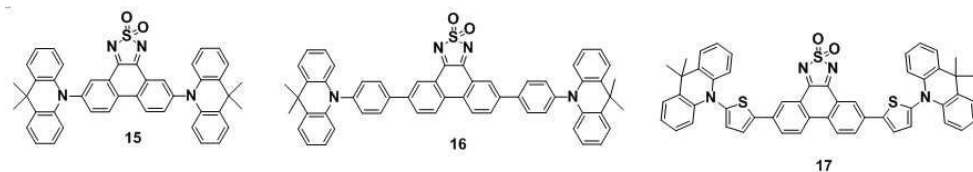
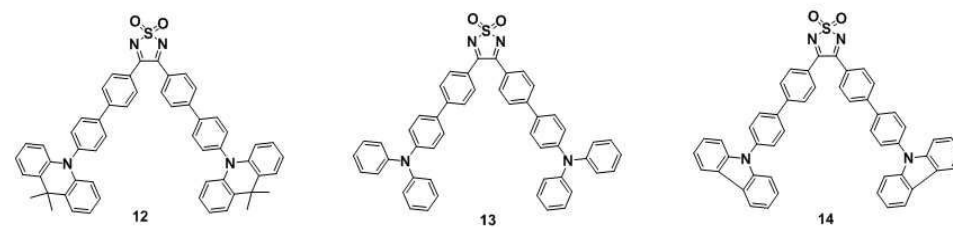
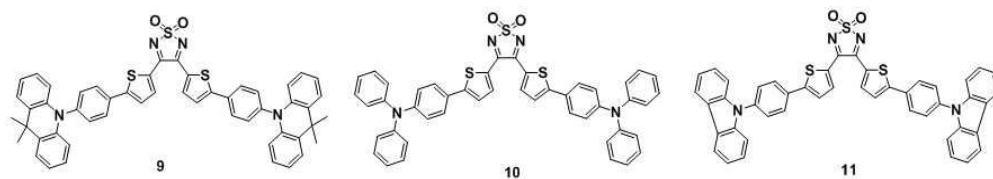
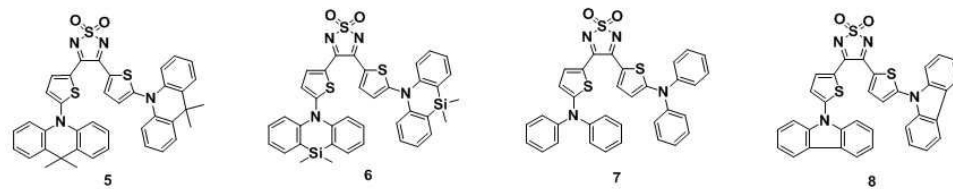
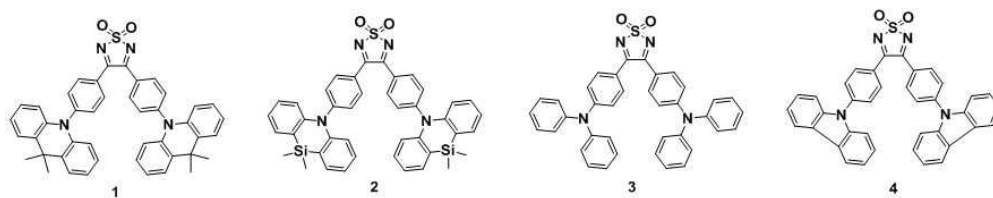
있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

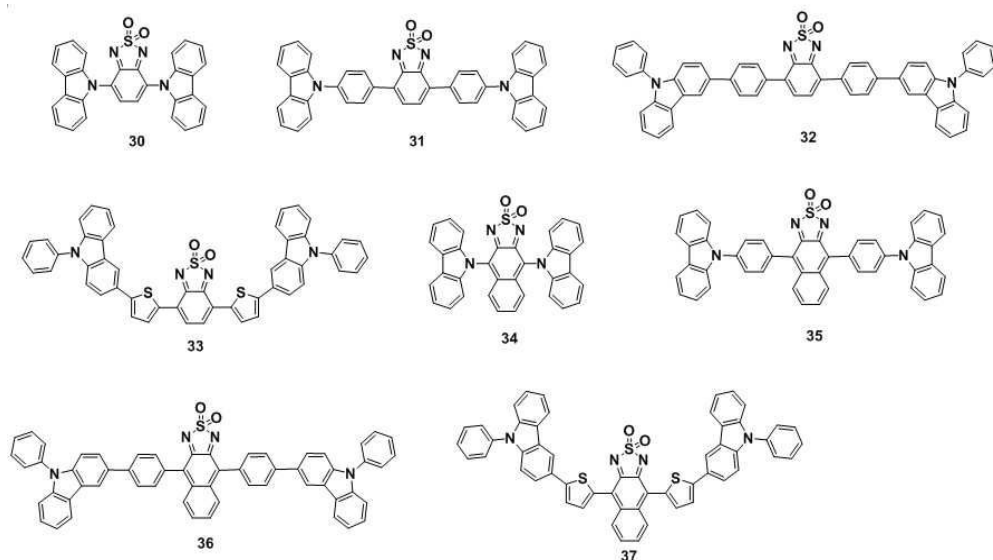
[0108] <화학식 1B-a>



[0116] 상기 화학식 1B-a 내지 1B-d 중, L_{11} 및 L_{12} 에 대한 설명은 상기 화학식 1B에 설명된 L_1 및 L_2 에 대한 설명과 같고, a_{11} 및 a_{12} 에 대한 설명은 상기 화학식 1B에 설명된 a_1 및 a_2 에 대한 설명과 같고, R_{11} 및 R_{12} 에 대한 설명은 상기 화학식 1B에 설명된 R_1 및 R_2 에 대한 설명과 같다.

[0117] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1 내지 37 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.





[0122]

[0123]

상기 화학식 1A 및 화학식 1B로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 산화된 티아디아졸계 코어를 포함한다. 이로써, 강한 전자 주개 치환기를 포함하는 분자 구조를 채용함으로써 IR 영역의 발광이 가능하고, 지연 형광(TADF) 메커니즘에 의해 발광 효율이 개선될 수 있다.

[0124]

따라서, 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함하는 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 높은 외부 양자 효율을 가지면서도, 최대 발광 파장의 장파장 시프트(shift)가 가능하여 NIR 발광에 적합하며, 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있다.

[0125]

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

[0126]

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

[0127]

따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 1 종 이상 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

[0128]

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

[0129]

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.

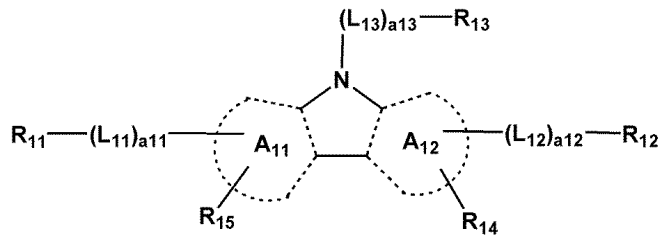
[0130]

일 구현예에 따르면, 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 상기 도펀트는 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 화합물을 포함하고,

[0131]

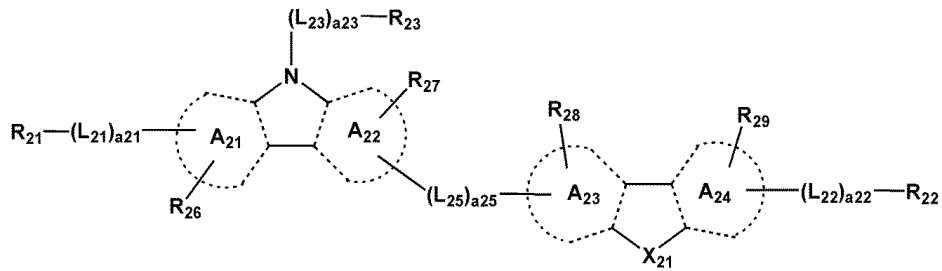
상기 호스트는 하기 화학식 11-HT로 표시되는 화합물, 하기 화학식 21-HT로 표시되는 화합물, 하기 화학식 31-HT로 표시되는 화합물, 하기 화학식 41-HT로 표시되는 화합물, 하기 화학식 51-HT로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 61-ET로 표시되는 화합물, 하기 화학식 71-ET로 표시되는 화합물로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0132] <화학식 11-HT>



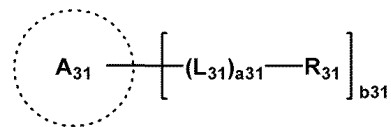
[0133]

[0134] <화학식 21-HT>



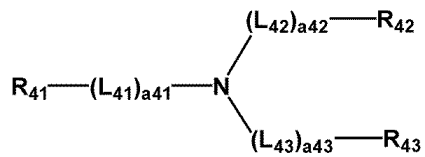
[0135]

[0136] <화학식 31-HT>



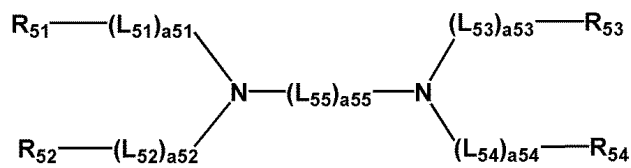
[0137]

[0138] <화학식 41-HT>



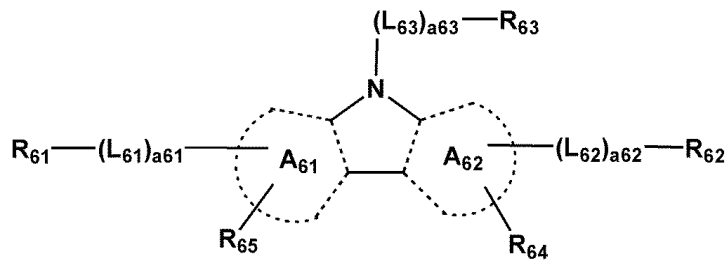
[0139]

[0140] <화학식 51-HT>



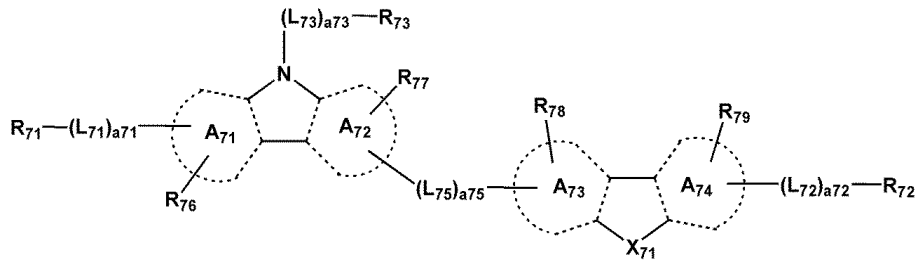
[0141]

[0142] <화학식 61-ET>



[0143]

[0144] <화학식 71-ET>



[0145]

[0146] 상기 화학식 11-HT, 21-HT, 31-HT, 41-HT 및 51-HT 중,

[0147] X_{21} 은 O, S, N-[(L₂₄)_{a24}-R₂₄], B-[(L₂₄)_{a24}-R₂₄], P-[(L₂₄)_{a24}-R₂₄], C(R₂₄)(R₂₅) 또는 Si(R₂₄)(R₂₅)이고,

[0148] A₁₁, A₁₂ 및 A₂₁ 내지 A₂₄는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 π 전자 결핍성 질소-비함유 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0149] A₃₁은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있는 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있는 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-비함유 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹이 되, A₃₁은 치환 또는 비치환된 스파이로바이폴루오렌 그룹 및 치환 또는 비치환된 안트라센 그룹이 아니고,

[0150] L₁₁ 내지 L₁₃, L₂₁ 내지 L₂₅, L₃₁, L₄₁ 내지 L₄₃ 및 L₅₁ 내지 L₅₅는 서로 독립적으로,

[0151] 단일 결합, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹; 및

[0152] 수소, 중수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -Si(Q₅₁)(Q₅₂)(Q₅₃), -N(Q₅₁)(Q₅₂) 및 -B(Q₅₁)(Q₅₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹;

[0153] 중에서 선택되고,

[0154] a₁₁ 내지 a₁₃, a₂₁ 내지 a₂₅, a₃₁, a₄₁ 내지 a₄₃ 및 a₅₁ 내지 a₅₅는 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0155] R₁₁, R₁₂, R₁₄, R₁₅, R₂₁, R₂₂ 및 R₂₄ 내지 R₂₉는 서로 독립적으로,

[0156] 수소, 중수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0157] 중수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -Si(Q₅₁)(Q₅₂)(Q₅₃), -N(Q₅₁)(Q₅₂) 및 -B(Q₅₁)(Q₅₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 π

전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0158] $-\text{Si}(\text{Q}_{41})(\text{Q}_{42})(\text{Q}_{43})$, $-\text{N}(\text{Q}_{41})(\text{Q}_{42})$ 및 $-\text{B}(\text{Q}_{41})(\text{Q}_{42})$;

[0159] 중에서 선택되고,

[0160] R_{13} , R_{23} , R_{31} , R_{41} 내지 R_{43} 및 R_{51} 내지 R_{54} 는 서로 독립적으로,

[0161] C_3 - C_{10} 시클로알킬기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0162] 중수소, 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, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, $-\text{Si}(\text{Q}_{51})(\text{Q}_{52})(\text{Q}_{53})$, $-\text{N}(\text{Q}_{51})(\text{Q}_{52})$ 및 $-\text{B}(\text{Q}_{51})(\text{Q}_{52})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0163] $-\text{Si}(\text{Q}_{41})(\text{Q}_{42})(\text{Q}_{43})$, $-\text{N}(\text{Q}_{41})(\text{Q}_{42})$ 및 $-\text{B}(\text{Q}_{41})(\text{Q}_{42})$;

[0164] 중에서 선택되고,

[0165] R_{51} 과 R_{52} 는 선택적으로, 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고, R_{53} 과 R_{54} 는 선택적으로, 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,

[0166] b_{31} 은 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0167] 상기 Q_{41} 내지 Q_{43} 및 Q_{51} 내지 Q_{53} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 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, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, π 전자 결핍성 질소-비함유 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, π 전자 결핍성 질소-비함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

[0168] 상기 화학식 61-ET 및 71-ET 중

[0169] X_{71} 은 O, S, $\text{N}-[(\text{L}_{74})_{a74}-\text{R}_{74}]$, $\text{B}-[(\text{L}_{74})_{a74}-\text{R}_{74}]$, $\text{P}-[(\text{L}_{74})_{a74}-\text{R}_{74}]$, $\text{C}(\text{R}_{74})(\text{R}_{75})$ 또는 $\text{Si}(\text{R}_{74})(\text{R}_{75})$ 이고,

[0170] A_{61} , A_{62} 및 A_{71} 내지 A_{74} 는 서로 독립적으로, C_5 - C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 C_2 - C_{30} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0171] L_{61} 내지 L_{63} 및 L_{71} 내지 L_{75} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0172] a_{61} 내지 a_{63} 및 a_{71} 내지 a_{75} 는 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0173] R_{61} 내지 R_{65} 및 R_{71} 내지 R_{79} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 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

비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)₂(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

[0174] 상기 화학식 61-ET의 i) A₆₁ 및 A₆₂ 적어도 하나는 π 전자 결핍성 질소-함유 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹이거나, ii) R₆₁ 내지 R₆₅ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0175] 상기 화학식 71-ET의 i) A₇₁ 내지 A₇₄ 적어도 하나는 π 전자 결핍성 질소-함유 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹이거나, ii) R₇₁ 내지 R₇₃ 및 R₇₆ 내지 R₇₉ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-함유 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0176] 상기 치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 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,

[0177] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0178] 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)₂(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0179] 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;

[0180] 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)₂(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

[0181] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)₂(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0182] 중에서 선택되고,

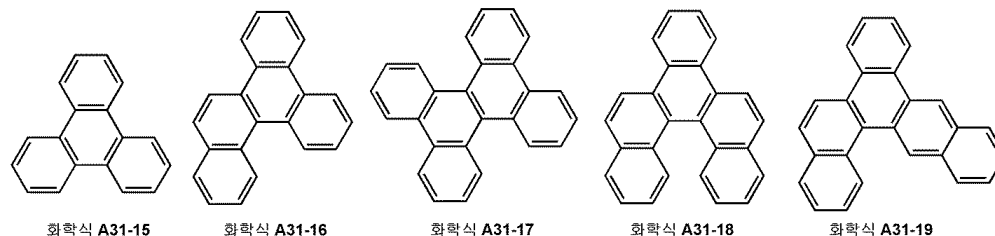
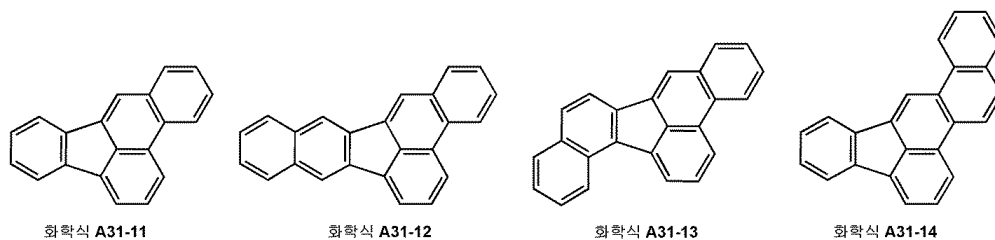
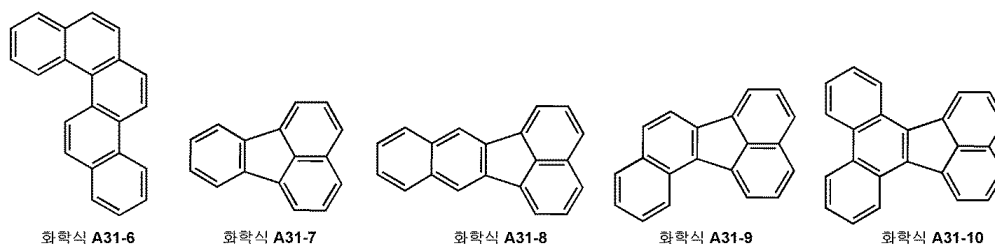
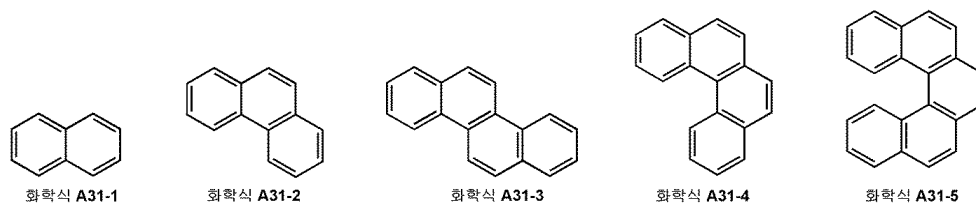
[0183] 상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br,

-I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 터페닐기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

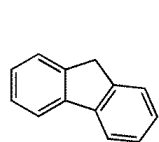
[0184] 일 구현예에 따르면, A₁₁, A₁₂ 및 A₂₁ 내지 A₂₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피롤 그룹, 시클로펜텐 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹 중에서 선택되고,

[0185] A₃₁은 하기 화학식 A31-1 내지 A31-38로부터 유래된 그룹 중에서 선택되고,

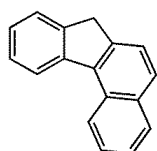
[0186] A₆₁, A₆₂ 및 A₇₁ 내지 A₇₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피롤 그룹, 시클로펜텐 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹 및 벤조퀴녹살린 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



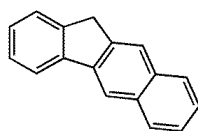
[0188]



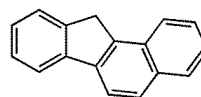
화학식 A31-20



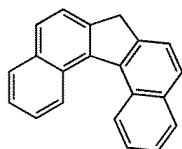
화학식 A31-21



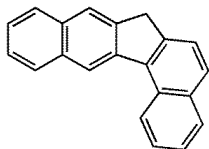
화학식 A31-22



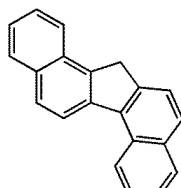
화학식 A31-23



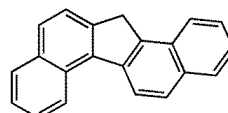
화학식 A31-24



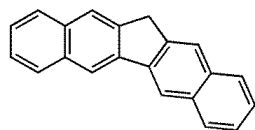
화학식 A31-25



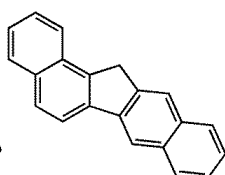
화학식 A31-26



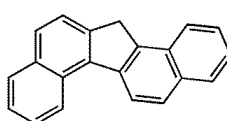
화학식 A31-27



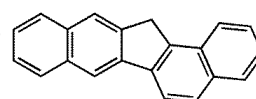
화학식 A31-28



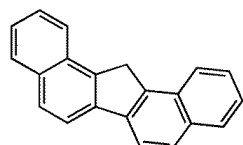
화학식 A31-29



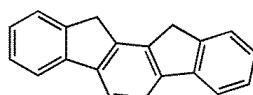
화학식 A31-30



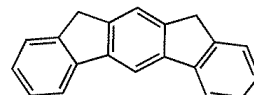
화학식 A31-31



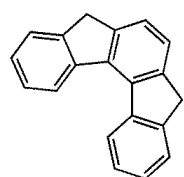
화학식 A31-32



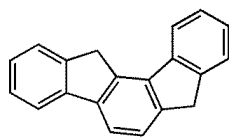
화학식 A31-33



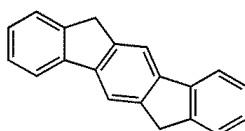
화학식 A31-34



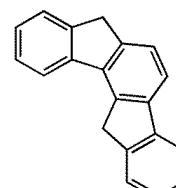
화학식 A31-35



화학식 A31-36



화학식 A31-37



화학식 A31-38

[0189]

[0190]

[0191]

[0192]

[0193]

[0194]

[0195]

[0196]

예를 들어, 상기 호스트가 상기 화학식 11-HT로 표시되는 화합물, 상기 화학식 21-HT로 표시되는 화합물, 상기 화학식 31-HT로 표시되는 화합물, 상기 화학식 41-HT로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 51-HT로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

예를 들어, 상기 호스트가 상기 화학식 61-ET로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 71-ET로 표시되는 화합물로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

일 구현예에 따르면, 상기 발광층에 포함된 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시되는 화합물은 700nm 이상의 최대 발광 파장을 갖는 근적외선(NIR) 발광 화합물일 수 있다.

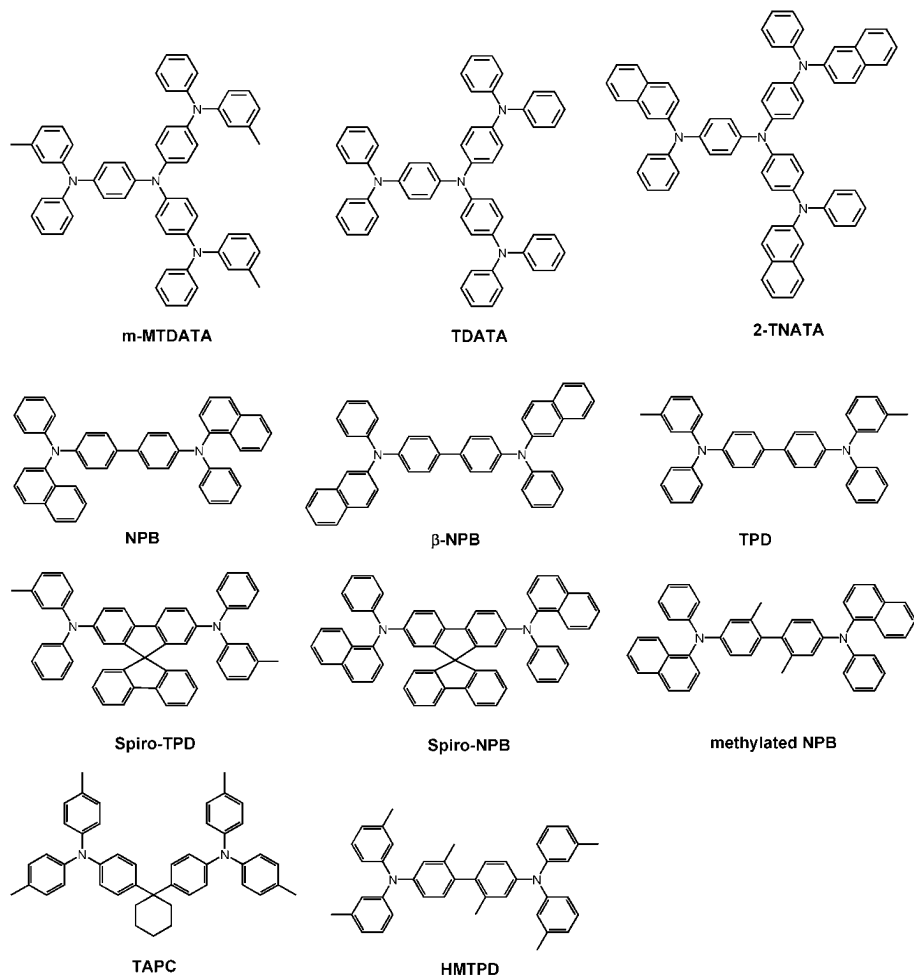
일 구현예에 따르면, 상기 발광층에 포함된 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표시된 화합물은 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고, 상기 발광층이 지연 형광을 방출할 수 있다.

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

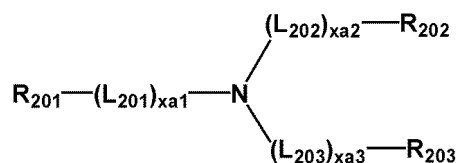
일 구현예에 따르면, 상기 정공 수송 영역이 전하-생성 물질을 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 정공 수송 영역이 p-도펀트를 포함하고, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다. 예를 들어, 상기 p-도펀트는 시아노기-함유 화합물을 포함할 수 있다.

- [0197] 일 구현예에 따르면, 상기 전자 수송 영역이 트리아졸-함유 화합물 또는 벤조트리아졸-함유 화합물을 포함하고, 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이들 중 임의의 조합을 더 포함할 수 있다.
- [0198] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1 전극과 제2 전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.
- [0199] [도 1에 대한 설명]
- [0200] 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.
- [0201] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0202] [제1전극(110)]
- [0203] 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.
- [0204] 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.
- [0205] 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.
- [0206] 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.
- [0207] [유기층(150)]
- [0208] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.
- [0209] 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.
- [0210] 예를 들어, 상기 유기층(150)이 상기 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.
- [0211] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]
- [0212] 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.
- [0213] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 제1 정공 수송층(HTL), 제2 정공 수송층, 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.
- [0214] 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.
- [0215] 또한, 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)트리

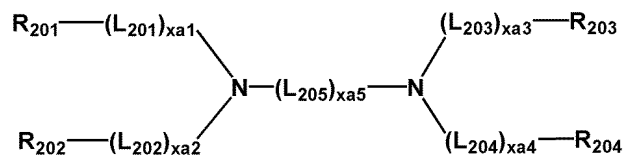
페닐아민)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐린/도데실벤젠술포산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오편)/폴리(4-스티렌술포네이트))), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페술포산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트))), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다:



<화학식 201>



<화학식 202>



상기 화학식 201 및 202 중,

L_{201} 내지 L_{204} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향

족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0224] 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,

[0225] xa_1 내지 xa_4 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0226] xa_5 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0227] R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0228] 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.

[0229] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,

[0230] L_{201} 내지 L_{205} 는 서로 독립적으로,

[0231] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실릴일렌기 및 피리디닐렌기; 및

[0232] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1-C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, $-F$ 로 치환된 페닐기, 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, 디벤조실릴일기, 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, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실릴일렌기 및 피리디닐렌기;

[0233] 중에서 선택되고,

[0234] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중

에서 선택될 수 있다.

[0235] 다른 구현예에 따르면, x_{a1} 내지 x_{a4} 는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0236] 또 다른 구현예에 따르면, x_{a5} 는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.

[0237] 또 다른 구현예에 따르면, R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및

[0238] 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, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}) 및 -N(Q_{31})(Q_{32}) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;

[0239] 중에서 선택될 수 있고,

[0240] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0241] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R_{201} 내지 R_{203} 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,

[0242] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및

[0243] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1 - C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;

[0244] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0245] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R_{201} 과 R_{202} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R_{203} 과 R_{204} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0246] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R_{201} 내지 R_{204} 중 적어도 하나는,

[0247] 카바졸일기; 및

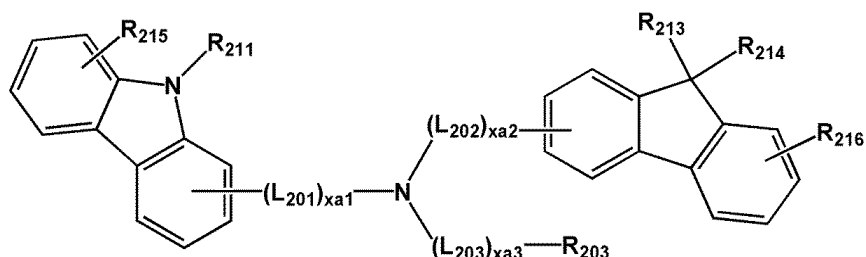
[0248] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐

기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;

[0249] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0250] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:

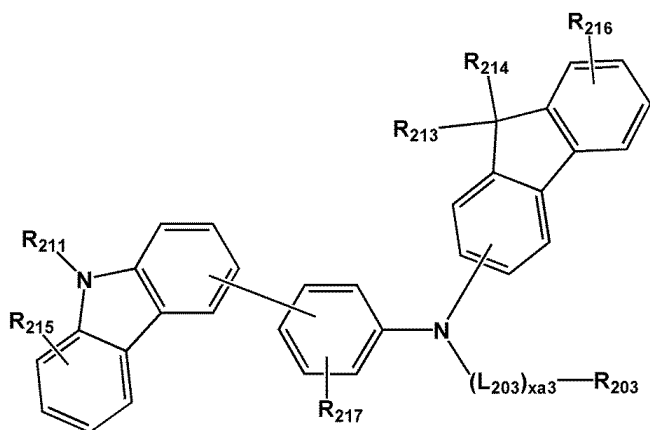
[0251] <화학식 201A>



[0252]

[0253] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

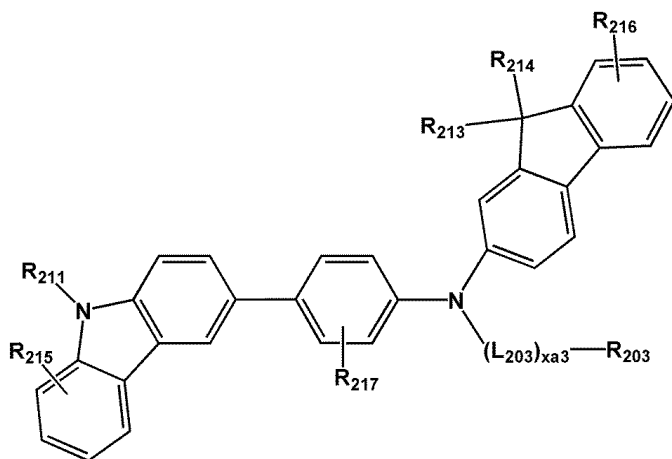
[0254] <화학식 201A(1)>



[0255]

[0256] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

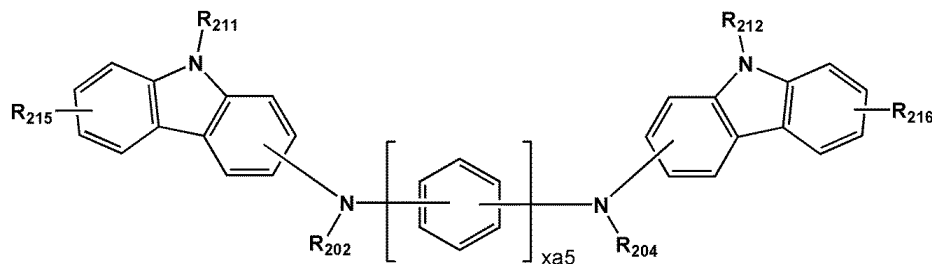
[0257] <화학식 201A-1>



[0258]

[0259] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

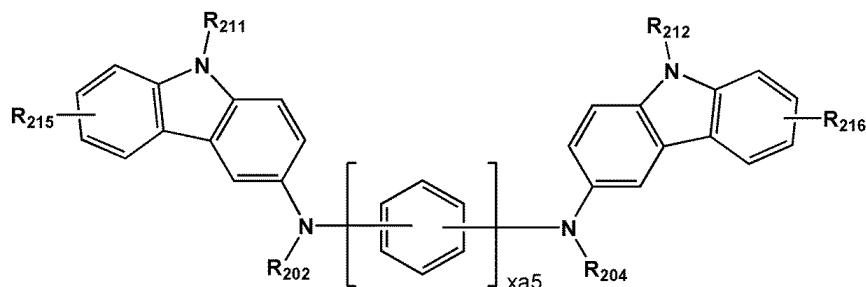
[0260] <화학식 202A>



[0261]

[0262] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0263] <화학식 202A-1>



[0264]

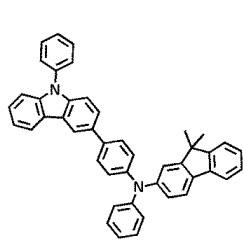
[0265] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

[0266] L₂₀₁ 내지 L₂₀₃, xa1 내지 xa3, xa5 및 R₂₀₂ 내지 R₂₀₄에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

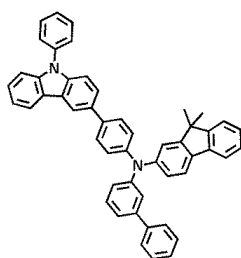
[0267] R₂₁₁ 및 R₂₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀₃에 대한 설명을 참조하고,

[0268] R₂₁₃ 내지 R₂₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로오펜틸기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스콰이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

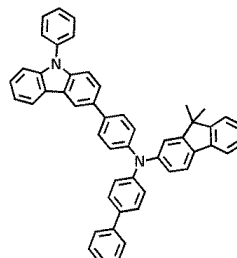
[0269] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



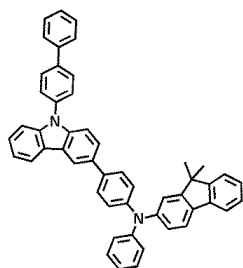
HT1



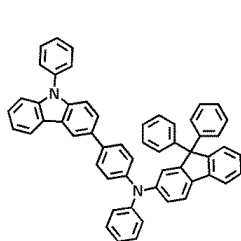
HT2



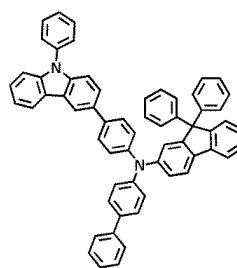
HT3



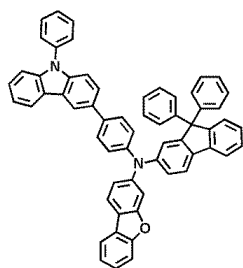
HT4



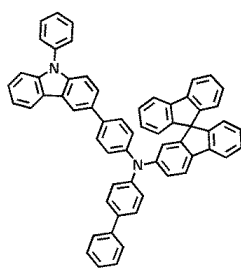
HT5



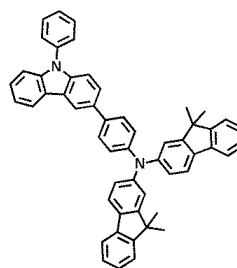
HT6



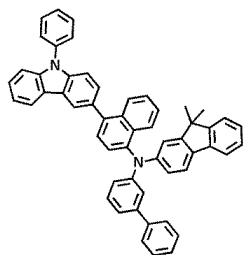
HT7



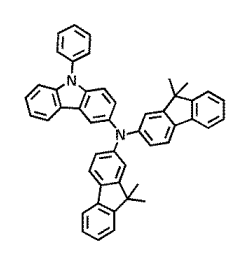
HT8



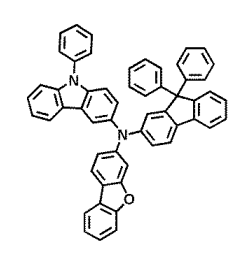
HT9



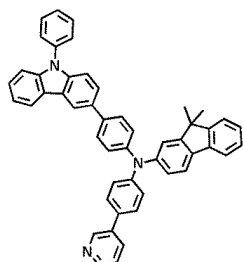
HT10



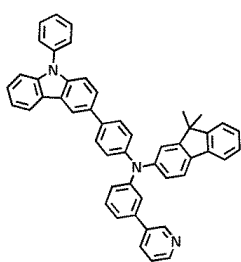
HT11



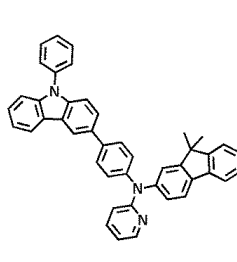
HT12



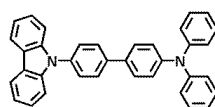
HT13



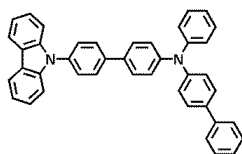
HT14



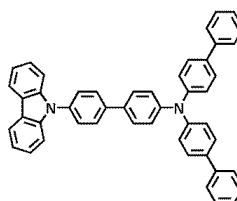
HT15



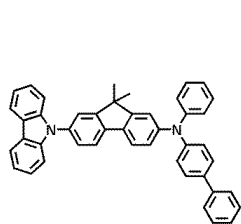
HT16



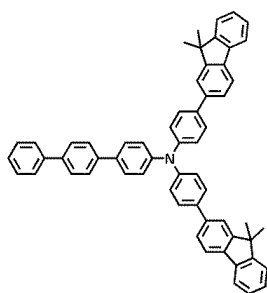
HT17



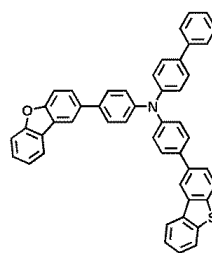
HT18



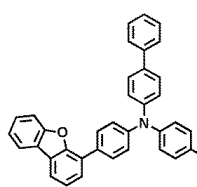
HT19



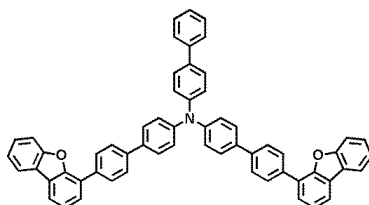
HT20



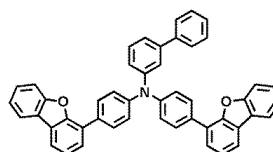
HT21



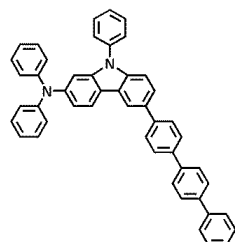
HT22



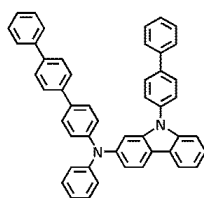
HT23



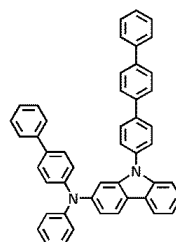
HT24



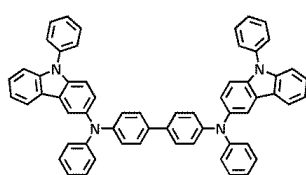
HT25



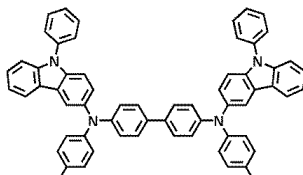
HT26



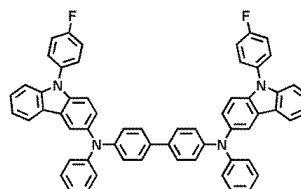
HT27



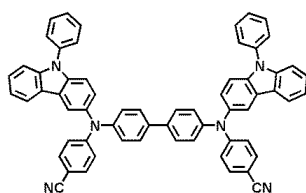
HT28



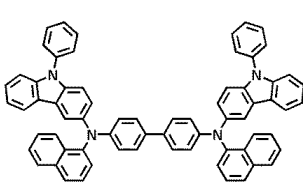
HT29



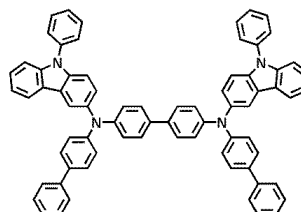
HT30



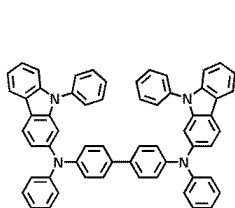
HT31



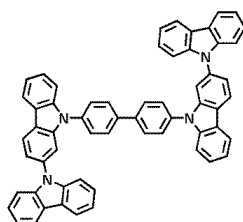
HT32



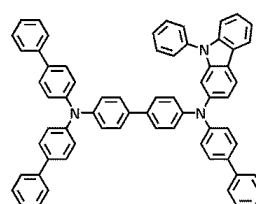
HT33



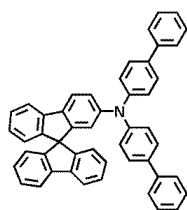
HT34



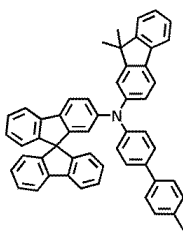
HT35



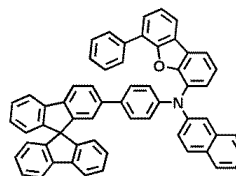
HT36



HT37



HT38



HT39

[0276]

[0277]

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.

[0278]

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

[0279]

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.

[0280]

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.

[0281]

[p-도펀트]

[0282]

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.

[0283]

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0284]

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

[0285]

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

[0286]

예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0287]

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

[0288]

텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

[0289]

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

[0290]

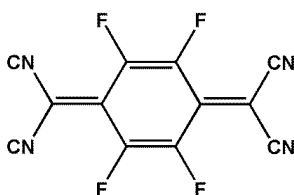
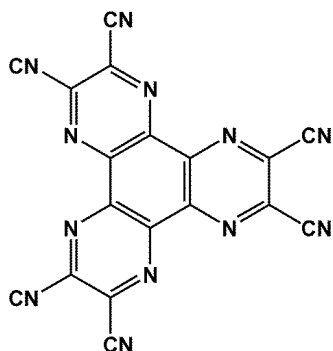
하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

[0291]

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

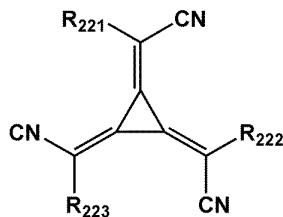
[0292]

<HAT-CN> <F4-TCNQ>



[0293]

[0294] <화학식 221>



[0295]

[0296] 상기 화학식 221 중,

[0297] R_{221} 내지 R_{223} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되되, 상기 R_{221} 내지 R_{223} 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기, -Cl로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기, -Br로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기 및 -I로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0298] [유기층(150) 중 발광층]

[0299] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

[0300] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 발광층에 상기 헤테로시클릭 화합물이 도펀트이고, 상기 발광층이 호스트를 더 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.

[0301] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층에 포함된 상기 헤테로시클릭 화합물은 700nm 이상의 최대 발광 파장을 갖는 근적외선(NIR) 발광 화합물일 수 있다.

[0302] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층에 포함된 상기 헤테로시클릭 화합물이 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고, 상기 발광층이 지연 형광을 방출할 수 있다.

[0303] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 30 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0304] 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.

[0305] [발광층 중 호스트]

[0306] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0307] <화학식 301>

[0308] $[Ar_{301}]_{xb11} - [(L_{301})_{xb1} - R_{301}]_{xb21}$

[0309] 상기 화학식 301 중,

[0310] Ar_{301} 은 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0311] $xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,

[0312] L_{301} 은, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 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,

[0313] xb1는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0314] R₃₀₁은, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₃₀₁)(Q₃₀₂)(Q₃₀₃), -N(Q₃₀₁)(Q₃₀₂), -B(Q₃₀₁)(Q₃₀₂), -C(=O)(Q₃₀₁), -S(=O)₂(Q₃₀₁) 및 -P(=O)(Q₃₀₁)(Q₃₀₂) 중에서 선택되고,

[0315] xb21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0316] Q₃₀₁ 내지 Q₃₀₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0317] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar₃₀₁은,

[0318] 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; 및

[0319] 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;

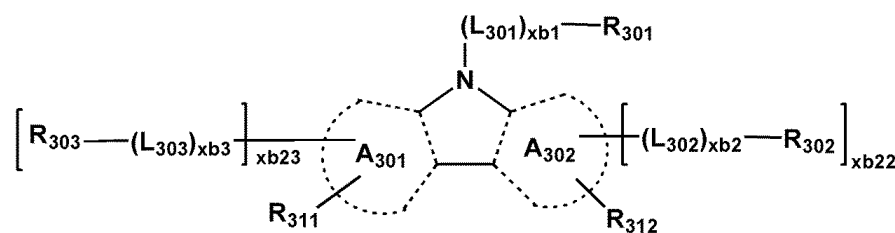
[0320] 중에서 선택되고,

[0321] Q₃₁ 내지 Q₃₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0322] 상기 화학식 301 중 xb1이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₃₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

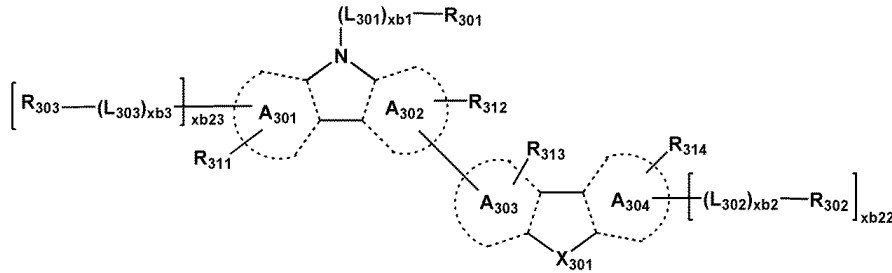
[0323] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0324] <화학식 301-1>



[0325]

[0326] <화학식 301-2>



[0327]

[0328] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0329] 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,

[0330] X₃₀₁은 O, S 또는 N-[(L₃₀₄)_{xb4}-R₃₀₄]이고,

[0331] 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,

[0332] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0333] L₃₀₁, xb1, R₃₀₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0334] L₃₀₂ 내지 L₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L₃₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0335] Xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,

[0336] R₃₀₂ 내지 R₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R₃₀₁에 대한 설명을 참조한다.

[0337] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L₃₀₁ 내지 L₃₀₄는 서로 독립적으로,

[0338] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0339] 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, 시

놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴아로-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;

[0340] 중에서 선택되고,

[0341] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0342] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R_{301} 내지 R_{304} 는 서로 독립적으로,

[0343] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴아로-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; 및

[0344] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴아로-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, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴아로-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, 이소벤조옥

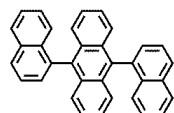
사줄일기, 트리아줄일기, 테트라줄일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바줄일기;

[0345] 중에서 선택되고,

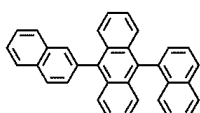
[0346] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0347] 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.

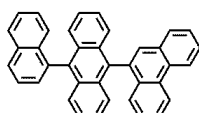
[0348] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 및 H-1a 내지 H-15a 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



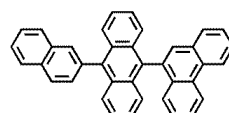
H1



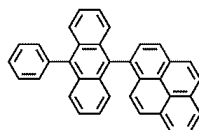
H2



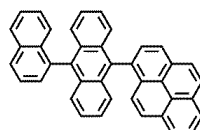
H3



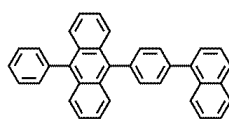
H4



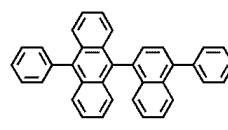
H5



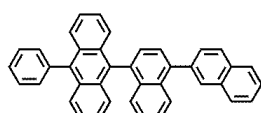
H6



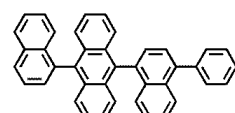
H7



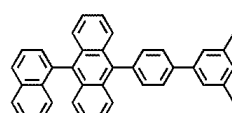
H8



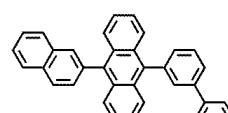
H9



H10

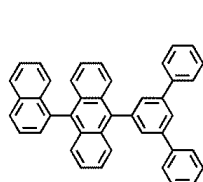


H11

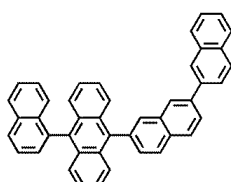


H12

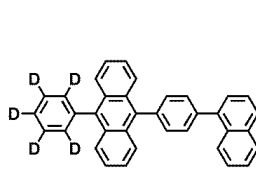
[0349]



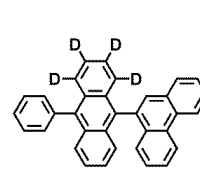
H13



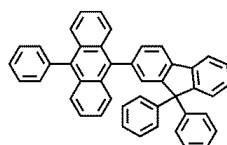
H14



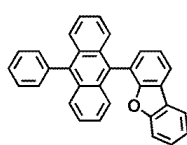
H15



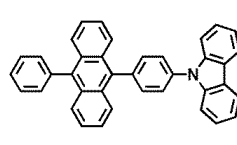
H16



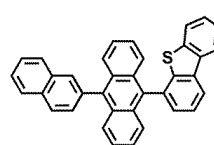
H17



H18

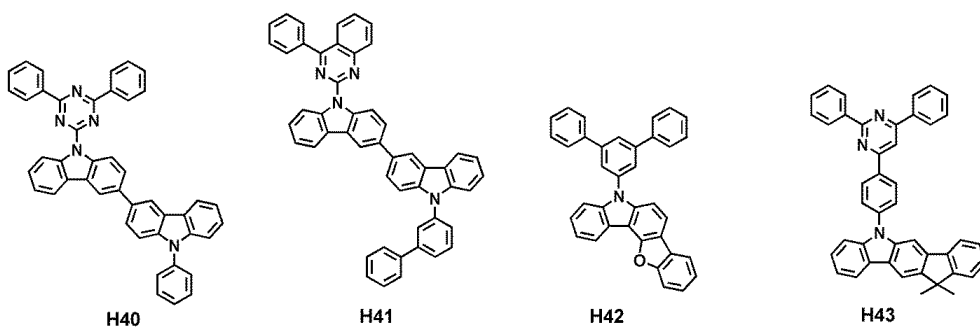
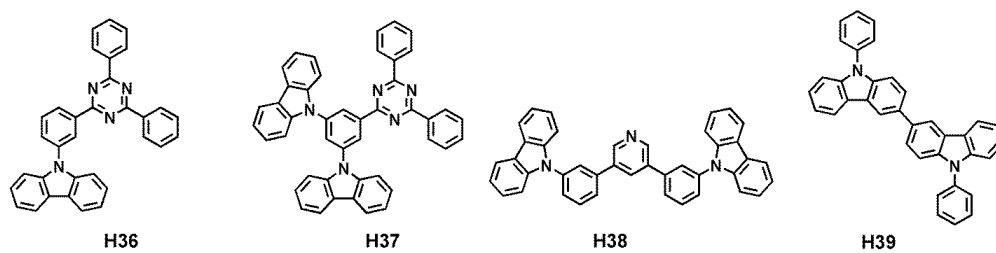
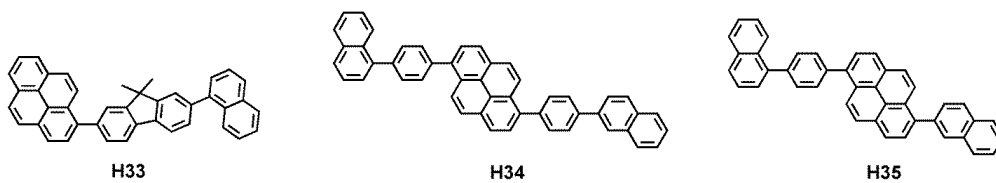
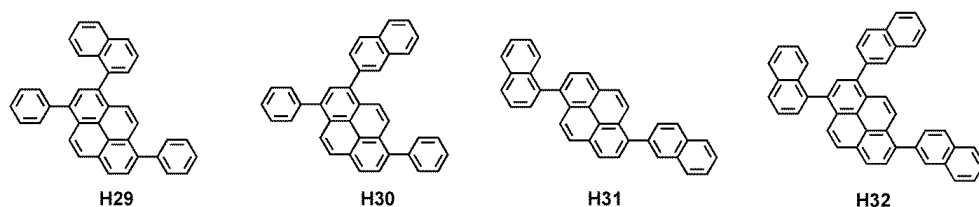
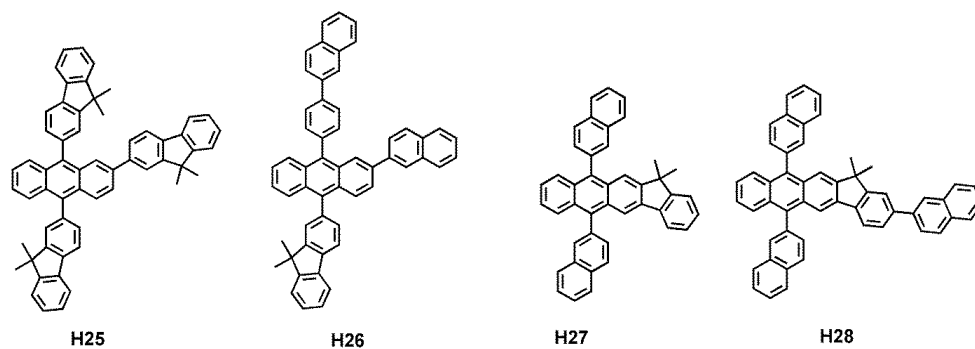
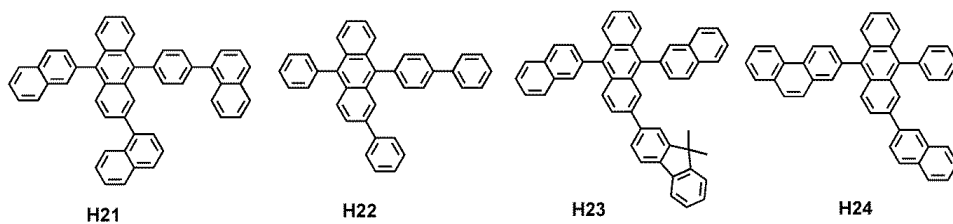


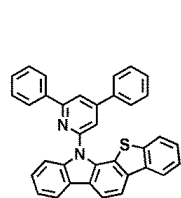
H19



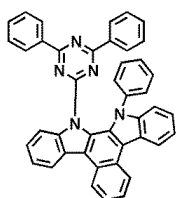
H20

[0350]

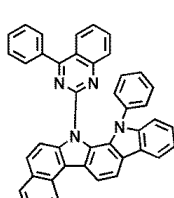




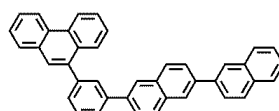
H44



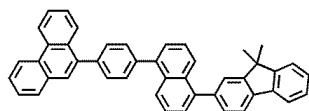
H45



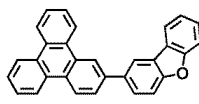
H46



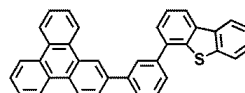
H47



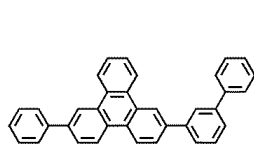
H48



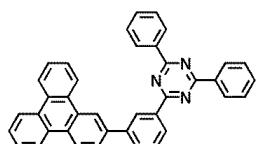
H49



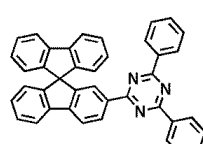
H50



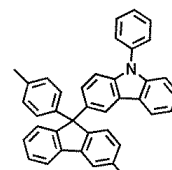
H51



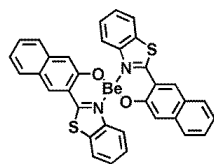
H52



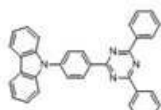
H53



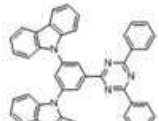
H54



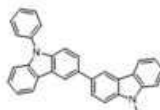
H55



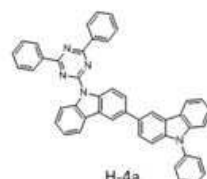
H-1a



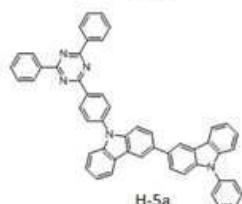
H-2a



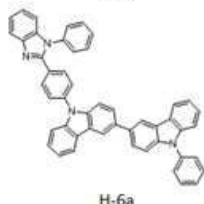
H-3a



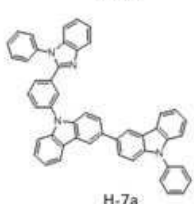
H-4a



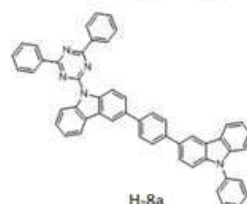
H-5a



H-6a



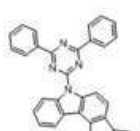
H-7a



H-8a



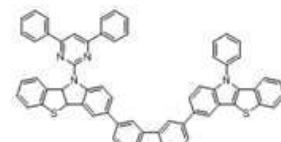
H-9a



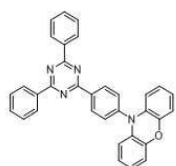
H-10a



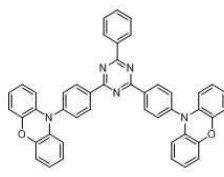
H-11a



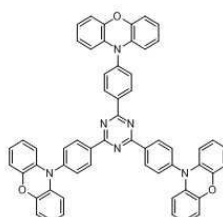
H-12a



H-13a



H-14a



H-15a

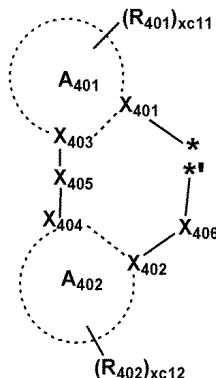
[0357] [유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]

[0358] 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함할 수 있다:

[0359] <화학식 401>

[0360] $M(L_{401})_{xc1}(L_{402})_{xc2}$

[0361] <화학식 402>



[0362]

[0363] 상기 화학식 401 및 402 중,

[0364] 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,

[0365] L_{401} 은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, $xc1$ 은 1, 2 또는 3이고, $xc1$ 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{401} 은 서로 동일하거나 상이하고,

[0366] L_{402} 는 유기 리간드이고, $xc2$ 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, $xc2$ 가 2 이상일 경우 2 이상의 L_{402} 는 서로 동일하거나 상이하고,

[0367] X_{401} 내지 X_{404} 는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

[0368] X_{401} 과 X_{403} 은 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고, X_{402} 와 X_{404} 는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,

[0369] A_{401} 및 A_{402} 는 서로 독립적으로, C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0370] X_{405} 는 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(=O)-*, *-N(Q_{411})-*, *-C(Q_{411})(Q_{412})-*, *-C(Q_{411})=C(Q_{412})-*, *-C(Q_{411})=*, 또는 *=C(Q_{411})=*이고, 상기 Q_{411} 및 Q_{412} 는, 수소, 중수소, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 테페닐기 또는 나프틸기이고,

[0371] X_{406} 은 단일 결합, O 또는 S이고,

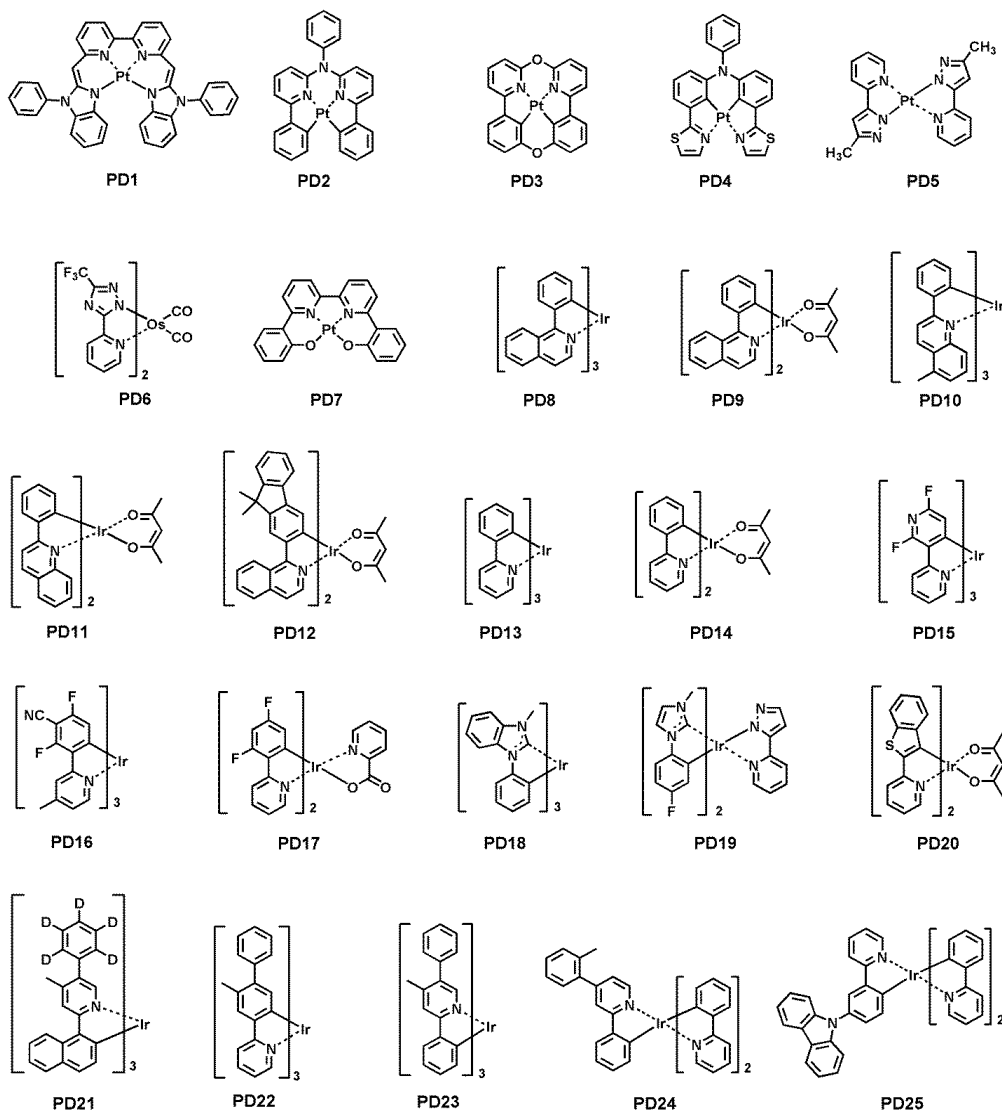
[0372] R_{401} 및 R_{402} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{20} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{20} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 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 -

C₂₀아릴기 및 C₁-C₂₀헤테로아릴기 중에서 선택되고,

- [0373] xc11 및 xc12는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,
- [0374] 상기 화학식 402 중 * 및 *'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.
- [0375] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 인텐 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란(furan) 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸(isoxazole) 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 카바졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조퓨란(benzofuran) 그룹, 벤조티오펜 그룹, 이소벤조티오펜 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 디벤조퓨란(dibenzofuran) 그룹 및 디벤조티오펜 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0376] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 i) X₄₀₁은 질소이고, X₄₀₂는 탄소이거나, 또는 ii) X₄₀₁과 X₄₀₂가 모두 질소일 수 있다.
- [0377] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 R₄₀₁ 및 R₄₀₂는 서로 독립적으로,
- [0378] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0379] 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;
- [0380] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;
- [0381] 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, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및
- [0382] -Si(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)(Q₄₀₃), -N(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -B(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -C(=O)(Q₄₀₁), -S(=O)₂(Q₄₀₁) 및 -P(=O)(Q₄₀₁)(Q₄₀₂);
- [0383] 중에서 선택되고,
- [0384] 상기 Q₄₀₁ 내지 Q₄₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0385] 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.
- [0386] 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 (예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphite)) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0387] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



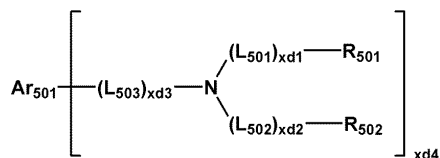
[0390]

[0391] [발광층 중 형광 도펀트]

[0392] 상기 형광 도펀트는 아릴아민 화합물 또는 스티릴아민 화합물을 포함할 수 있다.

[0393] 상기 형광 도펀트는 하기 화학식 501로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

[0394] <화학식 501>



[0395]

[0396] 상기 화학식 501 중,

[0397] Ar₅₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0398] L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시

클로알킬렌기, 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,

[0399] xd_1 내지 xd_3 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0400] R_{501} 및 R_{502} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0401] xd_4 는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.

[0402] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar_{501} 은,

[0403] 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹; 및

[0404] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹;

[0405] 중에서 선택될 수 있다.

[0406] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L_{501} 내지 L_{503} 은 서로 독립적으로,

[0407] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및

[0408] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기;

[0409] 중에서 선택될 수 있다.

[0410] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 R_{501} 및 R_{502} 는 서로 독립적으로,

[0411] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조

퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및

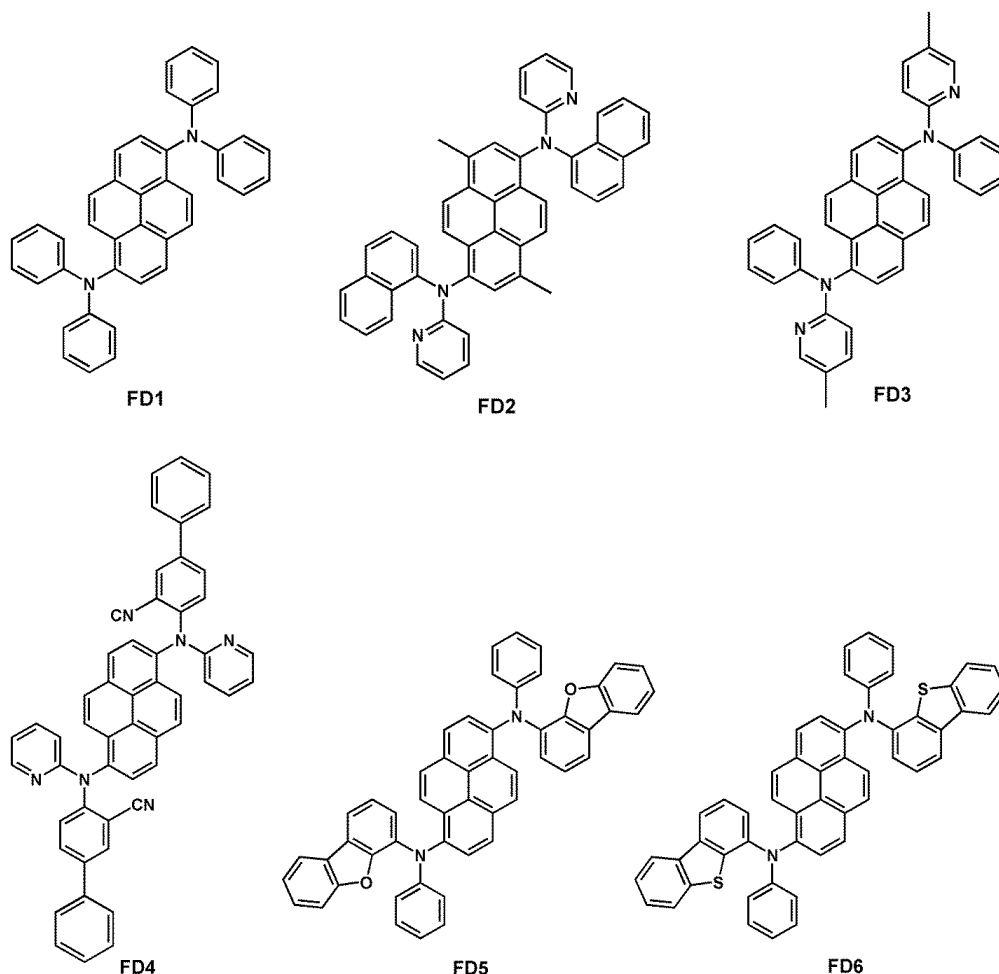
[0412] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기 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;

[0413] 중에서 선택되고,

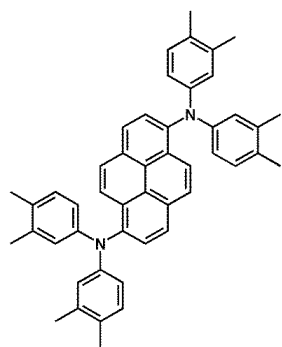
[0414] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0415] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd4는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

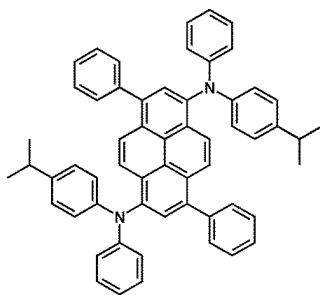
[0416] 예를 들어, 상기 형광 도판트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:



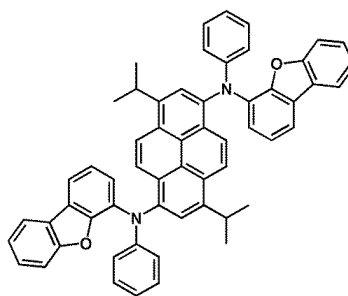
[0418]



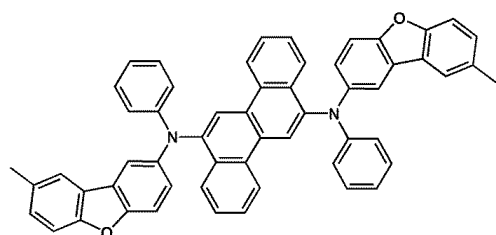
FD7



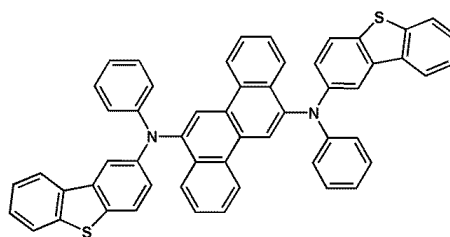
FD8



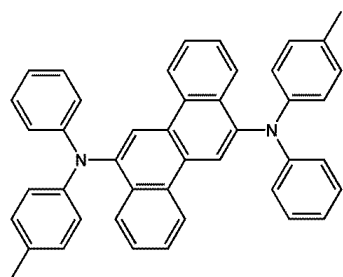
FD9



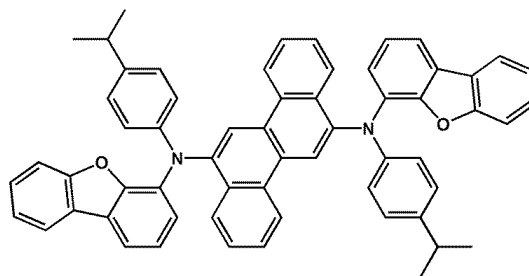
FD10



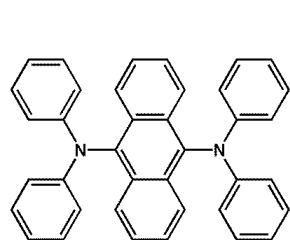
FD11



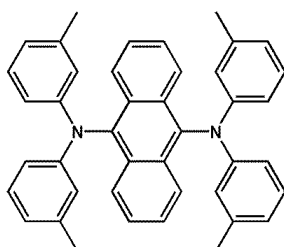
FD12



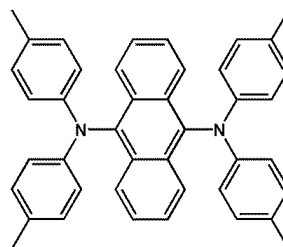
FD13



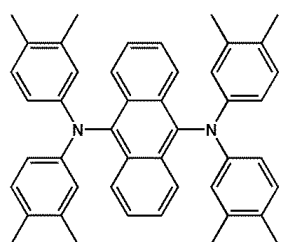
FD14



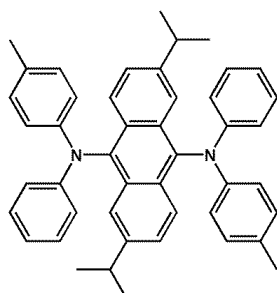
FD15



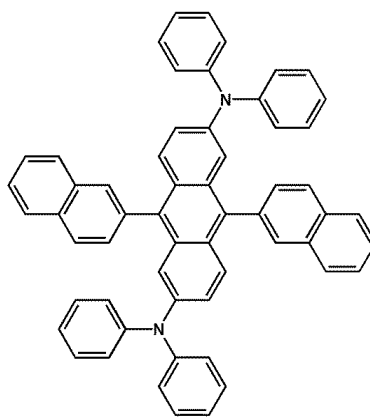
FD16



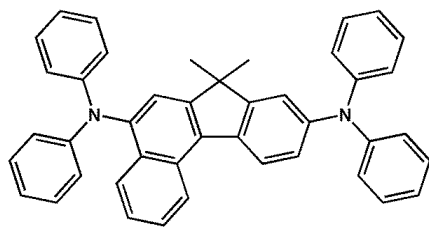
FD17



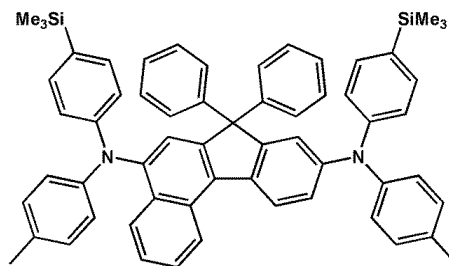
FD18



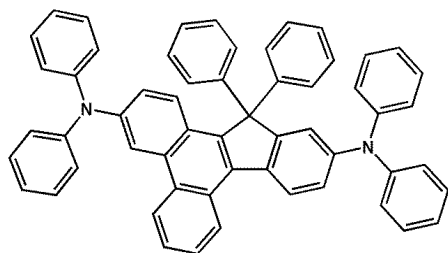
FD19



FD20

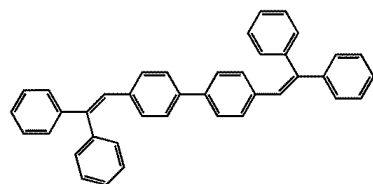


FD21

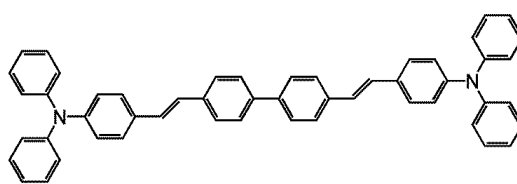


FD22

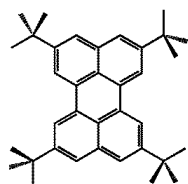
또는, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물들 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



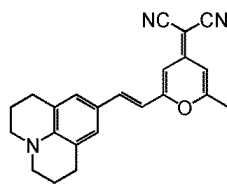
DPVBi



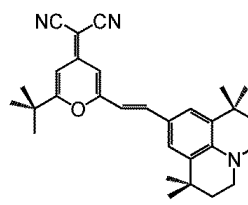
DPAVBi



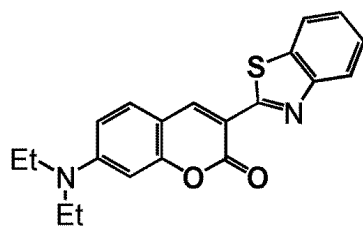
TBPe



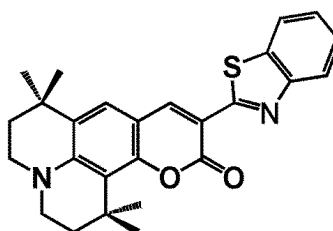
DCM



DCJTb



Coumarin 6



C545T

[유기층(150) 중 전자 수송 영역]

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

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

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

가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0433] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은, π 전자 결핍성 함질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0434] 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 $*-N=*$ 모이어티를 갖는 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 의미한다.
- [0435] 예를 들어, 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, i) 적어도 하나의 $*-N=*$ 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹이거나, ii) 적어도 하나의 $*-N=*$ 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 2 이상이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹이거나, 또는 iii) 적어도 하나의 $*-N=*$ 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 적어도 하나와, 적어도 하나의 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0436] 상기 π 전자 결핍성 함질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 인다졸, 푸린(purine), 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴놀살린, 퀴나졸린, 시놀린, 페난트리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 벤조이미다졸, 이소벤조티아졸, 벤조옥사졸, 이소벤조옥사졸, 트리아졸, 테트라졸, 옥사디아졸, 트리아진, 티아디아졸, 이미다조피리딘, 이미다조피리미딘, 아자카바졸 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0437] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0438] <화학식 601>
- [0439] $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$
- [0440] 상기 화학식 601 중,
- [0441] Ar_{601} 은 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0442] $xe11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0443] 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,
- [0444] $xe1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0445] 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,
- [0446] 상기 Q_{601} 내지 Q_{603} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0447] $xe21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0448] 일 구현예에 따르면, 상기 $xe11$ 개의 Ar_{601} 및 $xe21$ 개의 R_{601} 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 함질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0449] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar_{601} 은,
- [0450] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센

그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조푸란 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

[0451] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조푸란 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;

[0452] 중에서 선택될 수 있고,

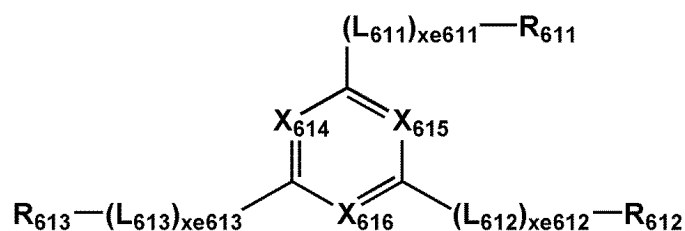
[0453] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0454] 상기 화학식 601 중 xe1이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0455] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0456] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

[0457] <화학식 601-1>



[0458]

[0459] 상기 화학식 601-1 중,

[0460] 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,

[0461] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0462] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0463] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0464] 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.

[0465] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L_{601} 및 L_{611} 내지 L_{613} 은 서로 독립적으로,

[0466] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아IRO-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0467] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아IRO-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아IRO-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 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;

[0468] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0469] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe_1 및 xe_{611} 내지 xe_{613} 은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0470] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R_{601} 및 R_{611} 내지 R_{613} 은 서로 독립적으로,

[0471] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아IRO-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

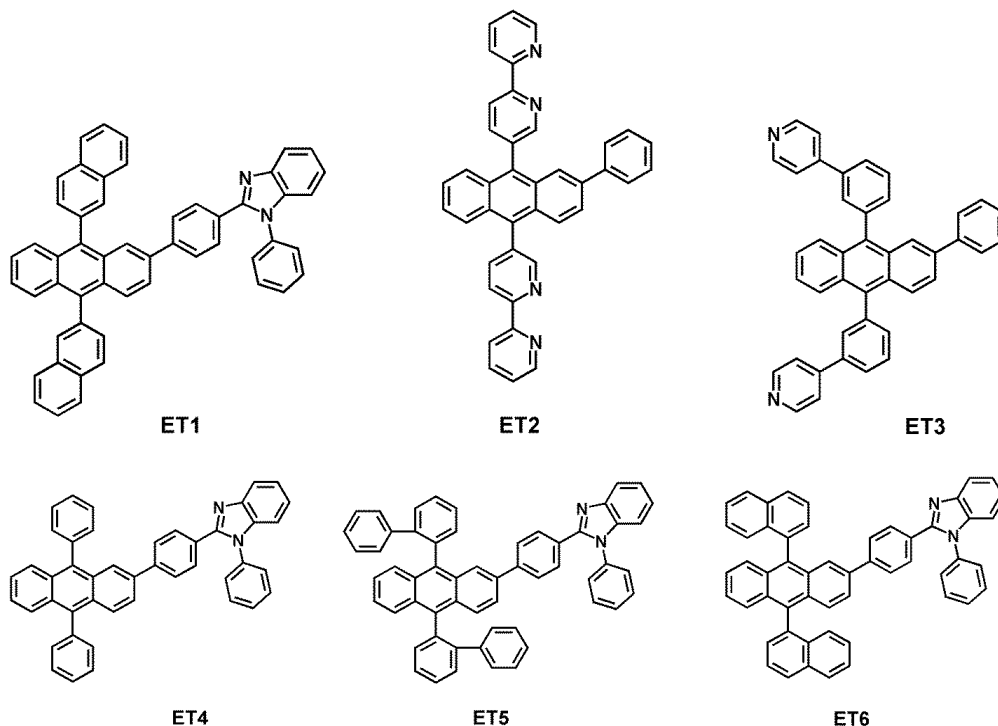
[0472] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 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, 디벤조실릴일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0473] -S(=O)₂(Q₆₀₁) 및 -P(=O)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂);

[0474] 중에서 선택되고,

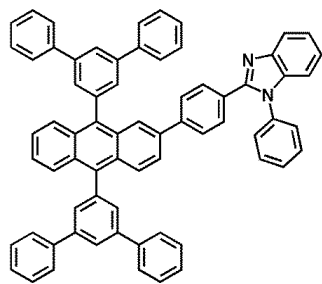
[0475] 상기 Q₆₀₁ 및 Q₆₀₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0476] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

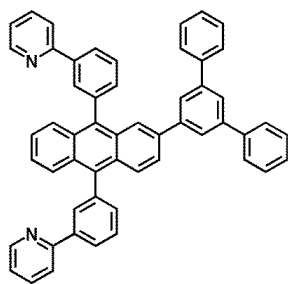


[0477]

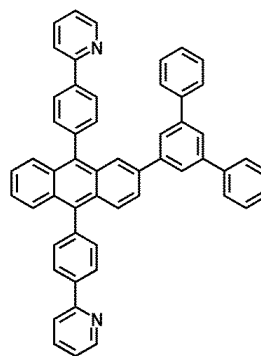
[0478]



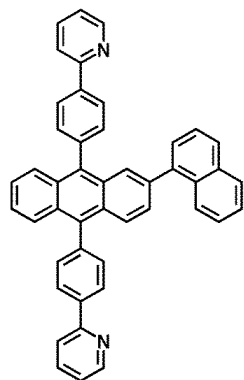
ET7



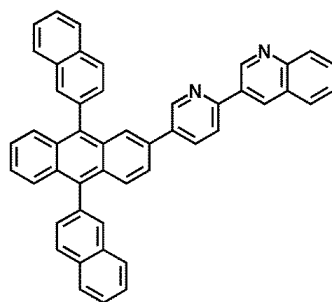
ET8



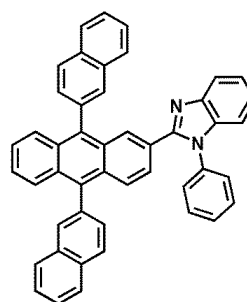
ET9



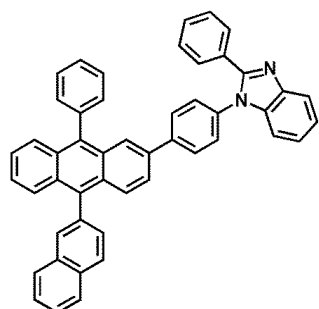
ET10



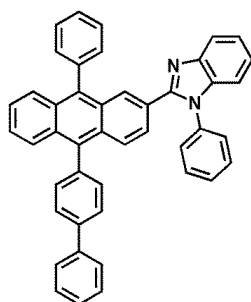
ET11



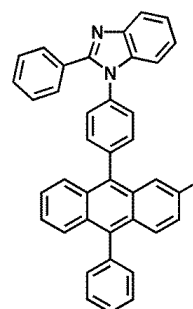
ET12



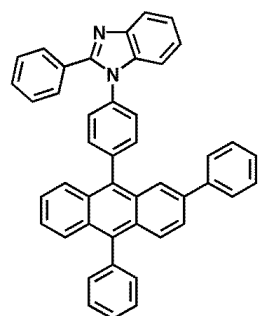
ET13



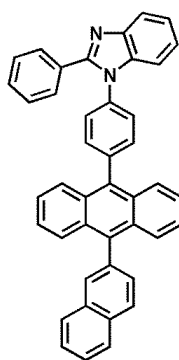
ET14



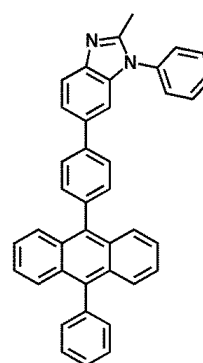
ET15



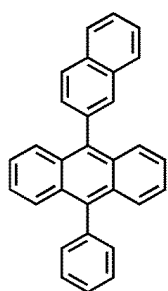
ET16



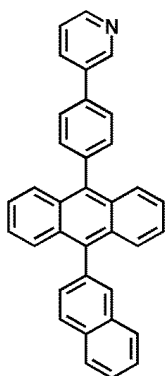
ET17



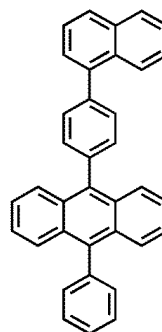
ET18



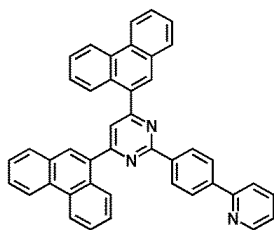
ET19



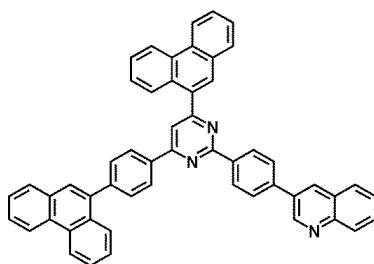
ET20



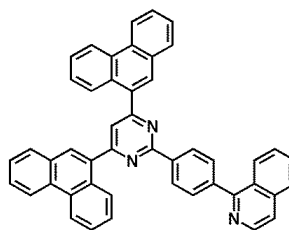
ET21



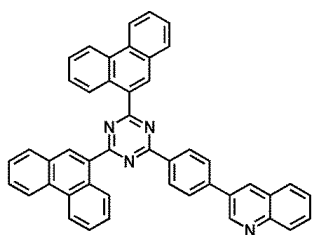
ET22



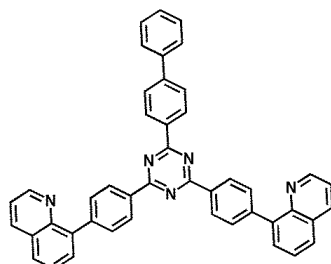
ET23



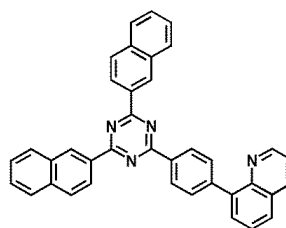
ET24



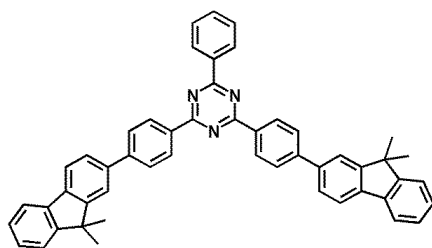
ET25



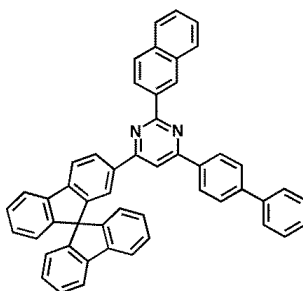
ET26



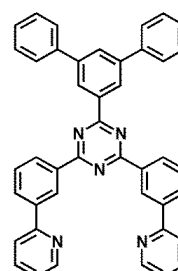
ET27



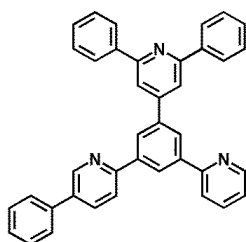
ET28



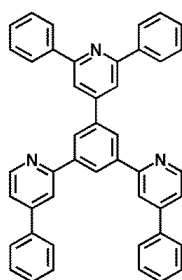
ET29



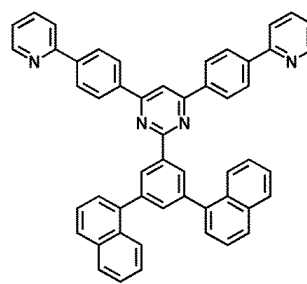
ET30



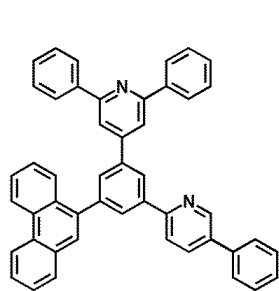
ET31



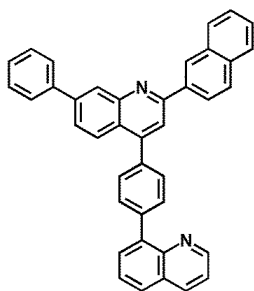
ET32



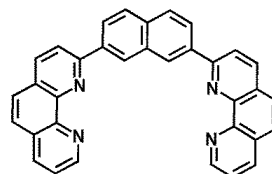
ET33



ET34

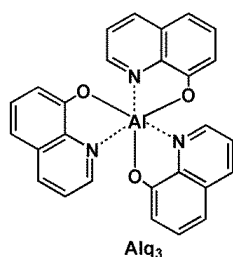


ET35

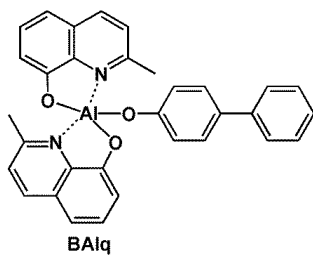


ET36

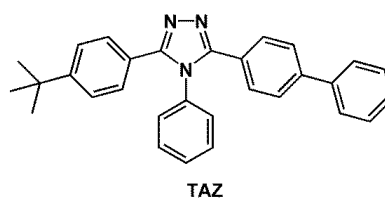
또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, BAlq, TAZ(3-(Biphenyl-4-yl)-5-(4-*tert*-butylphenyl)-4-phenyl-4H-1,2,4-triazole) 및 NTAZ 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다.



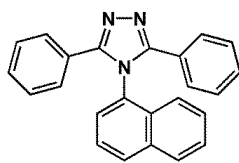
Alq₃



BAlq



TAZ



NTAZ

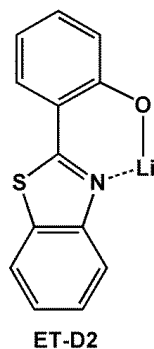
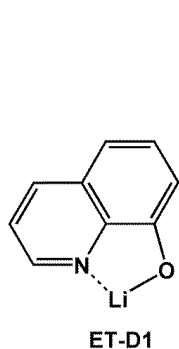
상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성 또는 전자 조절 특성을 얻을 수 있다.

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.

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.

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.

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.



[0496]

[0497]

[0498]

[0499]

[0500]

[0501]

[0502]

[0503]

[0504]

[0505]

[0506]

[0507]

[0508]

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.

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.

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

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.

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

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

상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.

상기 알칼리 금속 화합물은, Li_2O , Cs_2O , K_2O 등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속 화합물은, LiF, Li_2O , NaF, LiI, NaI, CsI, KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO, $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$), $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$) 등과 같은 알칼리 토금속 화합물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

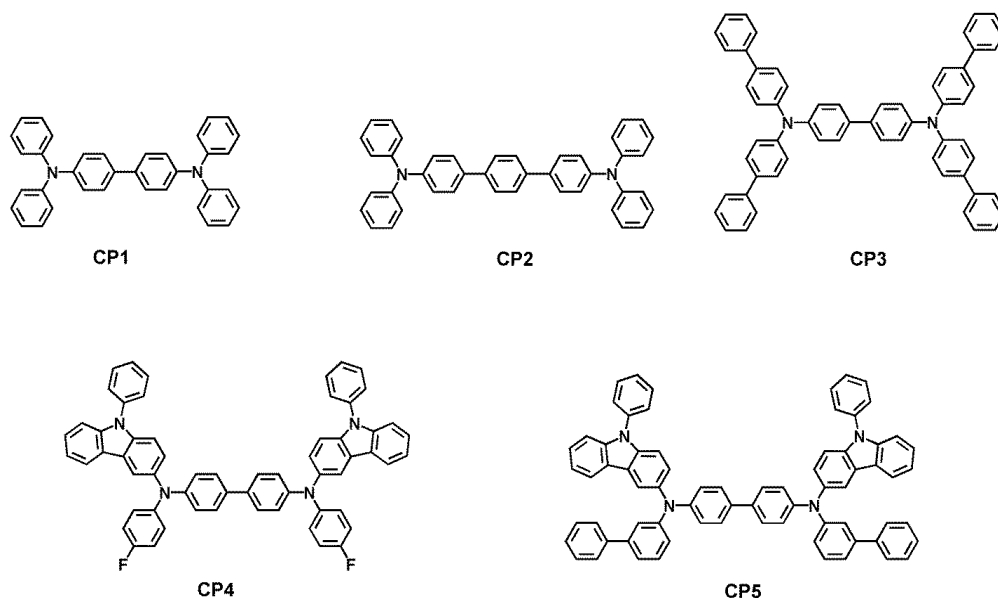
상기 희토류 금속 화합물은, YbF_3 , ScF_3 , ScO_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , 및 TbF_3 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은 YbF_3 , ScF_3 , TbF_3 , YbI_3 , ScI_3 , TbI_3 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트론 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

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.

- [0509] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 적절한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0510] [제2전극(190)]
- [0511] 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.
- [0512] 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.
- [0513] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0514] [도 2 내지 4에 대한 설명]
- [0515] 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.
- [0516] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.
- [0517] 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.
- [0518] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.
- [0519] 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.
- [0520] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물, 아민계 화합물, 포르핀 유도체 (porphine derivatives), 프탈로시아닌 유도체 (phthalocyanine derivatives), 나프탈로시아닌 유도체 (naphthalocyanine derivatives), 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나의 물질을 포함할 수 있다. 상기 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물 및 아민계 화합물은, 선택적으로, O, N, S, Se, Si, F, Cl, Br 및 I 중에서 선택된 적어도 하나의 원소를 포함한 치환기로 치환될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민계 화합물을 포함할 수 있다.
- [0521] 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.
- [0522] 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.



[0523]

[0525]

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

[0526]

상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층은 각각, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 소정 영역에 형성될 수 있다.

[0527]

진공 증착법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 증착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500℃의 증착 온도, 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

[0528]

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

[0529]

[치환기의 일반적인 정의]

[0530]

본 명세서 중 C_1 - C_{60} 알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1 - C_{60} 알킬렌기는 상기 C_1 - C_{60} 알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

[0531]

본 명세서 중 C_2 - C_{60} 알케닐기는, 상기 C_2 - C_{60} 알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_2 - C_{60} 알케닐렌기는 상기 C_2 - C_{60} 알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0532]

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

[0533]

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

[0534]

본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의

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

[0535] 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-옥사트리아졸리디닐기(1,2,3,4-oxatriazolidinyl), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranlyl), 테트라히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0536] 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.

[0537] 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.

[0538] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

[0539] 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.

[0540] 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.

[0541] 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.

[0542] 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.

[0543] 본 명세서 중 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 5 내지 60의 모노시클릭

또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

[0544] 본 명세서 중 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이란, 상기 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹과 동일한 구조를 갖되, 고리-형성 원자로서, 탄소(탄소수는 1 내지 60일 수 있음) 외에, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 그룹을 의미한다.

[0545] 본 명세서 중, 상기 치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0546] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기;

[0547] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, $-B(Q_{11})(Q_{12})$, $-C(=O)(Q_{11})$, $-S(=O)_2(Q_{11})$ 및 $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기;

[0548] C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0549] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$ 및 $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0550] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$;

[0551] 중에서 선택되고,

[0552] 상기 Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,

비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0553] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu^t"은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"은 메톡시기를 의미한다.

[0554] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

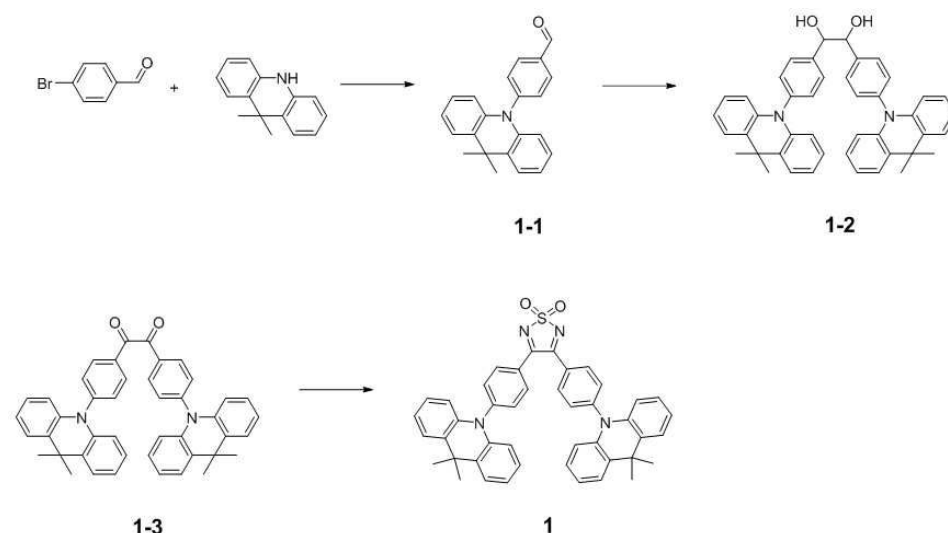
[0555] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0556] 본 명세서 중 * 및 *'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0557] 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.

[합성예]

[0559] 합성예 1: 화합물 1의 합성



[0560]

1) 화합물 1-1의 합성

[0561]

[0562] 질소 분위기에서 4-bromobenzaldehyde (1당량)과 Pd(OAc)₂(0.05당량), P(t-Bu)₃(0.5당량), NaOt-Bu(1당량)을 톨루엔 용매에 녹인 후 9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine(1당량)을 첨가하였다. 이후 반응 혼합물을 12시간 동안 환류 교반 하였다. 이 혼합물을 상온까지 냉각시킨 후 증류수를 천천히 투입하고 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. MgSO₄를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1을 얻었다. (수율 : 87%)

[0563] 2) 화합물 1-2의 합성

[0564] 질소 분위기에서 -78℃를 유지하며 THF 용매에 Cp₂TiCl₂ (1.2당량)을 녹인 후 이 혼합물에 sec-BuMgCl (1.2당량)을 투입하였다. -78℃에서 2시간 동안 교반한 후 천천히 상온으로 올리며 30분 동안 교반하였다. 다시 -78℃로 온도를 낮춘 후 화합물 1-1 (1당량)을 투입하고 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 혼합물에 증류수를 천천히 투입하고, 생성된 고체를 필터한 후 ethyl ether 용매로 세척한 후 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. MgSO₄를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2을 얻었다. (수율 : 66%)

[0565] 3) 화합물 1-3의 합성

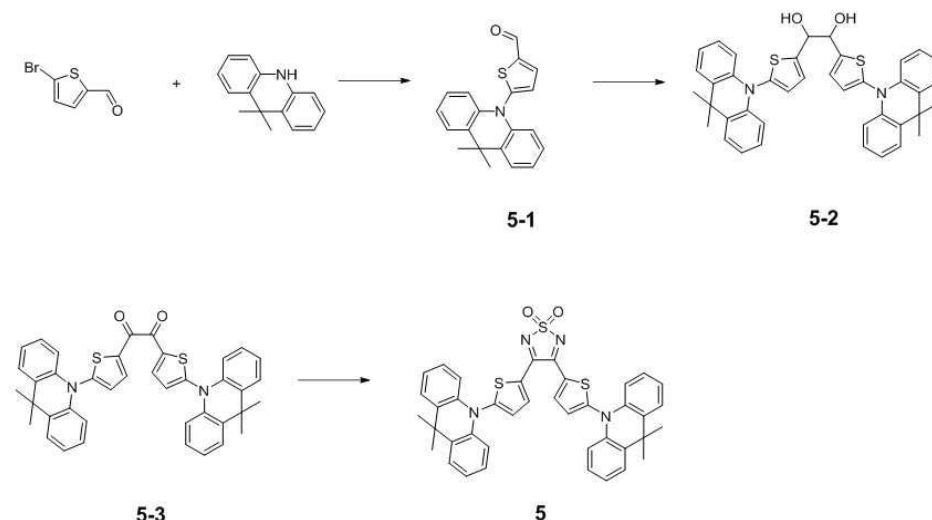
[0566] 화합물 1-2 (1당량)과 N-Bromosuccinimide (2.2당량)을 CCl₄ 용매에 녹이고 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였

다. 얻어진 고체를 필터한 후 ethyl ether 용매로 세척한 후 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-3을 얻었다. (수율 : 42%)

4) 화합물 1의 합성

화합물 1-3 (1다량)과 sulfamide (5당량)을 anhydrous ethanol에 녹인 후 8시간 동안 환류 교반하며 HCl 가스를 주입하였다. 반응 종료 후 혼합물에 증류수를 천천히 투입하고 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 1을 얻었다. (수율 : 31%)

합성예 2: 화합물 5의 합성



1) 화합물 5-1의 합성

질소 분위기에서 5-bromothiophene-2-carbaldehyde (1당량)과 $Pd(OAc)_2$ (0.05당량), $P(t-Bu)_3$ (0.5당량), $NaOt-Bu$ (1당량)을 톨루엔 용매에 녹인 후 9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine (1당량)을 첨가하였다. 이후 반응 혼합물을 12시간 동안 환류 교반하였다. 이 혼합물을 상온까지 냉각시킨 후 증류수를 천천히 투입하고 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 5-1을 얻었다. (수율 : 72%)

2) 화합물 5-2의 합성

질소 분위기에서 $-78^\circ C$ 를 유지하며 THF 용매에 Cp_2TiCl_2 (1.2당량)을 녹인 후 이 혼합물에 $sec-BuMgCl$ (1.2당량)을 투입하였다. $-78^\circ C$ 에서 2시간 동안 교반한 후 천천히 상온으로 올리며 30분간 교반하였다. 다시 $-78^\circ C$ 로 온도를 낮춘 후 화합물 5-1 (1당량)을 투입하고 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 혼합물에 증류수를 천천히 투입하고 생성된 고체를 필터한 후 ethyl ether 용매로 세척하고 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 5-2을 얻었다. (수율 : 53%)

3) 화합물 5-3의 합성

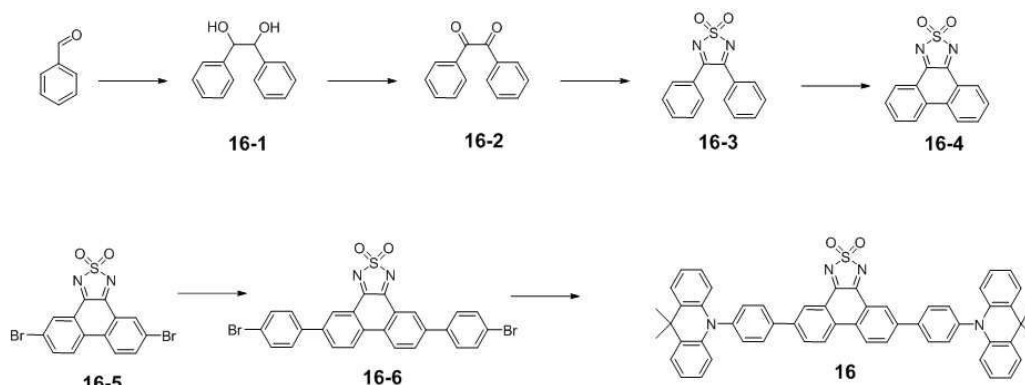
화합물 5-2 (1당량)과 N-Bromosuccinimide (2.2당량)을 CCl_4 용매에 녹이고 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다. 얻어진 고체를 필터한 후 ethyl ether 용매로 세척한 후 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 5-3을 얻었다. (수율 : 40%)

4) 화합물 5의 합성

화합물 5-3 (1다량)과 sulfamide (5당량)을 anhydrous ethanol에 녹인 후 8시간 동안 환류 교반하며 HCl 가스

를 주입하였다. 반응 종료 후 혼합물에 증류수를 천천히 투입하고 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축한다. Ethyl acetate/hexane 을 이용한 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 5을 얻었다. (수율 : 33%)

[0579] 합성예 3: 화합물 16의 합성



[0580]

[0581] 1) 화합물 16-1의 합성

[0582] 질소 분위기에서 $-78^{\circ}C$ 를 유지하며 THF 용매에 Cp_2TiCl_2 (1.2당량)을 녹인 후 이 혼합물에 sec-BuMgCl (1.2당량)을 투입하였다. $-78^{\circ}C$ 에서 2시간 동안 교반한 후 천천히 상온으로 올리며 30분간 교반하였다. 다시 $-78^{\circ}C$ 로 온도를 낮춘 후 1-naphthaldehyde (1당량)를 천천히 투입하고 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 혼합물에 증류수를 천천히 투입하고 생성된 고체를 필터한 후 ethyl ether 용매로 세척한 후 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 16-1을 얻었다. (수율 : 80%)

[0583] 2) 화합물 16-2의 합성

[0584] 화합물 16-1 (1당량)과 N-Bromosuccinimide (2.2당량)을 CCl_4 용매에 녹이고 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다. 얻어진 고체를 필터한 후 ethyl ether 용매로 세척한 후 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 16-2를 얻었다. (수율 : 49%)

[0585] 3) 화합물 16-3의 합성

[0586] 화합물 16-2 (1당량)과 sulfamide (5당량)을 anhydrous ethanol에 녹인 후 8시간 동안 환류 교반하며 HCl 가스를 주입하였다. 반응 종료 후 혼합물에 증류수를 천천히 투입하고 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 16-3을 얻었다. (수율 : 49%)

[0587] 4) 화합물 16-4의 합성

[0588] 질소 분위기의 $0^{\circ}C$ 하에서 화합물 16-3을 anhydrous dichloromethane에 녹인 후 Anhydrous aluminium chloride (4당량)을 주입하고 상온으로 유지하여 3시간 동안 교반하였다. 이 혼합물에 얼음물을 넣은 후 dichloromethane으로 세척한 후 얻어진 고체를 필터하여 건조하였다. (수율 : 47%)

[0589] 5) 화합물 16-5의 합성

[0590] 질소 분위기에서 화합물 16-4 (1당량)을 THF 용매에 녹였다. $0^{\circ}C$ 의 빛이 없는 상태에서 반응 혼합물에 소량의 THF에 녹인 N-bromosuccinimide (2.2당량)를 천천히 주입한 후, 상온에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 증류수를 천천히 투입하고 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. 유기층을 $MgSO_4$ 를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공 하에 농축하였다. Ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 16-5를 얻었다. (수율 : 72%)

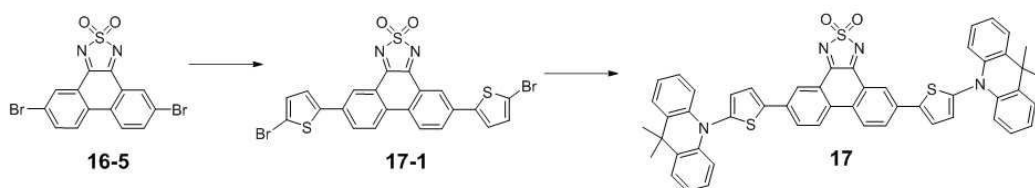
[0591] 6) 화합물 16-6의 합성

[0592] 질소 분위기에서 화합물 16-5 (1당량), Pd(Ph₃)₄ (0.05당량), K₂CO₃ (1.2 당량) 을 toluene에 녹인 후, 소량의 toluene에 녹인 (4-bromophenyl)boronic acid (2.3당량) 을 주입하였다. 반응 혼합물을 15시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 실온까지 냉각시키고 증류수를 천천히 투입하고 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. 유기층을 MgSO₄를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공 하에 농축하였다. ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 16-6을 얻었다. (수율 : 46%)

[0593] 7) 화합물 16의 합성

[0594] 질소 분위기에서 화합물 16-6 (1당량), 9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine (2당량), Pd(OAc)₂ (0.05당량), P(t-Bu)₃ (50 wt%, 0.05당량), NaOt-Bu (sodium tert-butoxide, 2당량)을 톨루엔 용매와 교반하였다. 120℃ 조건에서 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후, 실온까지 냉각시키고 물과 dichloromethane을 사용하여 추출하였다. 유기층을 MgSO₄를 이용하여 추출한 유기층의 수분을 제거하고 진공 하에 농축한다. ethyl acetate/hexane을 이용한 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 16를 얻었다. (수율 : 59%)

[0595] 합성예 4: 화합물 17의 합성



[0596]

[0597] 1) 화합물 17-1의 합성

[0598] 화합물 16-6의 합성과 동일하되, (4-bromophenyl)boronic acid 대신 (5-bromothiophen-2-yl)boronic acid 을 사용하였다. (수율 : 52%)

[0599] 2) 화합물 17의 합성

[0600] 화합물 16의 합성과 동일하되, 화합물 16-6 대신 화합물 17-1을 사용하였다. (수율 : 50%)

[0601] 상기 합성예 1 내지 4에서 합성된 화합물들의 ¹H NMR 및 MS/FAB을 표 1에 나타내었다.

[0602] 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

[0603]

화합물	¹ H NMR (CDCl ₃ , 400 MHz)	MS/FAB	
		found	calc.
1	δ = 7.44(d, 4H), 7.26(d, 4H), 7.07(d, 4H), 7.14(t, 4H), 7.11(d, 4H) 6.89(t, 4H), 1.69(s, 12H)	684.26	684.86
5	δ = 7.14(t, 4H), 7.11(d, 4H), 7.07(d, 4H), 6.89(t, 4H), 6.70(d, 2H) 5.98(d, 2H), 1.69(s, 12H)	696.17	696.90
16	δ = 8.17(s, 2H), 8.04(d, 4H), 7.14(t, 4H), 7.11(d, 4H), 7.07(d, 4H), 6.85(d, 2H) 5.98(d, 2H), 1.69(s, 12H)	834.30	835.04
17	δ = 8.20(s, 2H), 8.14(m, 4H), 7.55(d, 4H), 7.27(d, 4H), 7.14(t, 4H), 7.11(d, 4H), 6.89(t, 4H), 1.69(s, 12H)	846.22	847.08

[0604] [실시예]

[0605] 실시예 1

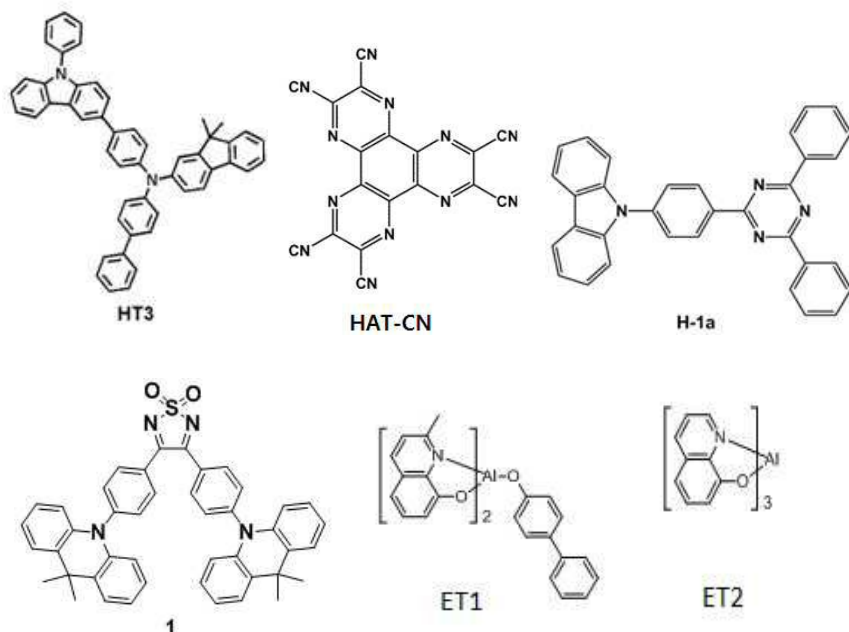
[0606] 유리 기판 상에 120nm 두께의 ITO막(애노드)을 형성한 후, 초음파 세정 및 전처리(UV-O₃ 처리, 열처리)를 수행 하였다.

[0607] 상기 애노드 상에 화합물 HT3와 HAT-CN를 99:1이 되도록 공증착하여 120nm 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0608] 이어서, 상기 정공 수송층 상부에 호스트(화합물 H-1a)와 도펀트(화합물 1, 1wt%)를 공증착하여, 30nm 두께의 발광층을 형성하였다.

[0609] 이 후, 상기 발광층 상부에 ET1을 증착하여 5 nm 두께의 버퍼층을 형성한 후, 상기 버퍼층 상부에 ET2를 증착하여 25 nm 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 0.5 nm 두께의 전자 주입층을 형성한 후, 상기 전자 주입층 상부에 Al를 진공 증착하여 150nm 두께의 캐소드를 형성하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0610]



[0611]

[0612] 실시예 2 내지 실시예 4 및 비교예 1

[0613] 발광층 형성시 도펀트로서 상기 화합물 1 대신 표 2의 화합물을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0614] 평가예 1

[0615] 상기 실시예 1 내지 4 및 비교예 1 에서 제작된 유기 발광 소자의 구동전압, 전류밀도, 휘도, 외부 양자 효율(EQE) 및 최대 발광 파장을 Keithley SMU 236 및 휘도계 PR745를 이용하여 측정하여, 그 결과를 표 2에 나타내었다.

표 2

[0616]

	도펀트 화합물	HOMO (eV)	LUMO (eV)	S ₁ (eV)	ΔE _{ST} (eV)	구동전압 (V)	EQE (%)	최대 발광 파장(nm)
실시예 1	화합물1	-5.46	-3.54	1.51	0.01	6.7	2.3	819
실시예 2	화합물 5	-5.66	-3.51	1.70	0.01	6.5	2.7	730
실시예 3	화합물 16	-5.40	-3.79	1.35	0.00	7.1	0.9	917
실시예 4	화합물 17	-5.57	-3.75	1.55	0.01	7.1	1.2	801
비교예 1	PtPc	-5.08	-2.74	1.32(T ₁)	0.86	7.9	0.5	968

[0617] 상기 표 2로부터, 실시예 1 내지 4의 유기 발광 소자는 PtPc(Pt Phthalocyanine)를 도펀트 화합물로 채용한 비교예 1의 유기 발광 소자에 비하여, 높은 외부 양자 효율을 가지면서도, 최대 발광 파장의 장파장 시프트(shift)가 가능하여 NIR 발광에 적합함을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0618]

10, 20, 30, 40: 유기 발광 소자

110: 제1전극
 150: 유기층
 190: 제2전극
 210: 제1캐핑층
 220: 제2캐핑층

도면

도면1

10

190
150
110

도면2

20

190
150
110
210

도면3

30

220
190
150
110

도면4

40

220
190
150
110
210

专利名称(译)	杂环化合物和包括其的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020190104087A	公开(公告)日	2019-09-06
申请号	KR1020180024720	申请日	2018-02-28
[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	예지명 김명숙 유병옥 고수병 윤지환 항재훈		
发明人	예지명 김명숙 유병옥 고수병 윤지환 항재훈		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0069 C09K2211/1051 C09K2211/1096 C07D417/14 H01L51/0068 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/5012 C09K2211/1018 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/5096 H01L2251/552		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

公开了具有预定化学式的杂环化合物和包括该杂环化合物的有机发光器件。 包含杂环化合物的有机发光器件具有低驱动电压，高效率，高亮度和长使用寿命。