



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년11월08일
(11) 등록번호 10-1916783
(24) 등록일자 2018년11월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 495/04 (2006.01) C07D 491/04 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07D 495/04 (2013.01)
C07D 491/04 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2015-0002805
(22) 출원일자 2015년01월08일
심사청구일자 2016년06월09일
(65) 공개번호 10-2015-0084662
(43) 공개일자 2015년07월22일
(30) 우선권주장
1020140004697 2014년01월14일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
KR1020100105099 A
(뒷면에 계속)

(73) 특허권자
삼성에스디아이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20 (공세동)
삼성전자주식회사
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)
(72) 발명자
김형선
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
김병구
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 11 항

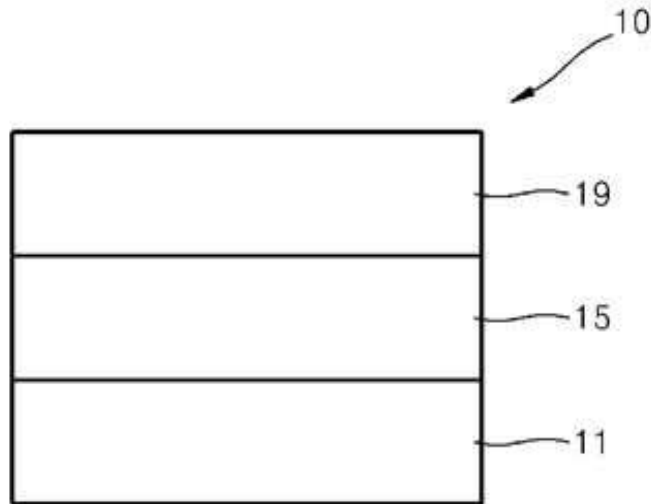
심사관 : 지무근

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

(57) 요약

신규 축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 제시된다.

대표도 - 도1



- (52) CPC특허분류
CO9K 11/06 (2013.01)
H01L 51/50 (2013.01)
- (72) 발명자
김영권
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
- 김창우**
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
- 서주희**
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
- 신창주**
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
- 이승재**
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
- 황규영**
경기도 안산시 상록구 건건8길 10, 106동 702호 (건건동, 건건e-편한세상아파트)
- (56) 선행기술조사문헌
KR1020130127563 A
KR101144358 B1
KR1020140000611 A
KR1020150061976 A
KR1020130110051 A
US20080026135 A1
W02012067425 A1
-

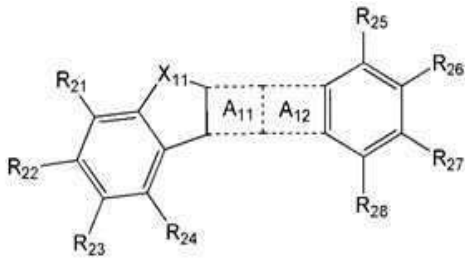
명세서

청구범위

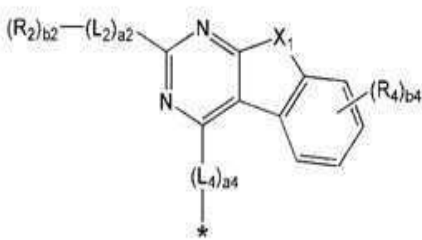
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물:

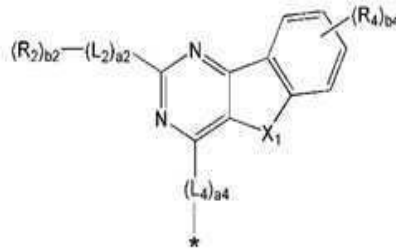
<화학식 1>



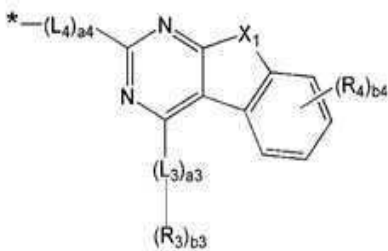
<화학식 2A>



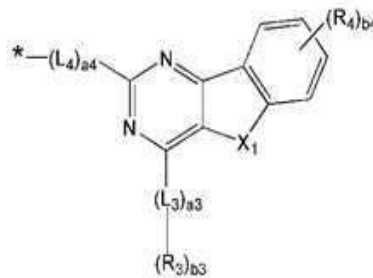
<화학식 2B>



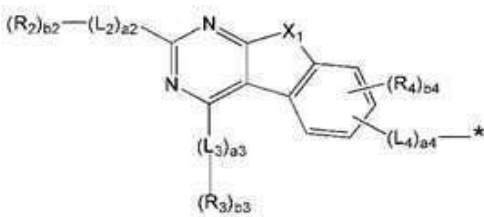
<화학식 2C>



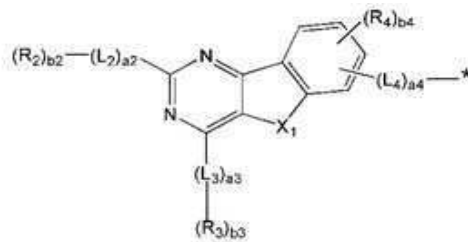
<화학식 2D>



<화학식 2E>

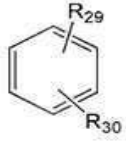


<화학식 2F>



<화학식 1A>

<화학식 1B>



상기 화학식들 중,

상기 화학식 1 중 고리 A₁₁은 상기 화학식 1A로 표시되고;

상기 화학식 1 중 고리 A₁₂는 상기 화학식 1B로 표시되고;

X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}], S 또는 O이고;

X₁₂는 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}], S 또는 O이고;

X₁은 S 또는 O이고;

L₁ 내지 L₄, L₁₁ 및 L₁₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이고;

a₁ 내지 a₄, a₁₁ 및 a₁₂는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

R₁ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₆ 및 R₂₁ 내지 R₃₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중 하나이되, 상기 R₁ 내지 R₆은, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아니고;

b₁ 내지 b₄, b₁₁ 및 b₁₂는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

i) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]이 아닐 경우, 상기 화학식 1 중 b₁₁개의 R₁₁ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

ii) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]가 아니고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]일 경우, 상기 화학식 1 중 b₁₂개의 R₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

iii) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]일 경우, 상기 화학식 1 중 b₁₁개의 R₁₁, b₁₂개의 R₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

상기 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 및 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, 시아노기, 또는 C₁-C₆₀알킬기;

중수소, 시아노기, C₆-C₆₀아릴기, 및 1가 비-방향족 축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기;

C₆-C₆₀아릴기, 또는 1가 비-방향족 축합다환 그룹; 또는

중수소, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₆-C₆₀아릴기, 및 1가 비-방향족 축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, C₆-C₆₀아릴기, 또는 1가 비-방향족 축합다환 그룹이다.

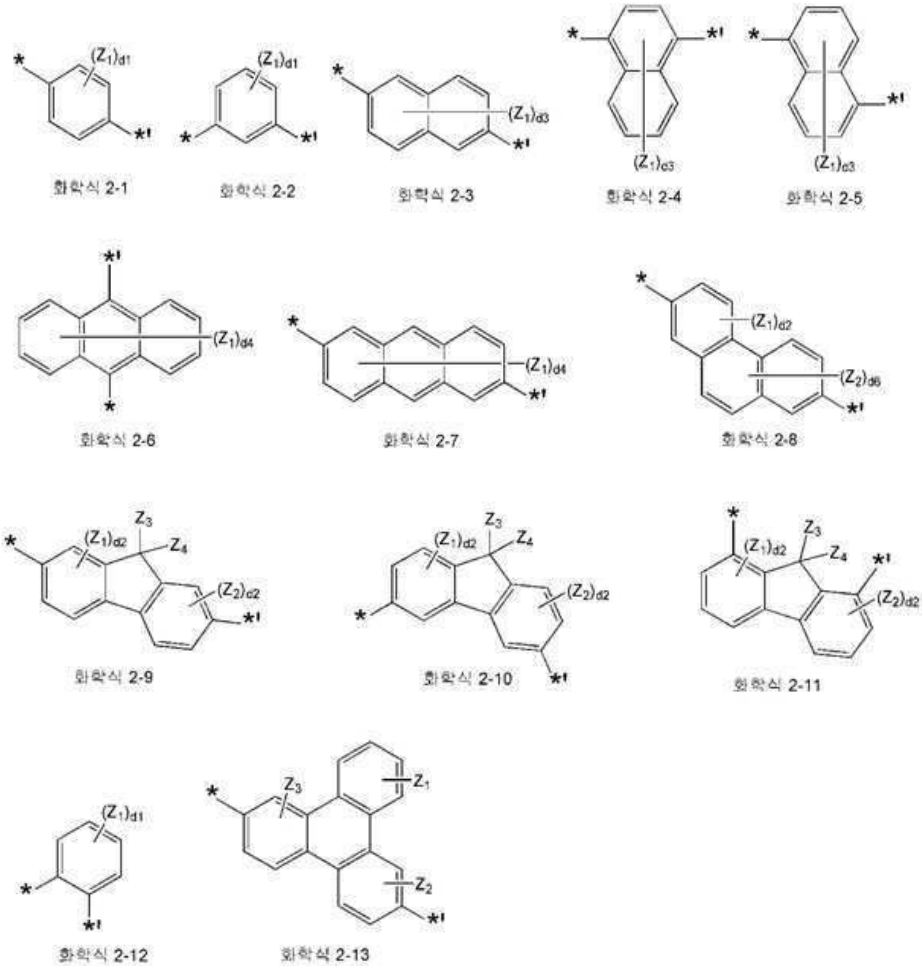
청구항 2

삭제

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 L₁ 내지 L₄, L₁₁ 및 L₁₂는 서로 독립적으로, 화학식 2-1 내지 2-13 중 하나로 표시되는, 축합환 화합물:



상기 화학식 2-1 내지 2-13 중,

Z₁ 내지 Z₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 또는 비페닐기이고;

d1은 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, d2는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, d3는 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, d4는 1 내지 8의 정수 중에서 선택되고, d6는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고, * 및 *'는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

R₁ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₆ 및 R₂₁ 내지 R₃₀는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, 시아노기, 또는 C₁-C₂₀알킬기;

중수소, 및 시아노기, 니트로기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기;

페닐기(phenyl), 펜탈레닐기(pentalenyl), 인데닐기(indenyl), 나프틸기(naphthyl), 아줄레닐기(azulenyl), 헵탈레닐기(heptalenyl), 인다세닐기(indacenyl), 아세나프틸기(acenaphthyl), 플루오레닐기(fluorenyl), 스파이

로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기(phenalenyl), 페난트레닐기(phenanthrenyl), 안트라세닐기(anthracenyl), 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 파이레닐기(pyrenyl), 크라이세닐기(chrysenyl), 나프타세닐기(naphthacenyl), 피세닐기(picenyl), 페릴레닐기(perylenyl), 펜타페닐기(pentaphenyl), 헥사세닐기(hexacenyl), 펜타세닐기(pentacenyl), 루비세닐기(rubicenyl), 코로네닐기(coronenyl), 오발레닐기(ovalenyl);

중수소, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기 및 비페닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 또는 오발레닐기; 또는

상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 (단, 상기 R₁ 내지 R₆는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아님) 중 하나인, 축합환 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

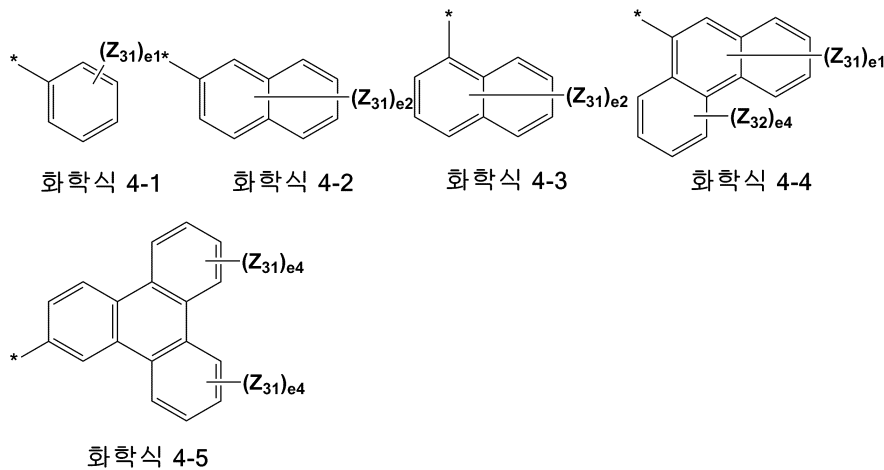
상기 R₁ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₆ 및 R₂₁ 내지 R₃₀이 서로 독립적으로,

수소, 중수소, 시아노기, 또는 C₁-C₂₀알킬기;

중수소, 및 시아노기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기;

하기 화학식 4-1 내지 4-31 중 하나; 또는

상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹(단, R₁ 내지 R₆는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아님) 중 하나; 인, 축합환 화합물:



화학식 4-1 내지 4-5 중,

Z₃₁ 및 Z₃₂은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 또는 비페닐기이고;

e₁은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고, e₂는 1 내지 7의 정수 중에서 선택되고, e₄는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 화학식 2A 및 2B의 R₂, 상기 화학식 2C 및 2D의 R₃ 및 상기 화학식 2E 및 2F의 R₂ 및 R₃ 중 적어도 하나가,

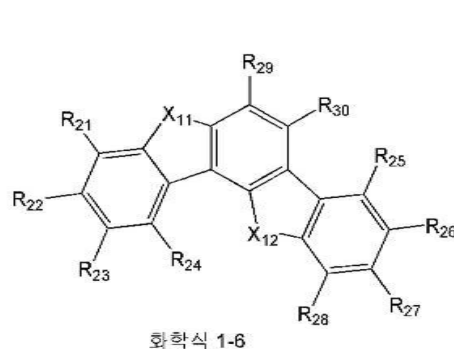
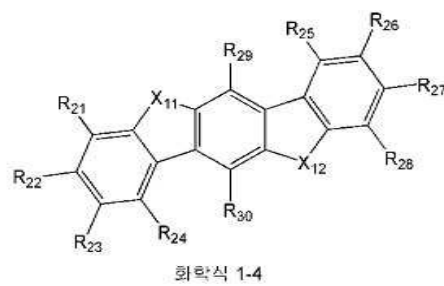
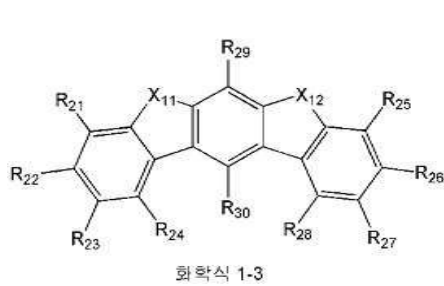
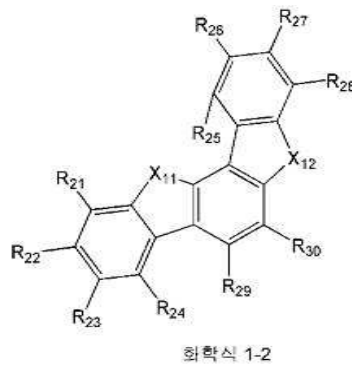
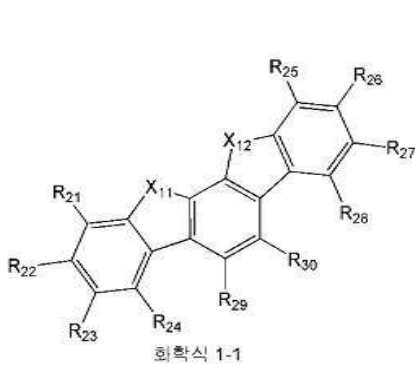
페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 또는 오발레닐기; 또는

중수소, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기 및 비페닐 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 또는 오발레닐기인, 축합환 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

하기 화학식 1-1 내지 1-6 중 하나로 표시되는, 축합환 화합물:



상기 화학식 1-1 내지 1-6 중 X_{11} , X_{12} 및 R_{21} 내지 R_{30} 에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하다.

청구항 8

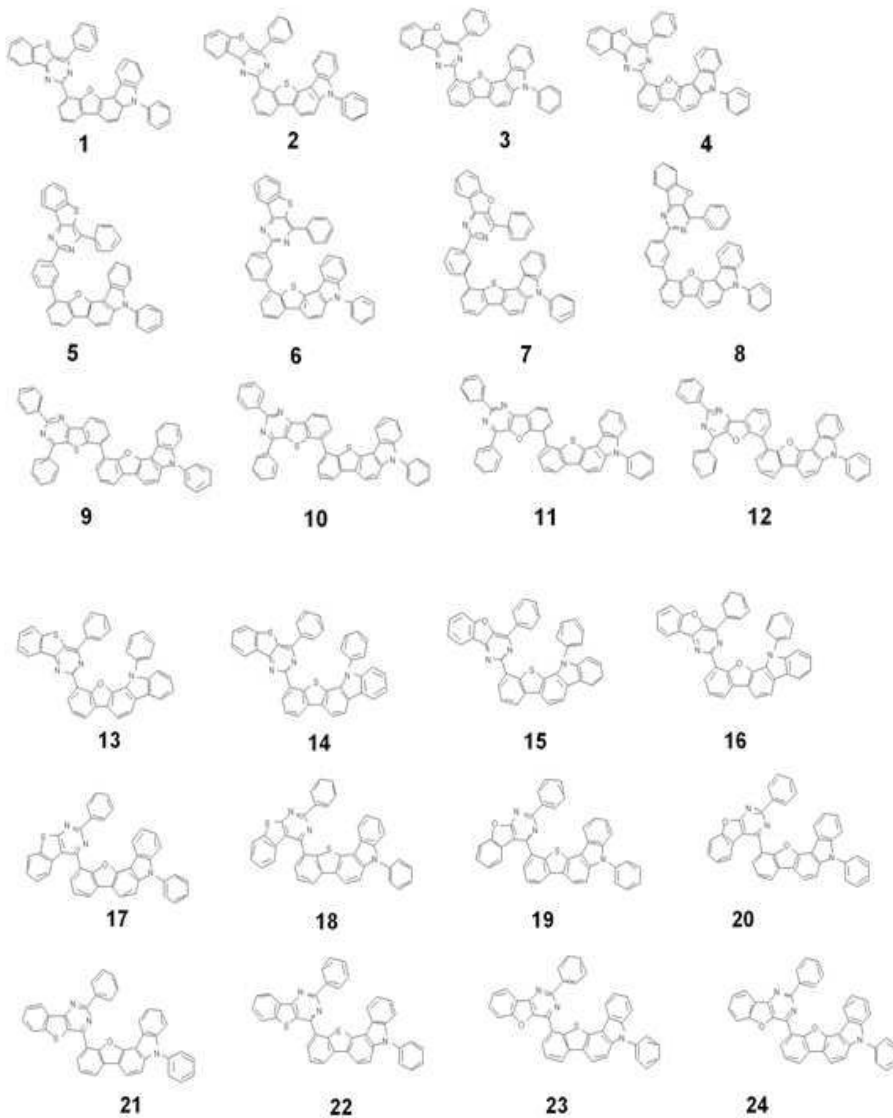
제1항에 있어서,

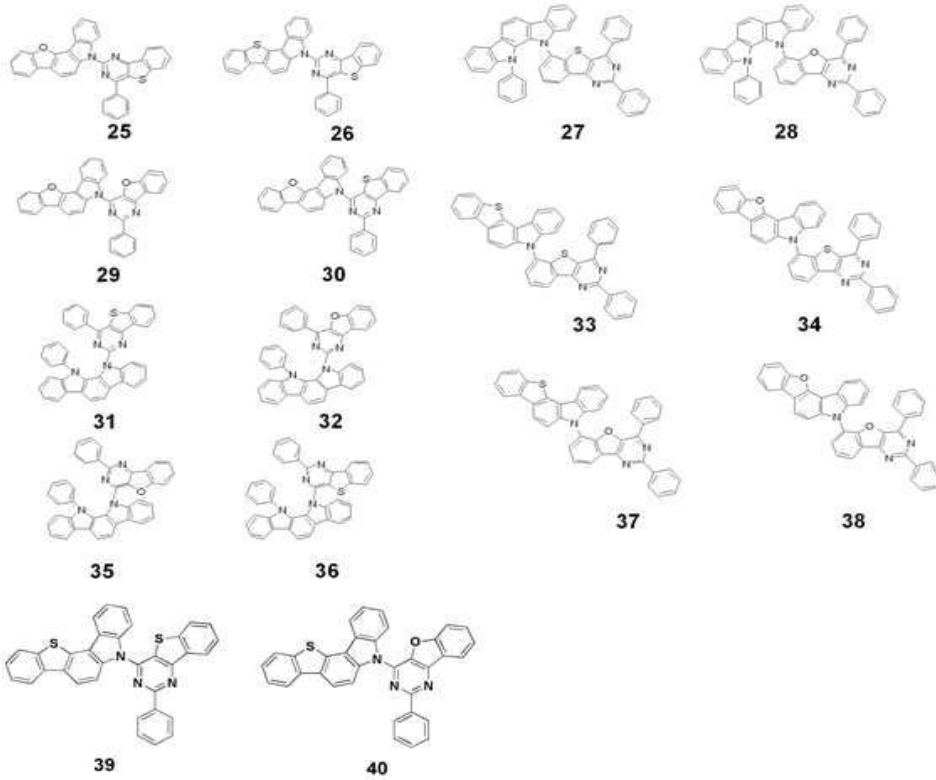
- i) 상기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시되고, 화학식 1-1 및 1-2 중 R_{21} 이 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되거나, 또는
- ii) 상기 화학식 1-1 또는 1-6로 표시되고, 화학식 1-1 및 1-6 중 X_{11} 이 $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ 이고, R_{11} 이 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되는, 축합환 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 40 중 하나인, 축합환 화합물:





청구항 10

제1전극; 상기 제1전극에 대향되는 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되며 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 제1항 및 제3항 내지 제9항 중 어느 한 항의 축합환 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

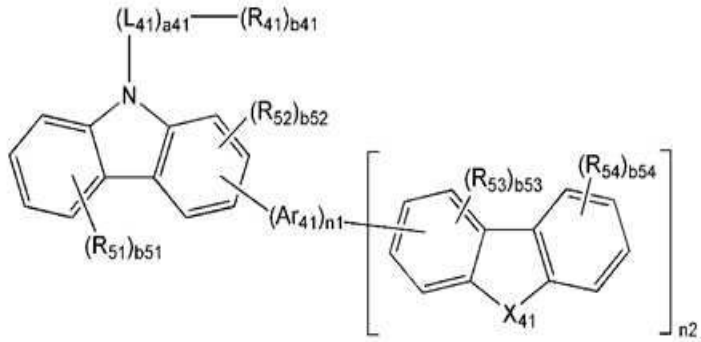
청구항 11

제10항에 있어서,
상기 축합환 화합물은 상기 발광층에 존재하는, 유기 발광 소자.

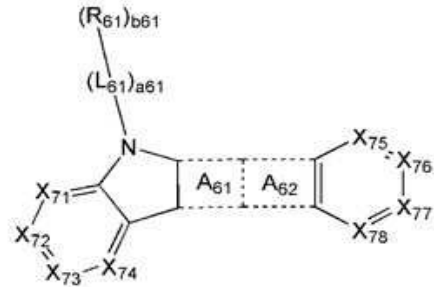
청구항 12

제10항에 있어서,
상기 발광층은 제1호스트, 제2호스트 및 도펀트를 포함하고,
상기 제1호스트와 상기 제2호스트는 서로 상이하고,
상기 제1호스트는 상기 축합환 화합물을 포함하고,
상기 제2호스트는 하기 화학식 41로 표시되는 제1화합물 및 하기 화학식 61로 표시되는 제2화합물 중 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자:

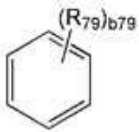
<화학식 41>



<화학식 61>



<화학식 61A>



<화학식 61B>



상기 화학식들 중

X₄₁은 N-[(L₄₂)_{a42}-(R₄₂)_{b42}], S, O, S(=O), S(=O)₂, C(=O), C(R₄₃)(R₄₄), Si(R₄₃)(R₄₄), P(R₄₃), P(=O)(R₄₃) 또는 C=N(R₄₃) 이고;

상기 화학식 61 중 고리 A₆₁은 상기 화학식 61A로 표시되고;

상기 화학식 61 중 고리 A₆₂는 상기 화학식 61B로 표시되고;

X₆₁은 N-[(L₆₂)_{a62}-(R₆₂)_{b62}], S, O, S(=O), S(=O)₂, C(=O), C(R₆₃)(R₆₄), Si(R₆₃)(R₆₄), P(R₆₃), P(=O)(R₆₃) 또는 C=N(R₆₃) 이고;

X₇₁은 C(R₇₁) 또는 N이고, X₇₂는 C(R₇₂) 또는 N이고, X₇₃은 C(R₇₃) 또는 N이고, X₇₄는 C(R₇₄) 또는 N이고, X₇₅는 C(R₇₅) 또는 N이고, X₇₆은 C(R₇₆) 또는 N이고, X₇₇은 C(R₇₇) 또는 N이고, X₇₈은 C(R₇₈) 또는 N이고;

Ar₄₁, L₄₁, L₄₂, L₆₁ 및 L₆₂은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이고;

n₁ 및 n₂는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

a₄₁, a₄₂, a₆₁ 및 a₆₂는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

R₄₁ 내지 R₄₄, R₅₁ 내지 R₅₄, R₆₁ 내지 R₆₄ 및 R₇₁ 내지 R₇₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I,

히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) 또는 -B(Q₆)(Q₇) 이고;

b41, b42, b51 내지 b54, b61, b62 및 b79는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;

C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

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-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅) 및 -B(Q₂₆)(Q₂₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

-N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅) 또는 -B(Q₃₆)(Q₃₇); 이고;

상기 Q₁ 내지 Q₇, Q₁₁ 내지 Q₁₇, Q₂₁ 내지 Q₂₇ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₇은 서로 독립적으로, 수소, 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-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 제시된다.

배경 기술

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

[0003] 일예에 따르면, 유기 발광 소자는, 애노드, 캐소드 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재된 발광층을 포함할 수 있다. 상기 애노드와 발광층 사이에는 정공 수송 영역이 구비될 수 있고, 상기 발광층과 캐소드 사이에는 전자 수송 영역이 구비될 수 있다. 상기 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 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

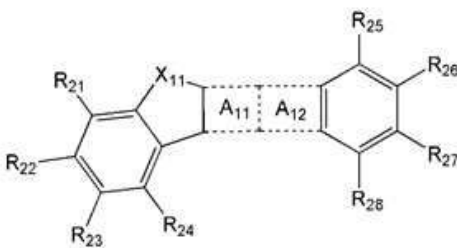
해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

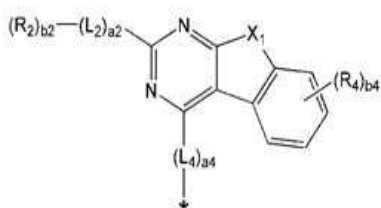
[0005] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0006] <화학식 1>



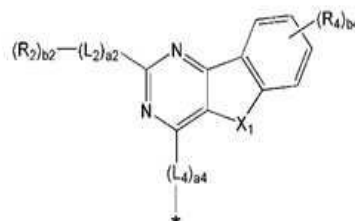
[0007]

[0008] <화학식 2A>

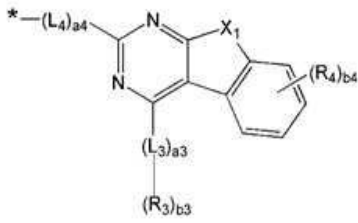


[0009]

<화학식 2B>

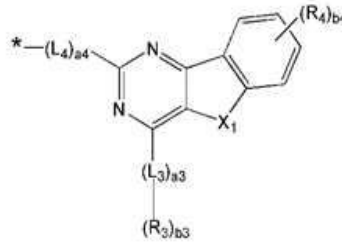


[0010] <화학식 2C>

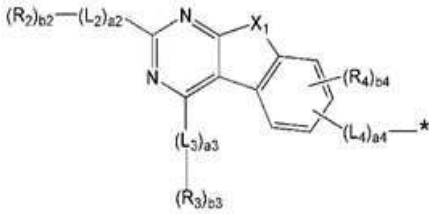


[0011]

<화학식 2D>

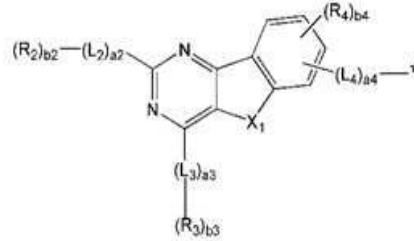


[0012] <화학식 2E>

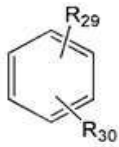


[0013]

<화학식 2F>



[0014] <화학식 1A>



[0015]

<화학식 1B>



[0016] 상기 화학식들 중,

[0017] 상기 화학식 1 중 고리 A11은 상기 화학식 1A로 표시되고;

[0018] 상기 화학식 1 중 고리 A12는 상기 화학식 1B로 표시되고;

[0019] X11은 N-[(L11)a11-(R11)b11], S, O, S(=O), S(=O)2, C(=O), C(R13)(R14), Si(R13)(R14), P(R13), P(=O)(R13) 또는 C=N(R13)이고;

[0020] X12는 N-[(L12)a12-(R12)b12], S, O, S(=O), S(=O)2, C(=O), C(R15)(R16), Si(R15)(R16), P(R15), P(=O)(R15) 또는 C=N(R15)이고;

[0021] X1은 N-[(L1)a1-(R1)b1], S, O, S(=O), S(=O)2, C(=O), Si(R5)(R6), P(R5), P(=O)(R5) 또는 C=N(R5)이고;

[0022] L1 내지 L4, L11 및 L12는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C3-C10시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2-C10헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3-C10시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2-C10헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C60아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2-C60헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이고;

[0023] a1 내지 a4, a11 및 a12는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

[0024] R1 내지 R6, R11 내지 R16 및 R21 내지 R30은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F(플루오로기), -Cl(클로로기), -Br(브로모기), -I(아이오도기), 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C1-C60알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C60알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2-C60알키닐기, 치환 또는 비치환된 C1-C60알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3-C10시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C10헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3-C10시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2-C10헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C60아릴기, 치환 또는

비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 또는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중 하나이되, 상기 R₁ 내지 R₆은, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아니고;

- [0025] b1 내지 b4, b11 및 b12는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고;
- [0026] i) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]이 아닐 경우, 상기 화학식 1 중 b11개의 R₁₁ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0027] ii) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]가 아니고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]일 경우, 상기 화학식 1 중 b12개의 R₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0028] iii) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]일 경우, 상기 화학식 1 중 b11개의 R₁₁, b12개의 R₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0029] 상기 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0030] 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-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0031] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0032] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0033] 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-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅) 및 -B(Q₂₆)(Q₂₇) 중 적어도 하나로 치환된,

C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

[0034] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅) 또는 -B(Q₃₆)(Q₃₇); 이고;

[0035] 상기 Q₁ 내지 Q₇, Q₁₁ 내지 Q₁₇, Q₂₁ 내지 Q₂₇ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₇은 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알킬닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

[0036] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 적어도 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0037] 상기 축합환 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있고, 상기 발광층은 도펀트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 상기 축합환 화합물은 호스트의 역할을 할 수 있다.

발명의 효과

[0038] 상기 축합환 화합물은 우수한 전기적 특성 및 열적 안정성을 갖는 바, 상기 축합환 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명 특성을 가질 수 있다.

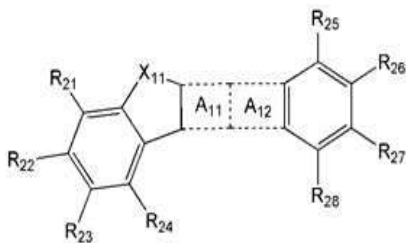
도면의 간단한 설명

[0039] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

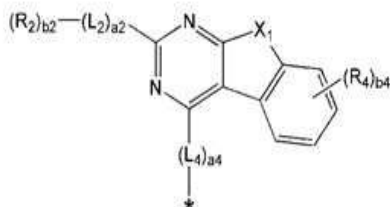
[0040] 상기 축합환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0041] <화학식 1>



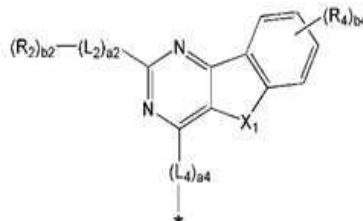
[0042]

[0043] <화학식 2A>

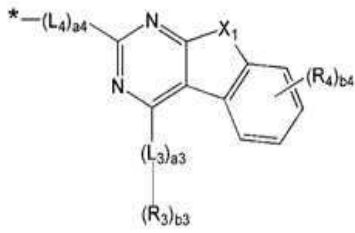


[0044]

<화학식 2B>

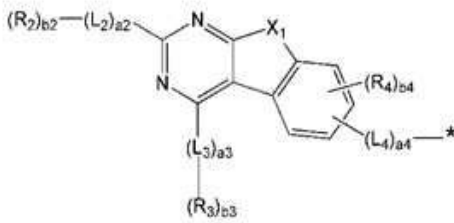


[0045] <화학식 2C>



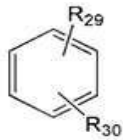
[0046]

[0047] <화학식 2E>



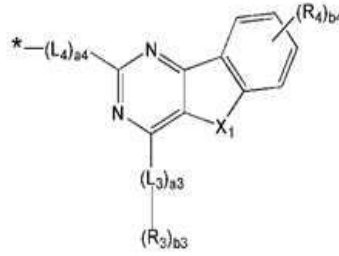
[0048]

[0049] <화학식 1A>

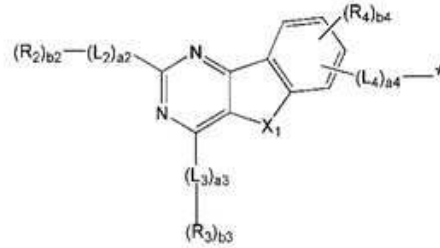


[0050]

<화학식 2D>



<화학식 2F>



[0049] <화학식 1B>



[0051] 상기 화학식 1 중 고리 A₁₁은 상기 화학식 1A로 표시된다. 상기 고리 A₁₁은 화학식 1 중 인접한 5원환 고리 및 고리 A₁₂ 각각과 탄소 원자를 공유하면서 서로 융합되어 있다.

[0052] 상기 화학식 1 중 고리 A₁₂는 상기 화학식 1B로 표시된다. 상기 고리 A₁₂는 화학식 1 중 고리 A₁₁ 및 인접한 6원 환 고리 각각과 탄소 원자를 공유하면서 서로 융합되어 있다.

[0053] 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}], S, O, S(=O), S(=O)₂, C(=O), C(R₁₃)(R₁₄), Si(R₁₃)(R₁₄), P(R₁₃), P(=O)(R₁₃) 또는 C=N(R₁₃)이고, 상기 화학식 1B 중 X₁₂는 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}], S, O, S(=O), S(=O)₂, C(=O), C(R₁₅)(R₁₆), Si(R₁₅)(R₁₆), P(R₁₅), P(=O)(R₁₅) 또는 C=N(R₁₅)이고, 상기 화학식 2A 내지 2F 중 X₁은 N-[(L₁)_{a1}-(R₁)_{b1}], S, O, S(=O), S(=O)₂, C(=O), Si(R₅)(R₆), P(R₅), P(=O)(R₅) 또는 C=N(R₅)이다.

[0054] L₁ 내지 L₄, L₁₁ 및 L₁₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이고;

[0055] a₁ 내지 a₄, a₁₁ 및 a₁₂는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

[0056] R₁ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₆ 및 R₂₁ 내지 R₃₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F(플루오로기), -Cl(클로로기), -Br(브로모기), -I(아이오도기), 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라 존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치 환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는

비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 또는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중 하나이되, 상기 R₁ 내지 R₆은, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아니고;

- [0057] b1 내지 b4, b11 및 b12는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고;
- [0058] 상기 화학식 1과 화학식 2A 내지 2F와의 관계는 하기와 같다:
- [0059] i) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]이 아닐 경우, 상기 화학식 1 중 b11개의 R₁₁ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0060] ii) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]가 아니고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]일 경우, 상기 화학식 1 중 b12개의 R₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0061] iii) 상기 화학식 1 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, X₁₂은 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]일 경우, 상기 화학식 1 중 b11개의 R₁₁, b12개의 R₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택된다.
- [0062] 상기 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0063] 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-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0064] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0065] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0066] 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-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1

가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 및 $-B(Q_{26})(Q_{27})$ 중 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_2-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_2-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_2-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

[0067] $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 또는 $-B(Q_{36})(Q_{37})$; 이고;

[0068] 상기 Q_1 내지 Q_7 , Q_{11} 내지 Q_{17} , Q_{21} 내지 Q_{27} 및 Q_{31} 내지 Q_{37} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 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_2-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_2-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_2-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

[0069] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 X_{11} 은 $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$, S 또는 O일 수 있다.

[0070] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1B 중 X_{12} 는 $N-[(L_{12})_{a12}-(R_{12})_{b12}]$, S 또는 O일 수 있다.

[0071] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 내지 2F 중 X_1 은 $N-[(L_1)_{a1}-(R_1)_{b1}]$, S 또는 O일 수 있다.

[0072] 상기 X_{11} 과 X_{12} 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0073] 상기 화학식들 중 L_1 내지 L_4 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹일 수 있다.

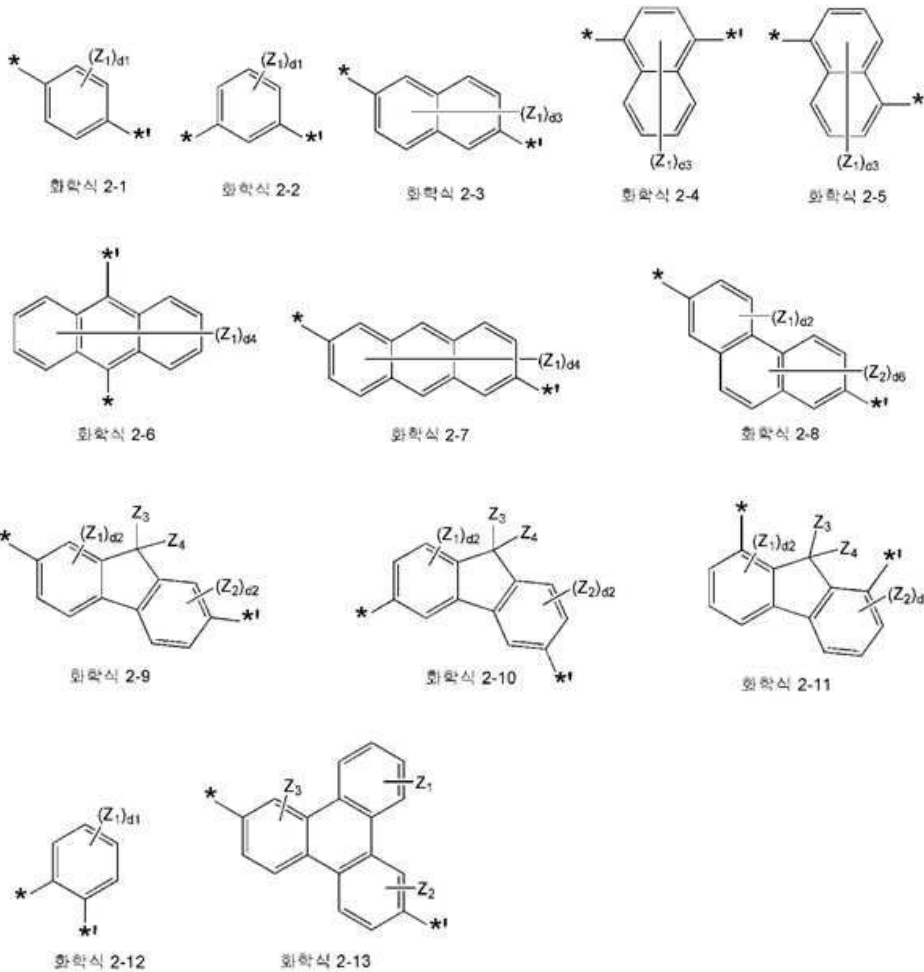
[0074] 예를 들어, 상기 화학식들 중 L_1 내지 L_4 , L_{11} 및 L_{12} 는 서로 독립적으로,

[0075] 페닐렌기(phenylene), 펜탈레닐렌기(pentalenylene), 인덴일렌기(indenylene), 나프틸렌기(naphthalenylene), 아줄레닐렌기(azulenylene), 헵탈레닐렌기(heptalenylene), 인다세닐렌기(indacenylene), 아세나프틸렌기(acenaphthalenylene), 플루오레닐렌기(fluorenylene), 스퀴아로-플루오레닐렌기, 페날레닐렌기(phenalenylene), 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 안트라세닐렌기(anthracenylene), 플루오란트레닐렌기(fluoranthrenylene), 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 파이레닐렌기(pyrenylene), 크라이세닐렌기(chrysenylene), 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 피세닐렌기(picenylene), 페릴레닐렌기(perylenylene), 펜타페닐렌기(pentaphenylene), 헥사세닐렌기(hexacenylene), 피롤일렌기(pyrrolylene), 이미다졸일렌기(imidazolylene), 피라졸일렌기(pyrazolylene), 피리디닐렌기(pyridinylene), 피라지닐렌기(pyrazinylene), 피리미디닐렌기(pyrimidinylene), 피리다지닐렌기(pyridazinylene), 이소인돌일렌기(isoindolylene), 인돌일렌기(indolylene), 인다졸일렌기(indazolylene), 푸리닐렌기(purinylene), 퀴놀리닐렌기(quinolinylenylene), 이소퀴놀리닐렌기(isoquinolinylenylene), 벤조퀴놀리닐렌기(benzoquinolinylenylene), 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 나프티리디닐렌기(naphthyridinylene), 퀴녹살리닐렌기(quinoxalinylenylene), 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylenylene), 시놀리닐렌기(cinnolinylenylene), 카바졸일렌기(carbazolylene), 페난트리디닐렌기(phenanthridinylene), 아크리디닐렌기(acridinylene), 페난트롤리닐렌기(phenanthrolinylenylene), 페나지닐렌기(phenazinylene), 벤조옥사졸일렌기(benzooxazolylene), 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 푸라닐렌기(furanylene), 벤조푸라닐렌기(benzofuranylene), 티오펜일렌기(thiophenylene), 벤조티오펜일렌기(benzothiophenylene), 티아졸일렌기(thiazolylene), 이소티아졸일렌기(isothiazolylene), 벤조티아졸일렌기(benzothiazolylene), 이소옥사졸일렌기(isoxazolylene), 옥사졸일렌기(oxazolylene), 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기(oxadiazolylene), 트리아지닐렌기(triazinylene), 디벤조푸라닐렌기(dibenzofuranylene), 디벤조티오펜일렌기(dibenzothiophenylene), 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 이미다조피리미디닐렌기(imidazopyrimidinylene) 또는 이미다조피리디닐렌기(imidazopyridinylene); 또는

[0076] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅) 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈렌렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아졸렌렌기, 헵탈렌렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 페날렌렌기, 페난트렌렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란트렌렌기, 트리페닐렌렌기, 파이렌렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴렌렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 피롤일렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 이소인돌일렌기, 인돌일렌기, 인다졸일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 카바졸일렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조옥사졸일렌기, 벤조이미다졸일렌기, 푸라닐렌기, 벤조푸라닐렌기, 티오펜일렌기, 벤조티오펜일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 벤조티아졸일렌기, 이소옥사졸일렌기, 옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 트리아지닐렌기, 디벤조푸라닐렌기, 디벤조티오펜일렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기 이미다조피리미디닐렌기 또는 이미다조피리디닐렌기; 이고,

[0077] Q₃₃ 내지 Q₃₅는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이렌기, 페난트렌기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기 또는 퀴나졸리닐기일 수 있다.

[0078] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식들 중 L₁ 내지 L₄, L₁₁ 및 L₁₂는 서로 독립적으로, 화학식 2-1 내지 2-13 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0080]

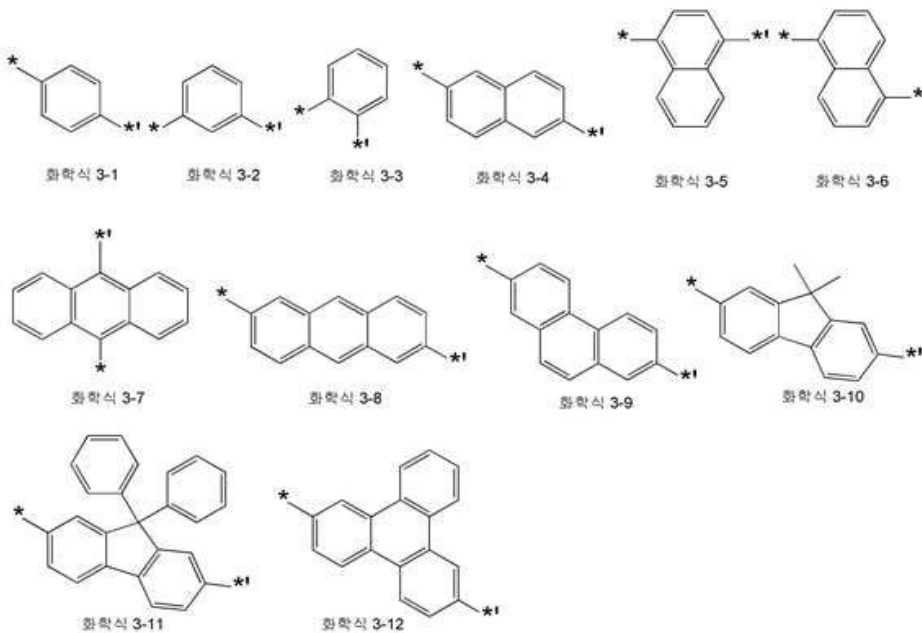
[0081] 상기 화학식 2-1 내지 2-13 중,

[0082] Z₁ 내지 Z₄는 서로 독립적으로, 수소, 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, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 비페닐기 또는 -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅)이고;

[0083] 상기 Q₃₃ 내지 Q₃₅는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 퀴녹살리닐기이고;

[0084] d₁은 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, d₂는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, d₃는 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, d₄는 1 내지 8의 정수 중에서 선택되고, d₆는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고, * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트일 수 있다.

[0085] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식들 중 L₁ 내지 L₄, L₁₁ 및 L₁₂는 서로 독립적으로 하기 화학식 3-1 내지 3-12 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0086] 상기 화학식 2A 내지 2F 중 a₁은 L₁의 개수를 나타낸 것으로서, 0 내지 3의 정수 중에서 선택된다. 예를 들어, a₁은 0 또는 1일 수 있다. a₁이 0일 경우, R₁은 N에 직접 연결된다. a₁이 2 이상일 경우, 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. a₂ 내지 a₄, a₁₁ 및 a₁₂에 대한 설명은 a₁에 대한 설명 및 화학식 1 및 화학식 2A 내지 2F에 대한 설명을 참조한다.

[0088] 일 구현예에 따르면, a₁ 내지 a₄, a₁₁ 및 a₁₂는 서로 독립적으로, 0 또는 1일 수 있다.

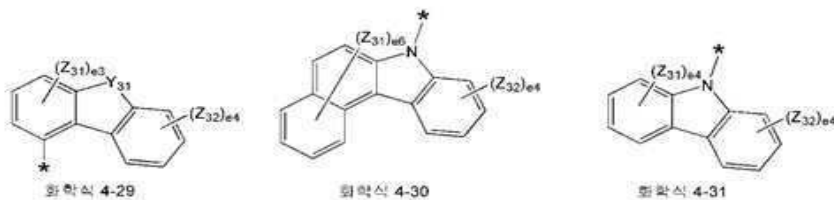
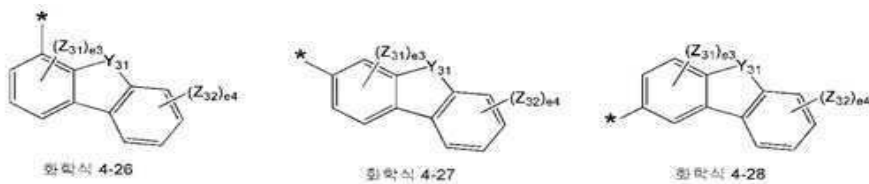
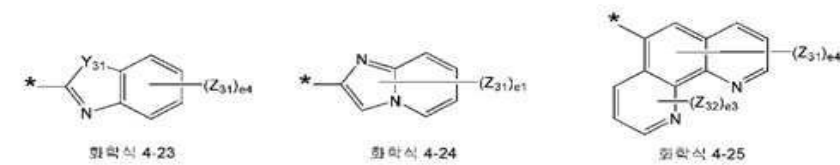
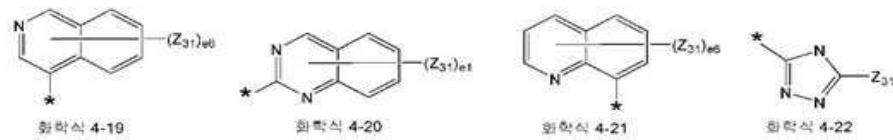
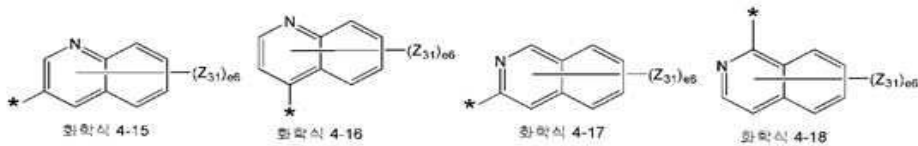
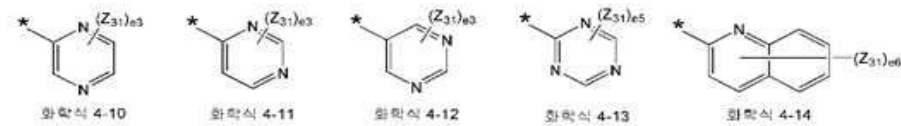
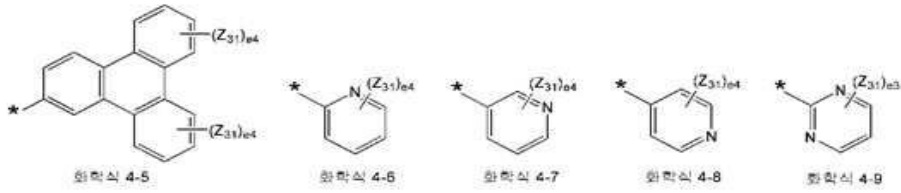
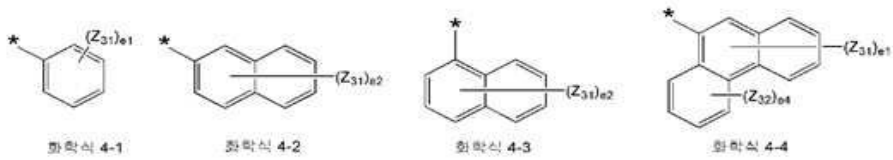
[0089] 상기 화학식들 중 R₁ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₆ 및 R₂₁ 내지 R₃₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F(플루오로기), -Cl(클로로기), -Br(브로모기), -I(아이오도기), 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테

로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$, $-B(Q_6)(Q_7)$ 또는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중 하나이되, 상기 R_1 내지 R_6 은, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아니다.

- [0090] 일 구현예에 따르면, 상기 R_1 내지 R_6 , R_{11} 내지 R_{16} 및 R_{21} 내지 R_{30} 는 서로 독립적으로,
- [0091] 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기 또는 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0092] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 또는 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0093] 페닐기(phenyl), 펜탈레닐기(pentalenyl), 인데닐기(indenyl), 나프틸기(naphthyl), 아줄레닐기(azulenyl), 헵탈레닐기(heptalenyl), 인다세닐기(indacenyl), 아세나프틸기(acenaphthyl), 플루오레닐기(fluorenyl), 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기(phenalenyl), 페난트레닐기(phenanthrenyl), 안트라세닐기(anthracenyl), 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 파이레닐기(pyrenyl), 크라이세닐기(chrysenyl), 나프타세닐기(naphthacenyl), 피세닐기(picenyl), 페릴레닐기(perylene), 펜타페닐기(pentaphenyl), 헥사세닐기(hexacenyl), 펜타세닐기(pentacenyl), 루비세닐기(rubicenyl), 코로네닐기(coronenyl), 오발레닐기(ovalenyl), 피롤일기(pyrrolyl), 티오펜일기(thiophenyl), 퓨라닐기(furanyl), 이미다졸일기(imidazolyl), 피라졸일기(pyrazolyl), 티아졸일기(thiazolyl), 이소티아졸일기(isothiazolyl), 옥사졸일기(oxazolyl), 이속사졸일기(isooxazolyl), 피리디닐기(pyridinyl), 피라지닐기(pyrazinyl), 피리미디닐기(pyrimidinyl), 피리다지닐기(pyridazinyl), 이소인돌일기(isoindolyl), 인돌일기(indolyl), 인다졸일기(indazolyl), 푸리닐기(purinyl), 퀴놀리닐기(quinolinyl), 이소퀴놀리닐기(isoquinolinyl), 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 프탈라지닐기(phthalazinyl), 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐기(quinoxalinyl), 퀴나졸리닐기(quinazolinyl), 시놀리닐기(cinnolinyl), 카바졸일기(carbazolyl), 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 아크리디닐기(acridinyl), 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 페나지닐기(phenazinyl), 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 벤조퓨라닐기(benzofuranyl), 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 이소벤조티아졸일기(isobenzothiazolyl), 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 이소벤조옥사졸일기(isobenzooxazolyl), 트리아졸일기(triazolyl), 테트라졸일기(tetrazolyl), 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 트리아지닐기(triazinyl), 디벤조퓨라닐기(dibenzofuranyl), 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl), 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기;
- [0094] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 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, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 비페닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 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, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐;

- [0095] -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) (단, 상기 R₁₃ 내지 R₁₆ 및 R₅ 및 R₆은 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)가 아님); 또는
- [0096] 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 (단, 상기 R₁ 내지 R₆는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아님) 중 하나; 이고;
- [0097] 상기 Q₁ 내지 Q₇ 및 Q₃₃ 내지 Q₃₅는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 과이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 퀴녹살리닐기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0098] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식들 중 R₁ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₆ 및 R₂₁ 내지 R₃₀이 서로 독립적으로,
- [0099] 수소, 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 또는 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0100] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0101] 하기 화학식 4-1 내지 4-31 중 하나;
- [0102] -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) (단, 상기 R₁₃ 내지 R₁₆ 및 R₅ 내지 R₆은 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)가 아님); 또는
- [0103] 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹(단, R₁ 내지 R₆는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아님) 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다;



[0104]

[0105]

[0106]

[0107]

[0108]

화학식 4-1 내지 4-31 중,

Y_{31} 은 O, S, $C(Z_{33})(Z_{34})$, $N(Z_{35})$ 또는 $Si(Z_{36})(Z_{37})$ 이고 (단, 화학식 4-23 중 Y_{31} 은 NH가 아님);

Z_{31} 내지 Z_{37} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 페난스레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기,

피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 비페닐기 또는 -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅)이고;

[0109] 상기 Q₃ 내지 Q₅ 및 Q₃₃ 내지 Q₃₅는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 퀴녹살리닐기이고;

[0110] e₁은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고, e₂는 1 내지 7의 정수 중에서 선택되고, e₃는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, e₄는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, e₅는 1 또는 2이고, e₆은 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0111] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식들 중 R₁ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₆ 및 R₂₁ 내지 R₃₀은 서로 독립적으로,

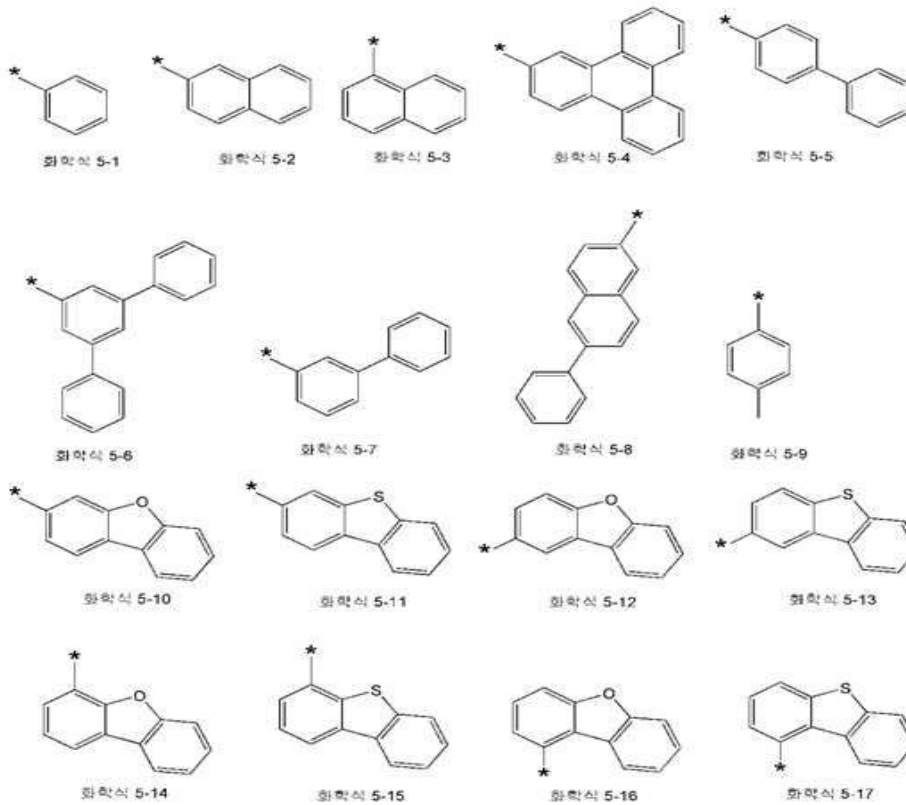
[0112] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;

[0113] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;

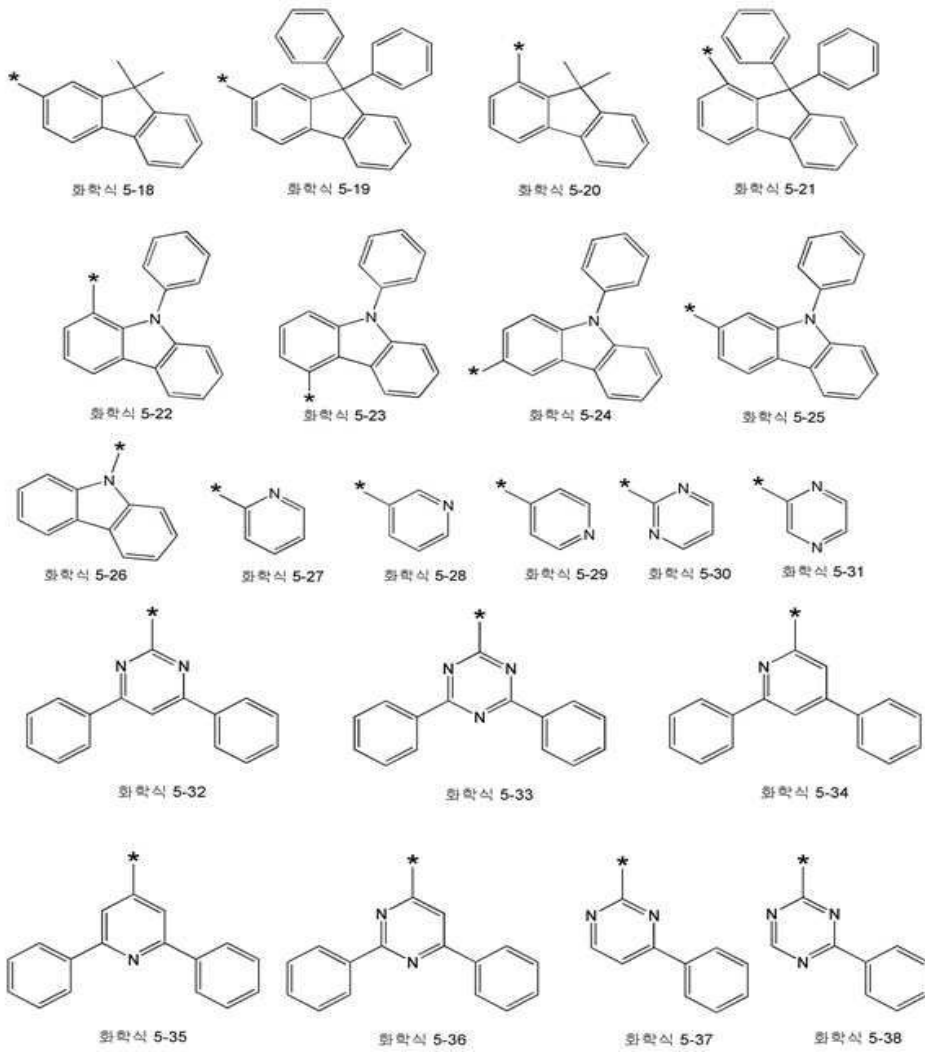
[0114] 하기 화학식 5-1 내지 5-63 중 하나;

[0115] -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) (단, 상기 R₁₃ 내지 R₁₆, R₅ 및 R₆은 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)가 아님); 또는

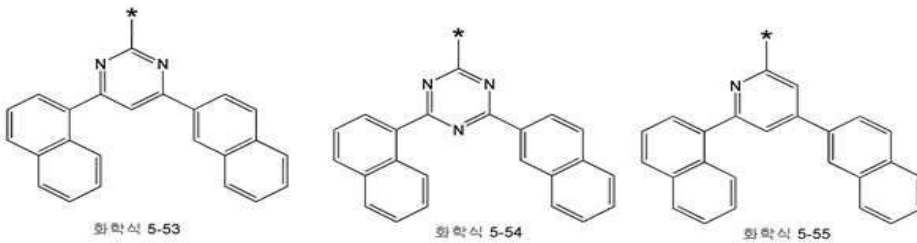
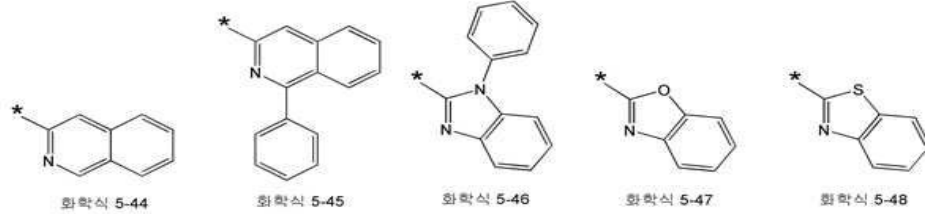
[0116] 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 (단, 상기 R₁ 내지 R₆는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아님) 중 하나; 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



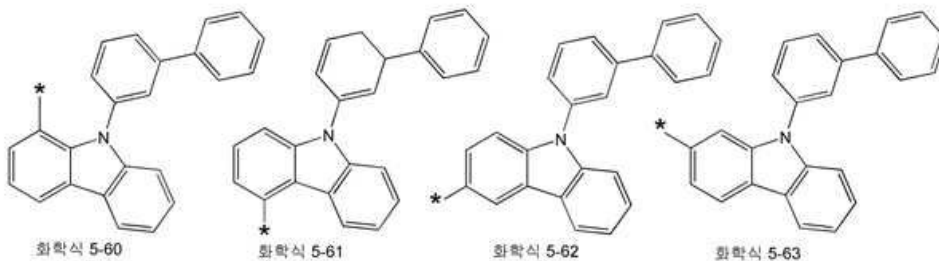
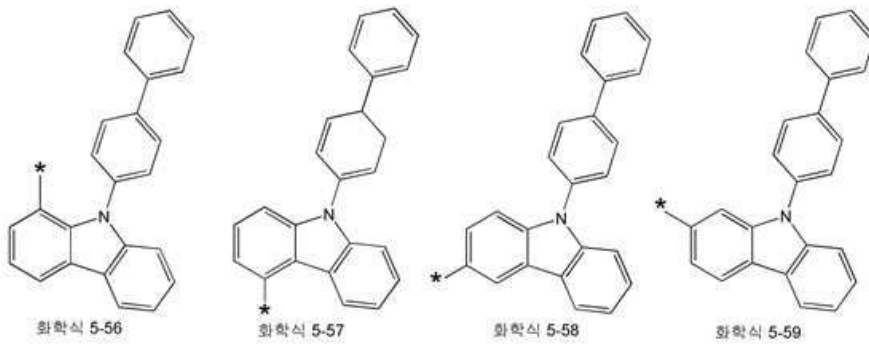
[0117]



[0118]



[0119]



[0120]

[0121]

한편, 상기 화학식 2A 및 2B의 R₂, 상기 화학식 2C 및 2D의 R₃ 및 상기 화학식 2E 및 2F의 R₂ 및 R₃ 중 적어도 하나는,

[0122]

페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기,

헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기; 또는

[0123] 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, -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), 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, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 비페닐 중 적어도 하나로 치환된, 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, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기; 이고,

[0124] 상기 Q₃₃ 내지 Q₃₅는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 퀴녹살리닐기일 수 있다.

[0125] 예를 들어, 상기 화학식 2A 및 2B의 R₂, 상기 화학식 2C 및 2D의 R₃ 및 상기 화학식 2E 및 2F의 R₂ 및 R₃ 중 적어도 하나는,

[0126] 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 또는 트리아지닐기; 또는

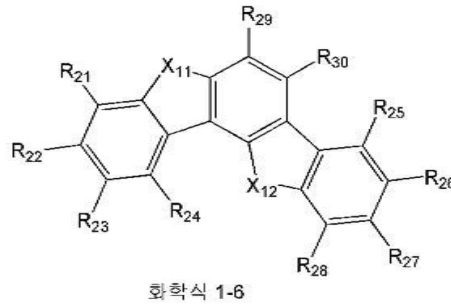
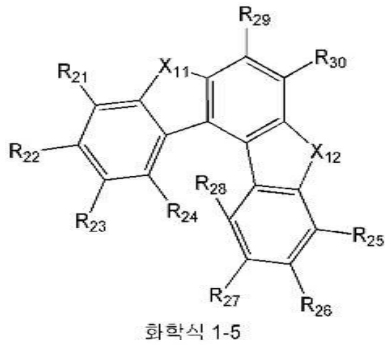
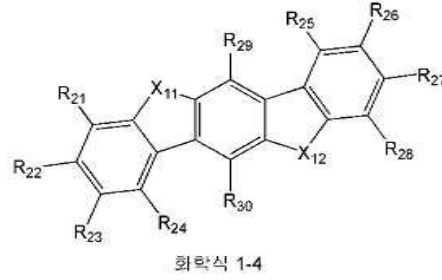
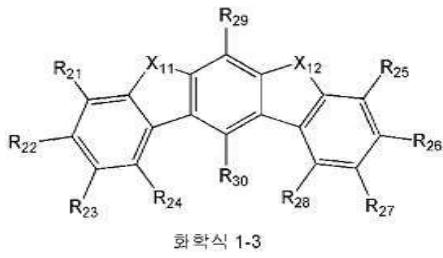
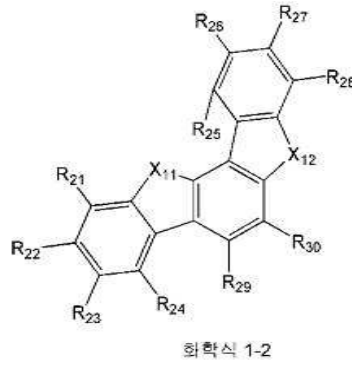
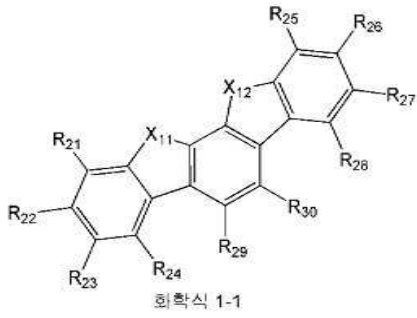
[0127] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 또는 트리아지닐기; 이고,

[0128] 상기 Q₃₃ 내지 Q₃₅는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기 또는 나프틸기이다.

[0129] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B의 R₂, 상기 화학식 2C 및 2D의 R₃ 및 상기 화학식 2E 및 2F의

R_2 및 R_3 중 적어도 하나는, 상기 화학식 5-1 내지 5-63 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0130] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 내지 2F의 X_1 중 R_1 , 화학식 1의 X_{11} 중 R_{11} 및 화학식 1B의 X_{12} 중 R_{12} 는 서로 독립적으로, 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_{20} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{20} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 또는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중 하나이되, 상기 R_1 은 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아니다.
- [0131] 예를 들어, 상기 화학식 2A 내지 2F의 X_1 중 R_1 , 화학식 1의 X_{11} 중 R_{11} 및 화학식 1B의 X_{12} 중 R_{12} 는 서로 독립적으로,
- [0132] 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 또는 트리아지닐기;
- [0133] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, -Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35}), 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 또는 트리아지닐기; 또는
- [0134] 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중 하나; 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 여기서, 상기 R_1 은 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아니다.
- [0135] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 내지 2F 중 R_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기 또는 C_1 - C_{20} 알콕시기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0136] 상기 화학식들 중 b_1 은 R_1 의 개수를 나타낸 것으로서, 1 내지 3의 정수 중에서 선택될 수 있다. b_1 이 2 이상일 경우, 2 이상의 R_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. b_2 내지 b_4 , b_{11} 및 b_{12} 에 대한 설명은 b_1 에 대한 설명 및 화학식 1 및 화학식 2A 내지 2F의 구조를 참조한다.
- [0137] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은, 하기 화학식 1-1 내지 1-6 중 하나로 표시될 수 있다:



[0138]

[0139]

[0140]

[0141]

[0142]

[0143]

[0144]

[0145]

[0146]

[0147]

[0148]

상기 화학식 1-1 내지 1-6 중 X₁₁, X₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바와 동일하다.

예를 들어, 상기 화학식 1-1 내지 1-6 중,

X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}], S 또는 O이고;

X₁₂는 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}], S 또는 O이고;

X₁은 N-[(L₁)_{a1}-(R₁)_{b1}], S 또는 O이고;

i) 상기 화학식 1-1 내지 1-6 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, X₁₂는 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]이 아닐 경우, 상기 화학식 1 중 b₁₁개의 R₁₁ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

ii) 상기 화학식 1-1 내지 1-6 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]가 아니고, X₁₂는 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]일 경우, 상기 화학식 1 중 b₁₂개의 R₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

iii) 상기 화학식 1-1 내지 1-6 중 X₁₁은 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, X₁₂는 N-[(L₁₂)_{a12}-(R₁₂)_{b12}]일 경우, 상기 화학식 1 중 b₁₁개의 R₁₁, b₁₂개의 R₁₂ 및 R₂₁ 내지 R₃₀ 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

상기 L₁ 내지 L₄, L₁₁ 및 L₁₂는 서로 독립적으로 상기 화학식 2-1 내지 2-13 (예를 들면, 상기 화학식 3-1 내지

3-12) 중에서 선택되고;

- [0149] 상기 a1 내지 a4, a11 및 a12는 서로 독립적으로 0 또는 1이고;
- [0150] 상기 R₁, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로,
- [0151] 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 또는 트리아지닐기;
- [0152] 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, -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 또는 트리아지닐기; 또는
- [0153] 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 중 하나; 이고 (단, R₁은 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아님);
- [0154] 상기 R₂ 및 R₃ 중 적어도 하나는,
- [0155] 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 또는 트리아지닐기; 또는
- [0156] 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, -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 트리페닐레닐기, 페난쓰레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기 또는 트리아지닐기; 이고;
- [0157] 상기 R₄는 수소, 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 또는 C₁-C₂₀알콕시기이고;
- [0158] R₂₁ 내지 R₃₀은 서로 독립적으로,
- [0159] 수소, 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 또는 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0160] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0161] 상기 화학식 4-1 내지 4-31 중 하나 (예를 들면, 상기 화학식 5-1 내지 5-63 중 하나);
- [0162] -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) ; 또는
- [0163] 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹 (단, 상기 R₁ 내지 R₆는 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 상기 화학식 2F로 표시되는 그룹이 아님) 중 하나; 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0164] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은,
- [0165] i) 상기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시되고, 화학식 1-1 및 1-2 중 R₂₁이 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택되거나,
- [0166] ii) 상기 화학식 1-1 또는 1-6로 표시되고, 화학식 1-1 및 1-6 중 X₁₁이 N-[(L₁₁)_{a11}-(R₁₁)_{b11}]이고, R₁₁이

상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 화학식 2F로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0167]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 축합환 화합물은,

[0168]

i) 상기 화학식 1 중 X_{11} 은 $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ 이고, X_{12} 은 $N-[(L_{12})_{a12}-(R_{12})_{b12}]$ 이 아닐 경우, 상기 화학식 1 중 b_{11} 개의 R_{11} 및 R_{21} 내지 R_{30} 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2D로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 2F-1로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

[0169]

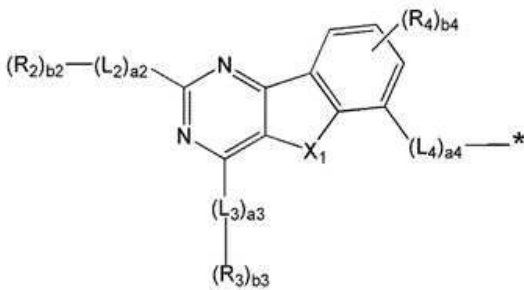
ii) 상기 화학식 1 중 X_{11} 은 $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ 가 아니고, X_{12} 은 $N-[(L_{12})_{a12}-(R_{12})_{b12}]$ 일 경우, 상기 화학식 1 중 b_{12} 개의 R_{12} 및 R_{21} 내지 R_{30} 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2D로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 2F-1로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

[0170]

iii) 상기 화학식 1 중 X_{11} 은 $N-[(L_{11})_{a11}-(R_{11})_{b11}]$ 이고, X_{12} 은 $N-[(L_{12})_{a12}-(R_{12})_{b12}]$ 일 경우, 상기 화학식 1 중 b_{11} 개의 R_{11} , b_{12} 개의 R_{12} 및 R_{21} 내지 R_{30} 중 적어도 하나는, 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2B로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2D로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 2F-1로 표시되는 그룹 중에서 선택되는, 축합환 화합물일 수 있다:

[0171]

<화학식 2F-1>

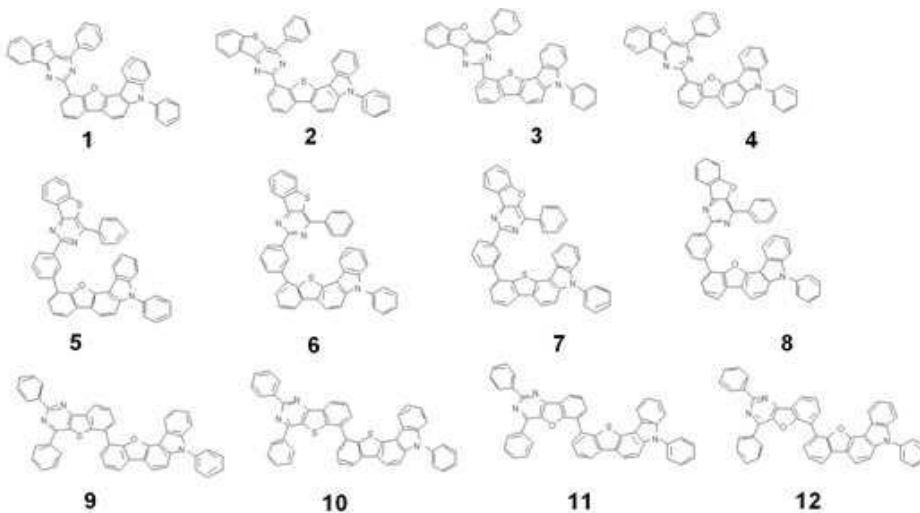


[0172]

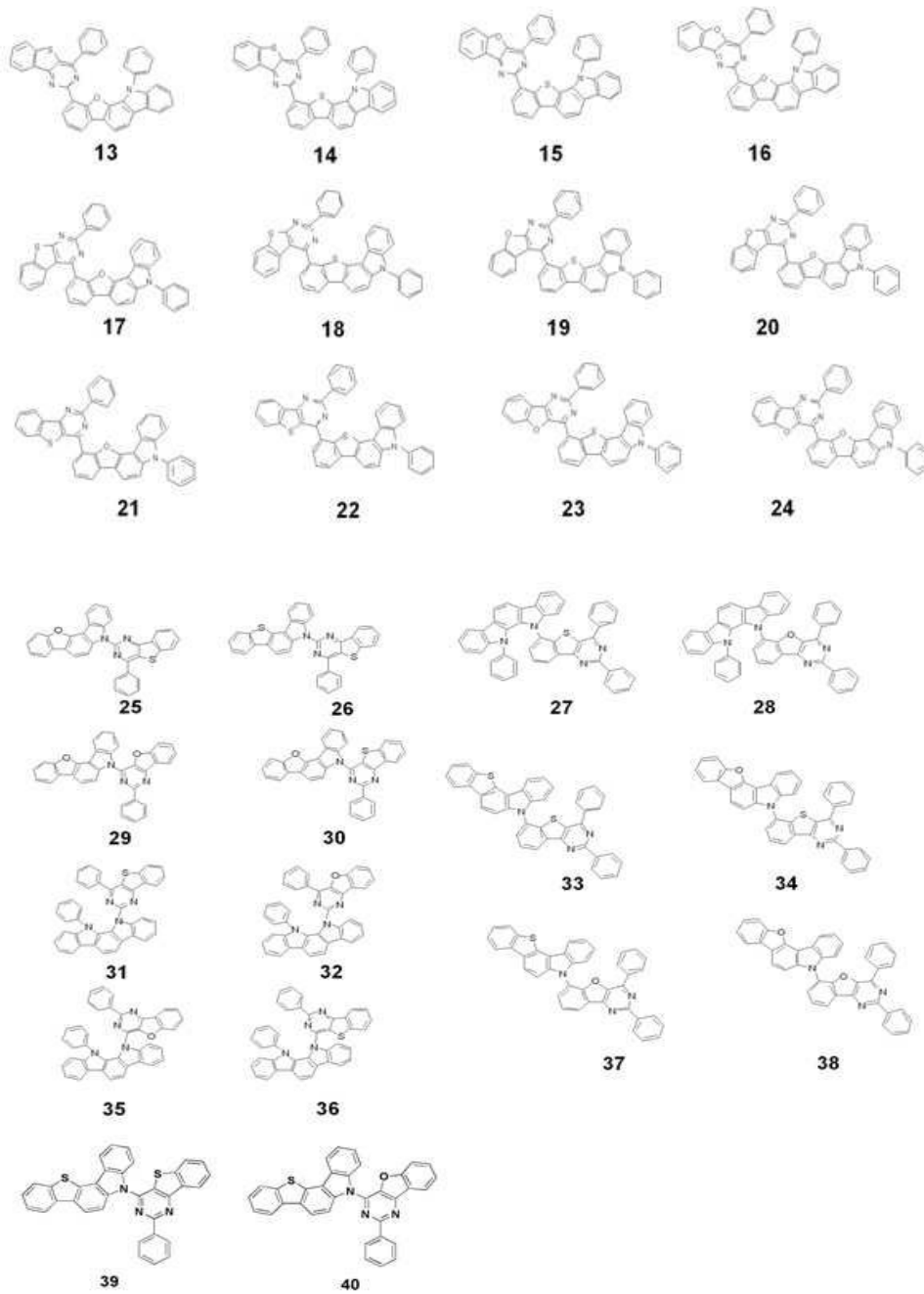
상기 화학식 2F-1에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 화학식 2F에 대한 설명을 참조한다.

[0174]

상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은, 하기 화합물 1 내지 40 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0175]



[0176]

[0177]

[0178]

[0179]

상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 상기 화학식 2A로 표시되는 그룹 내지 화학식 2F로 표시되는 그룹 중 적어도 하나를 반드시 포함한다. 상기 화학식 2A 내지 2F의 코어는 5원환 고리에 일측에 "피리미딘"이 융합되어 있는 바, 전자 당김 그룹인 상기 "피리미딘"에 의하여, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 전자 주입 및 전달 특성이 향상될 수 있다.

하기 표 1은 상기 화합물 1, 2, 21, 22, 25, 4, 3, 24, 23, 27, 28 및 35와 하기 화합물 A의 HOMO 에너지 레벨, LUMO 에너지 레벨 및 T1 에너지 레벨을 가우시안을 이용한 평가한 데이터다. 하기 화합물 A는, 티오펜 고리의 일측에 "피리딘"이 융합되어 있는 그룹을 갖는다.

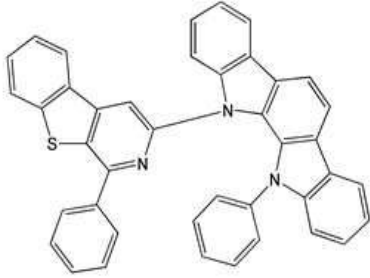
표 1

화합물 No.	HOMO(eV) (계산값)	LUMO(eV) (계산값)	T1 에너지 레벨(eV) (계산값)
화합물 1	-5.157	-1.756	2.713
화합물 2	-5.163	-1.814	2.651
화합물 21	-5.319	-1.693	2.796
화합물 22	-5.288	-1.816	2.670

[0180]

화합물 25	-5.297	-1.996	2.541
화합물 4	-5.160	-1.826	2.744
화합물 3	-5.165	-1.906	2.723
화합물 24	-5.317	-1.769	2.740
화합물 23	-5.256	-1.881	2.586
화합물 27	-5.235	-1.889	2.796
화합물 28	-5.253	-1.977	2.719
화합물 35	-5.219	-1.711	2.781
화합물 A	-5.047	-1.640	2.733

[0181] <화합물 A>

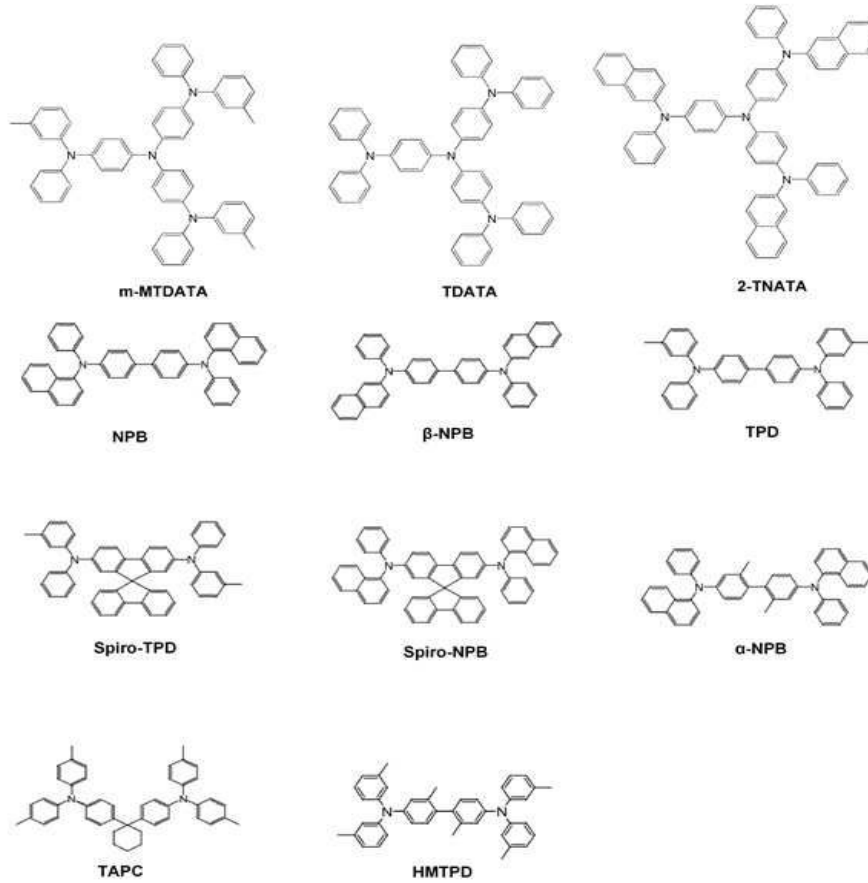


- [0182]
- [0183] 상기 표 1로부터, 상기 화합물 A의 LUMO 레벨은 화합물 1, 2, 21, 22, 25, 4, 3, 24, 23, 27, 28 및 35의 LUMO 레벨보다 높으므로 (즉, 상기 화합물 A의 LUMO 레벨 절대값은 화합물 1, 2, 21, 22, 25, 4, 3, 24, 23, 27, 28 및 35의 LUMO 레벨 절대값보다 에 비하여 작으므로), 상기 화합물 1, 2, 21, 22, 25, 4, 3, 24, 23, 27, 28 및 35과 같은 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 상기 화합물 A보다 우수한 전자 수송 특성을 가짐을 확인할 수 있다.
- [0184] 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 유기 발광 소자의 유기층 재료, 예를 들면, 유기 발광 소자의 발광층 재료(예를 들면, 유기 발광 소자의 발광층 중 호스트)로 사용할 경우, 효과적인 전하 수송 균형을 달성할 수 있어, 발광 효율이 향상된 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.
- [0185] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 용이하게 인식할 수 있다.
- [0186] 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 유기 발광 소자의 유기층, 예를 들면, 상기 유기층 중 발광층의 호스트로 사용하기 적합할 수 있는 바, 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 적어도 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0187] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함한 유기층을 구비함으로써, 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있다.
- [0188] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 축합환 화합물은 발광층, 제1전극과 발광층 사이의 정공 수송 영역(예를 들면, 정공 주입층, 정공 수송층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함함) 및 발광층과 제2전극 사이의 전자 수송 영역(예를 들면, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함함) 중 적어도 하나에 포함될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있다. 이 때, 상기 발광층은 도펀트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 축합환 화합물은 호스트의 역할을 할 수 있다. 상기 발광층은 청색광 또는 녹색광을 방출하는 청색 발광층 또는 녹색 발광층일 수 있고, 상기 도펀트는 인광 도펀트일 수 있다.
- [0189] 본 명세서 중 "(유기층이) 축합환 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 축합환 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 축합환 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0190] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 축합환 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 축합환 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화

합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재할 수 있다.

- [0191] 상기 제1전극은 정공 주입 전극인 애노드이고 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드이거나, 상기 제1전극은 전자 주입 전극인 캐소드이고 상기 제2전극은 정공 주입 전극인 애노드이다.
- [0192] 예를 들어, 상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은, i) 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되고, 정공 주입층, 정공 수송층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함한 정공 수송 영역; 및 ii) 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한 전자 수송 영역;을 포함할 수 있다.
- [0193] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"은 유기 화합물뿐만 아니라, 금속을 포함한 유기금속 착체 등도 포함할 수 있다.
- [0194] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다. 유기 발광 소자(10)는 제1전극(11), 유기층(15) 및 제2전극(19)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.
- [0195] 상기 제1전극(11) 하부 또는 제2전극(19) 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0196] 상기 제1전극(11)은 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 애노드일 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등과 같은 금속을 이용할 수 있다.
- [0197] 상기 제1전극(11)은 단일층 또는 2 이상의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0198] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.
- [0199] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.
- [0200] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.
- [0201] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층 및 버퍼층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0202] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층만을 포함하거나, 정공 수송층만을 포함할 수 있다. 또는, 상기 정공 수송 영역은, 제1전극(11)로부터 차례로 적층된, 정공 주입층/정공 수송층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 구조를 가질 수 있다.
- [0203] 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(11) 상부에 진공증착법, 스프인 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0204] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500°C, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0205] 스프인 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0206] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.
- [0207] 상기 정공 수송 영역은, 예를 들면, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, α-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-

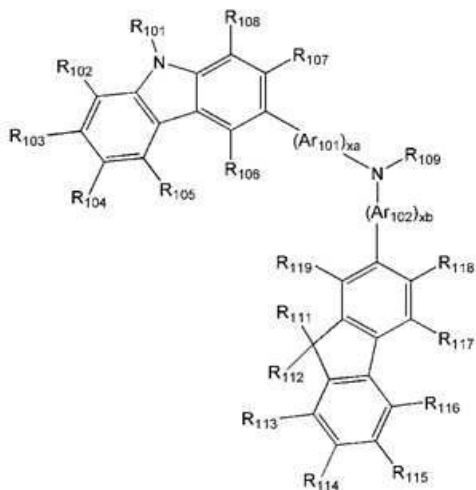
carbazolyl)triphenylamine)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠설포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid: 폴리아닐린/캄페르설포산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



[0208]

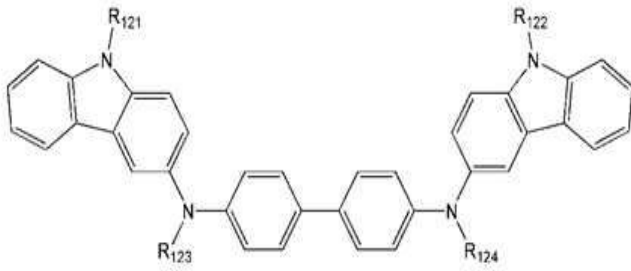
[0209]

<화학식 201>



[0210]

[0211] <화학식 202>



[0212]

[0213] 상기 화학식 201 중, Ar₁₀₁ 및 Ar₁₀₂는 서로 독립적으로,

[0214] 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인테닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 또는 펜타세닐렌기; 또는

[0215] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인테닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 또는 펜타세닐렌기; 일 수 있다.

[0216] 상기 화학식 201 중, 상기 xa 및 xb는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수, 또는 0, 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, 상기 xa는 1이고, xb는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0217] 상기 화학식 201 및 202 중, 상기 R₁₀₁ 내지 R₁₀₈, R₁₁₁ 내지 R₁₁₉ 및 R₁₂₁ 내지 R₁₂₄는 서로 독립적으로,

[0218] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등) 또는 C₁-C₁₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등);

[0219] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염 및 인산기 또는 이의 염 중 하나 이상으로 치환된, C₁-C₁₀알킬기 또는 C₁-C₁₀알콕시기;

[0220] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 또는 파이레닐기; 또는

[0221] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 또는 파이레닐기; 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

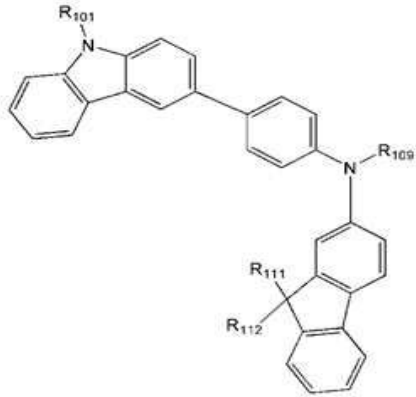
[0222] 상기 화학식 201 중, R₁₀₉는,

[0223] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 또는 피리디닐기; 또는

[0224] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 또는 피리디닐기; 일 수 있다.

[0225] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

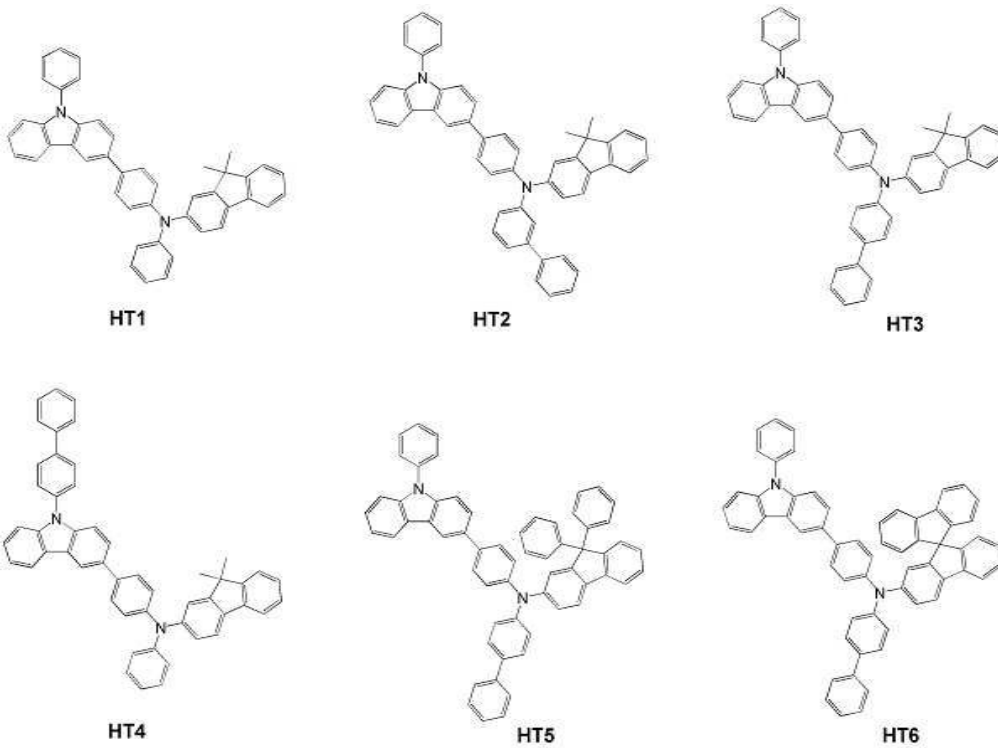
[0226] <화학식 201A>



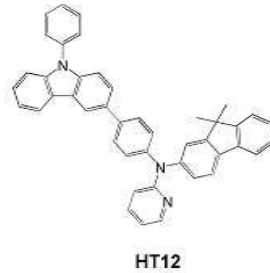
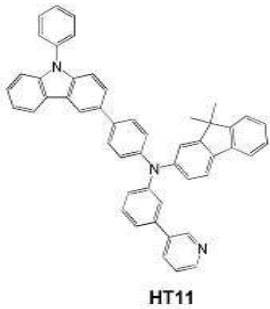
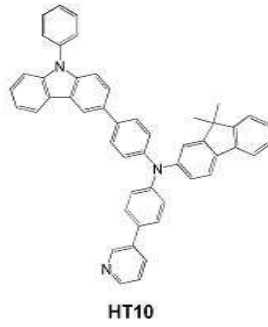
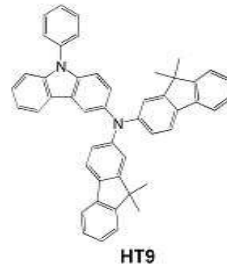
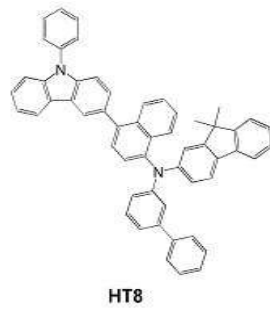
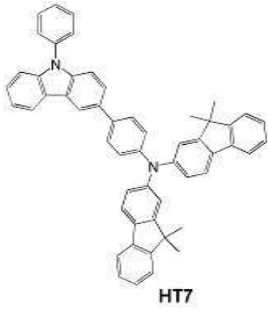
[0227]

[0228] 상기 화학식 201A 중, R₁₀₁, R₁₁₁, R₁₁₂ 및 R₁₀₉에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

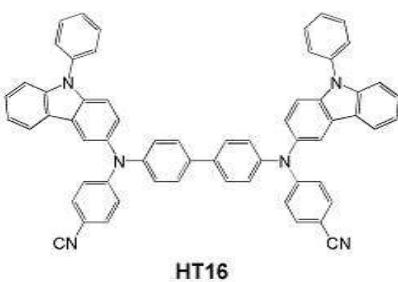
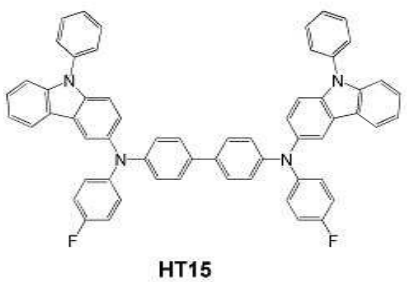
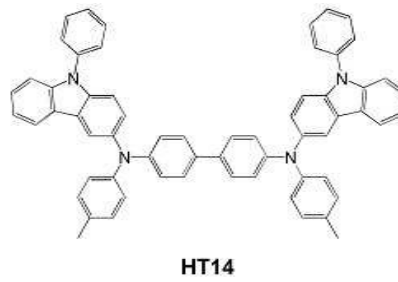
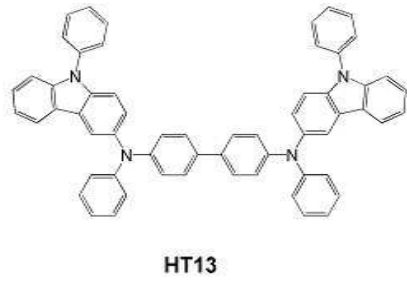
[0229] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



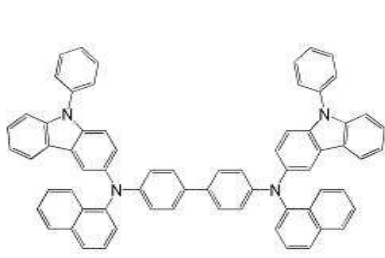
[0230]



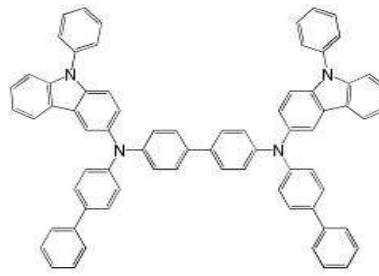
[0231]



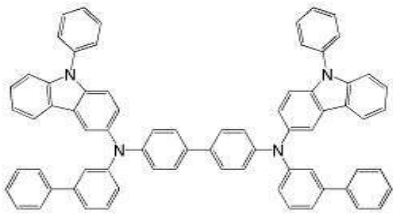
[0232]



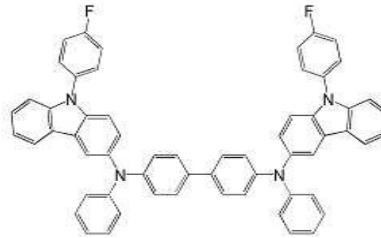
HT17



HT18



HT19



HT20

[0233]

[0234]

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

[0235]

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.

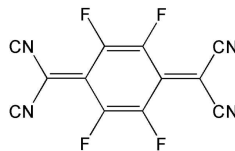
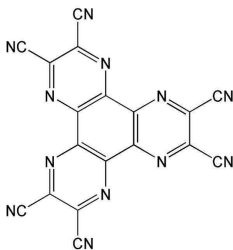
[0236]

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라시아아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 HT-D1 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0237]

<화합물 HT-D1>

<F4-TCNQ>



[0238]

[0239]

상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

[0240]

상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 수 있다.

[0241]

상기 정공 수송 영역 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택

될 수 있다.

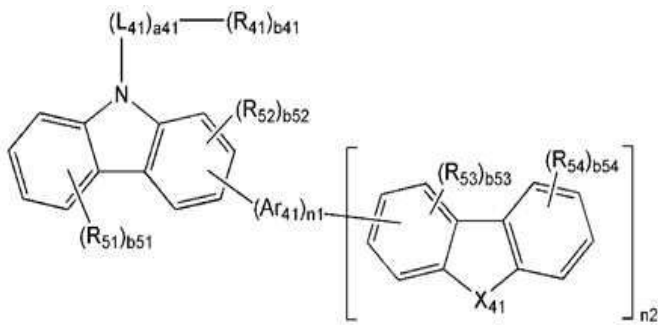
[0242] 상기 유기 발광 소자가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및/또는 청색 발광층이 적층된 구조를 가짐으로써, 백색광을 방출할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0243] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함할 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 발광층을 녹색광을 방출하는 녹색 발광층일 수 있다.

[0244] 상기 발광층 중 도펀트는 형광 방출 메커니즘에 따라 광을 방출하는 형광 도펀트로서 또는 인광 방출 메커니즘에 따라 광을 방출하는 인광 도펀트를 포함할 수 있다.

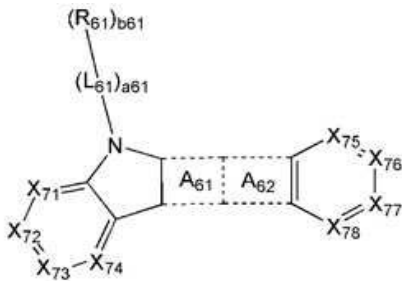
[0245] 다른 구현예에 따르면, 상기 호스트는 서로 상이한 제1호스트 및 제2호스트를 포함하되, 상기 제1호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하고, 상기 제2호스트는 하기 화학식 41로 표시되는 제1화합물 및 하기 화학식 61로 표시되는 제2화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:

[0246] <화학식 41>



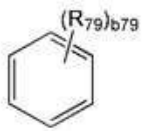
[0247]

[0248] <화학식 61>



[0249]

[0250] <화학식 61A>



<화학식 61B>



[0251]

[0252] 상기 화학식 41, 61, 61A 및 61B 중

[0253] X₄₁은 N-[(L₄₂)_{a42}-(R₄₂)_{b42}], S, O, S(=O), S(=O)₂, C(=O), C(R₄₃)(R₄₄), Si(R₄₃)(R₄₄), P(R₄₃), P(=O)(R₄₃) 또는 C=N(R₄₃)이고;

[0254] 상기 화학식 61 중 고리 A₆₁은 상기 화학식 61A로 표시되고;

[0255] 상기 화학식 61 중 고리 A₆₂는 상기 화학식 61B로 표시되고;

[0256] X₆₁은 N-[(L₆₂)_{a62}-(R₆₂)_{b62}], S, O, S(=O), S(=O)₂, C(=O), C(R₆₃)(R₆₄), Si(R₆₃)(R₆₄), P(R₆₃), P(=O)(R₆₃) 또는 C=N(R₆₃)이고;

- [0257] X_{71} 은 C(R₇₁) 또는 N이고, X_{72} 는 C(R₇₂) 또는 N이고, X_{73} 은 C(R₇₃) 또는 N이고, X_{74} 는 C(R₇₄) 또는 N이고, X_{75} 는 C(R₇₅) 또는 N이고, X_{76} 은 C(R₇₆) 또는 N이고, X_{77} 은 C(R₇₇) 또는 N이고, X_{78} 은 C(R₇₈) 또는 N이고;
- [0258] Ar₄₁, L₄₁, L₄₂, L₆₁ 및 L₆₂에 대한 설명은 본 명세서 중 L₁에 대한 설명을 참조하고;
- [0259] n₁ 및 n₂는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;
- [0260] a₄₁, a₄₂, a₆₁ 및 a₆₂는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;
- [0261] R₄₁ 내지 R₄₄, R₅₁ 내지 R₅₄, R₆₁ 내지 R₆₄ 및 R₇₁ 내지 R₇₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) 또는 -B(Q₆)(Q₇)이고;
- [0262] b₄₁, b₄₂, b₅₁ 내지 b₅₄, b₆₁, b₆₂ 및 b₇₉는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택될 수 있다.
- [0263] 상기 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0264] 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-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0265] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0266] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0267] 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-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1

가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 및 $-B(Q_{26})(Q_{27})$ 중 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_2-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_2-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_2-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

[0268] $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 또는 $-B(Q_{36})(Q_{37})$; 이고;

[0269] 상기 Q_1 내지 Q_7 , Q_{11} 내지 Q_{17} , Q_{21} 내지 Q_{27} 및 Q_{31} 내지 Q_{37} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 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_2-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_2-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_2-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

[0270] 일 구현예에 따르면, 상기 R_{41} 내지 R_{44} , R_{51} 내지 R_{54} , R_{61} 내지 R_{64} 및 R_{71} 내지 R_{79} 는 서로 독립적으로,

[0271] 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{20} 알킬기 또는 C_1-C_{20} 알콕시기;

[0272] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기 또는 C_1-C_{20} 알콕시기;

[0273] 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, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 비페닐기 중 적어도 하나로 치환된, 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, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기;

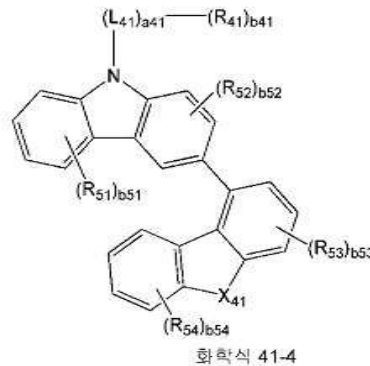
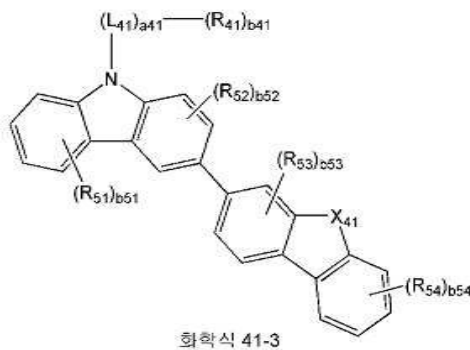
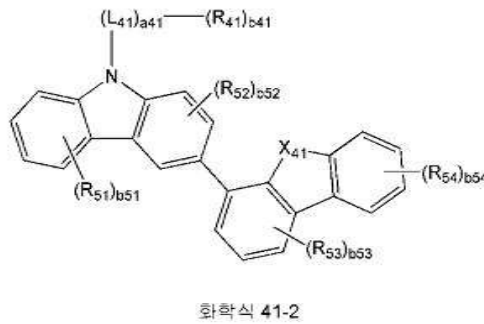
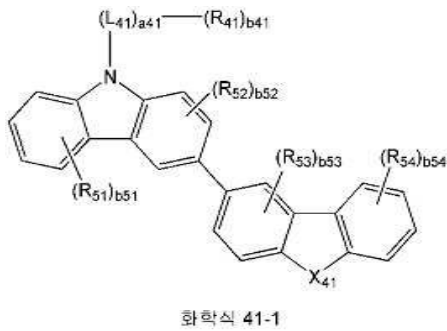
[0274] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐

기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 비페닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페달레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 핵사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기; 또는

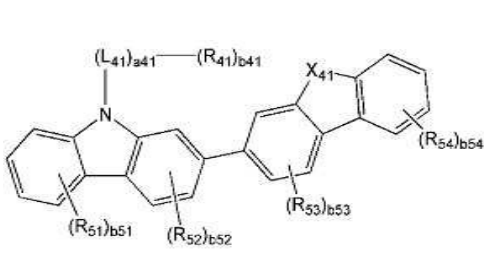
[0275] -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) (단, 상기 R₁₃ 내지 R₁₆ 및 R₅ 및 R₆은 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)가 아님); 이고;

[0276] 상기 Q₃ 내지 Q₅ 및 Q₃₃ 내지 Q₃₅는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 퀴녹살리닐기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

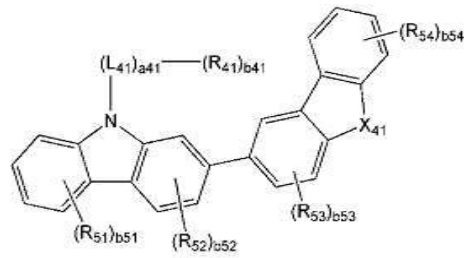
[0277] 예를 들어, 상기 상기 제1화합물은 하기 화학식 41-1 내지 41-12 중 하나로 표시되고, 상기 제2화합물은 하기 화학식 61-1 내지 61-6 중 하나로 표시될 수 있다:



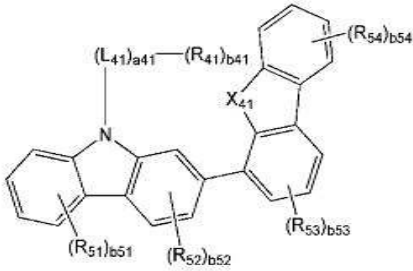
[0278]



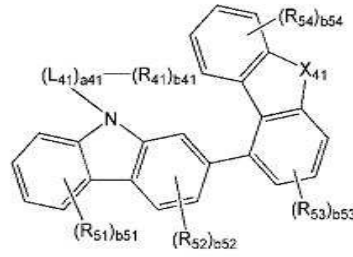
화학식 41-5



화학식 41-6

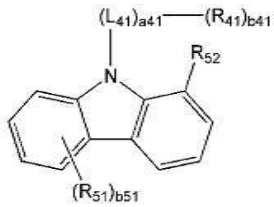


화학식 41-7

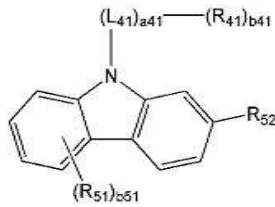


화학식 41-8

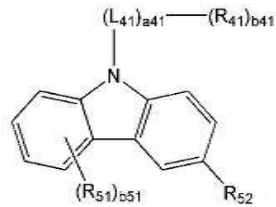
[0279]



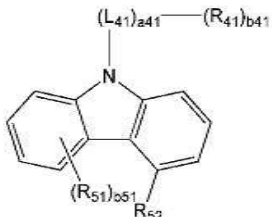
화학식 41-9



화학식 41-10

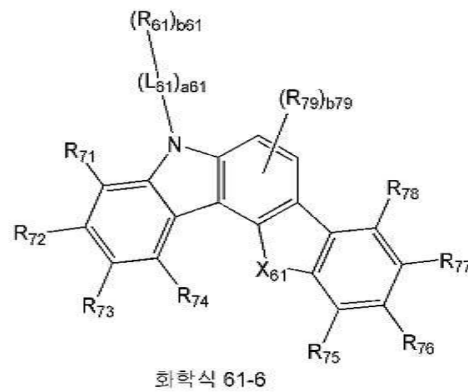
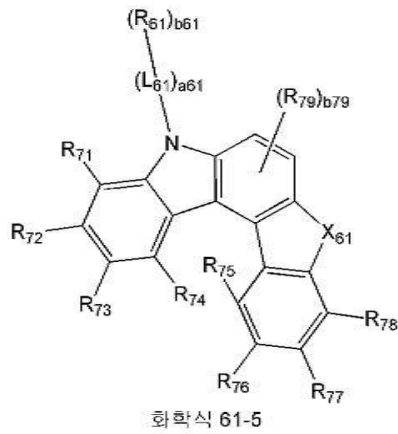
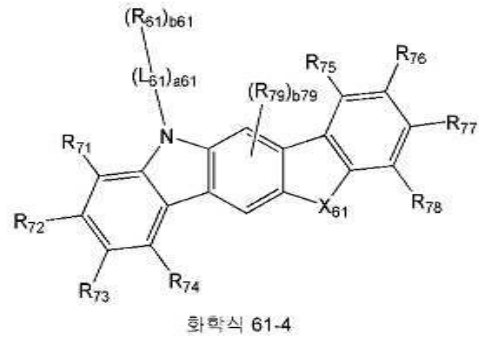
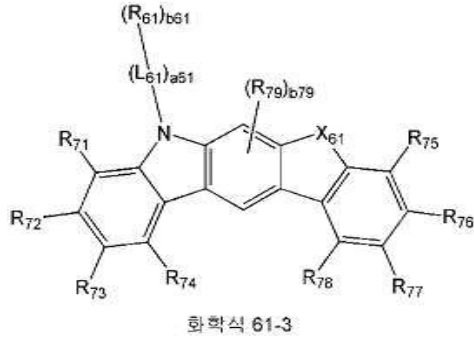
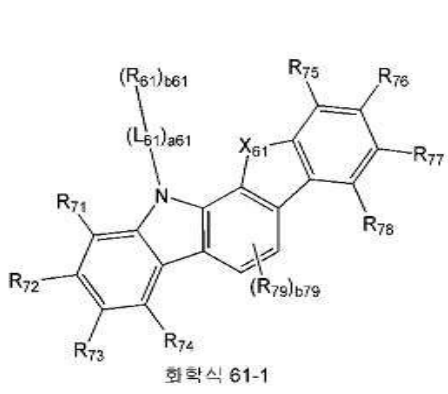


화학식 41-11



화학식 41-12

[0280]



[0281]

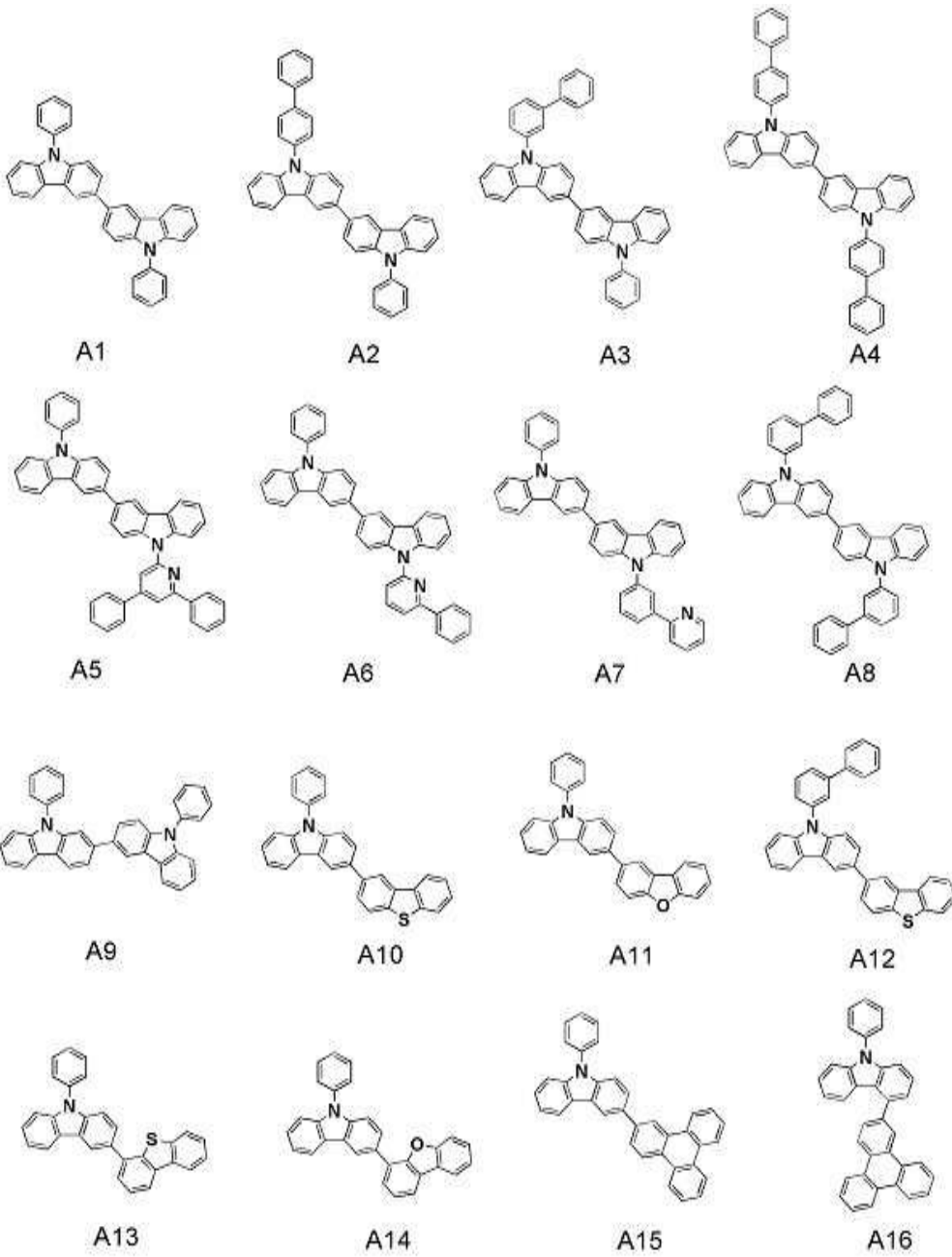
[0282]

[0283]

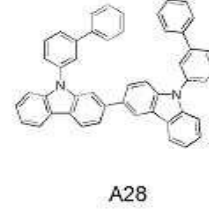
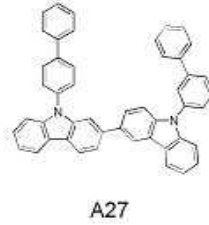
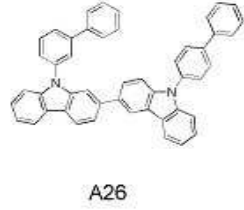
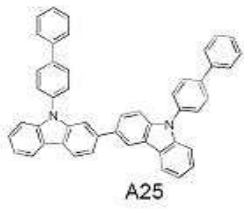
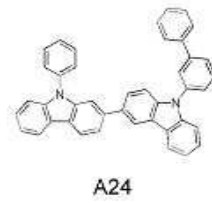
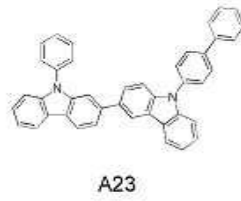
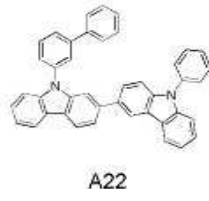
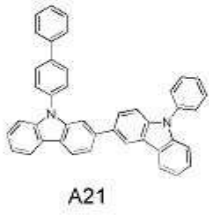
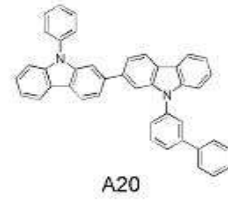
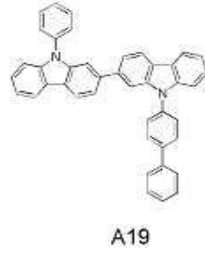
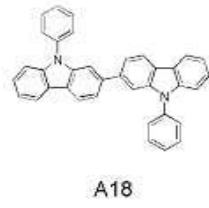
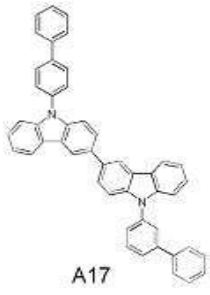
[0284]

상기 화학식 41-1 내지 41-12 및 61-1 내지 61-6 중 X₄₁, X₆₁, L₄₁, a₄₁, L₆₁, a₆₁, R₄₁, b₄₁, R₅₂ 내지 R₅₄, b₅₂ 내지 b₅₄, R₆₁, b₆₁, R₇₁ 내지 R₇₉ 및 b₇₉에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

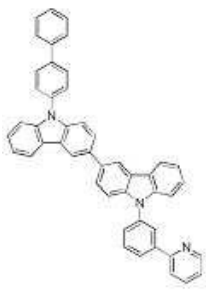
일 구현예에 따르면, 상기 화학식 41로 표시되는 제1화합물은 하기 화합물 A1 내지 A83 중 하나를 포함하고, 상기 화학식 61로 표시되는 제2화합물은 하기 화합물 B1 내지 B20 중 하나를 포함할 수 있다:



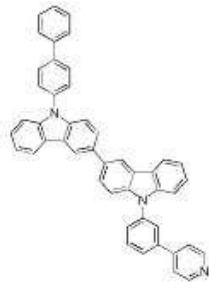
[0285]



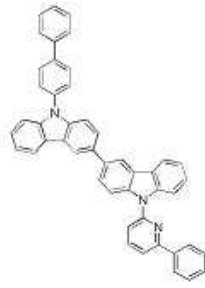
[0286]



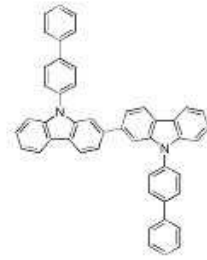
A29



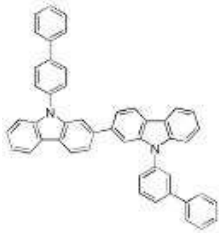
A30



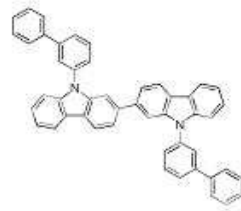
A31



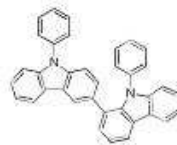
A32



A33



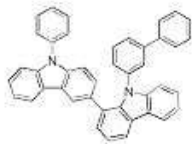
A34



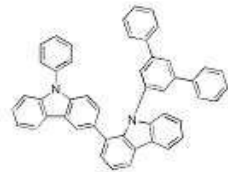
A35



A36



A37



A38

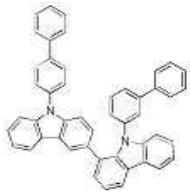


A39

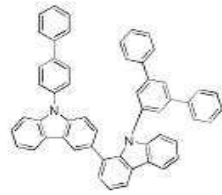


A40

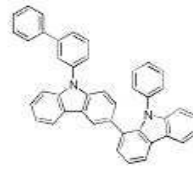
[0287]



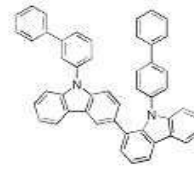
A41



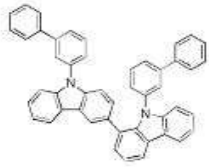
A42



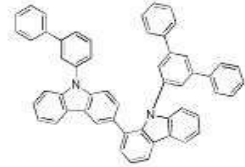
A43



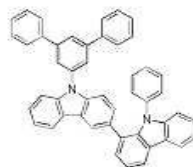
A44



A45



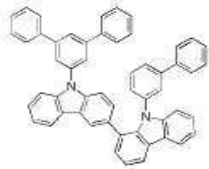
A46



A47



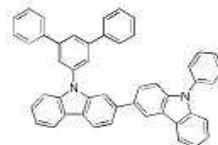
A48



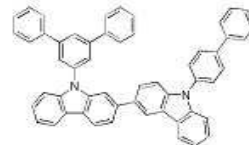
A49



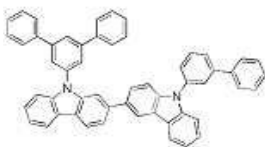
A50



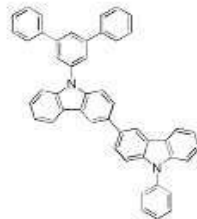
A51



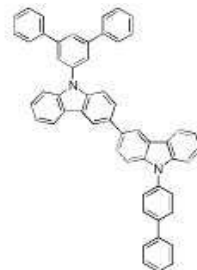
A52



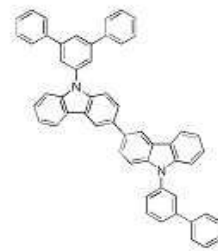
A53



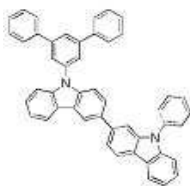
A54



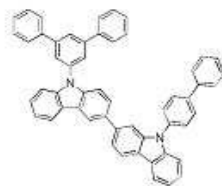
A55



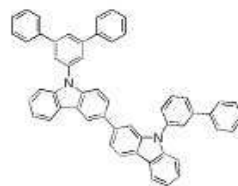
A56



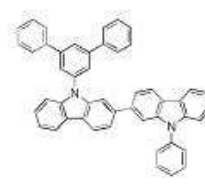
A57



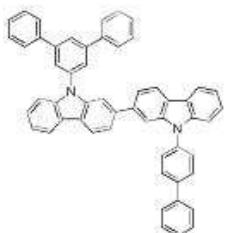
A58



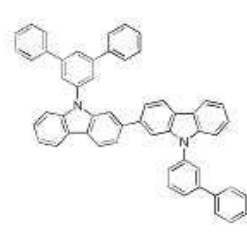
A59



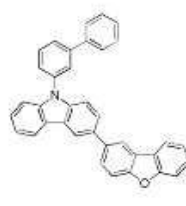
A60



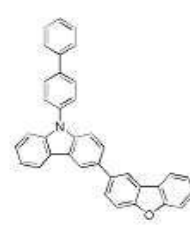
A61



A62



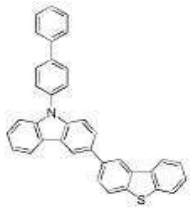
A63



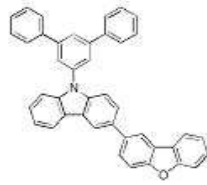
A64

[0288]

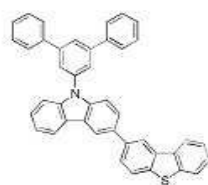
[0289]



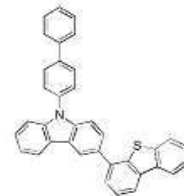
A65



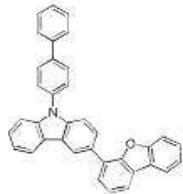
A66



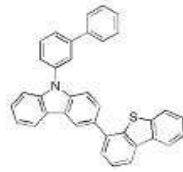
A67



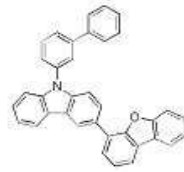
A68



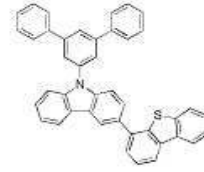
A69



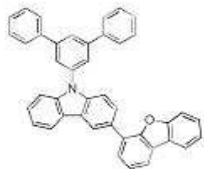
A70



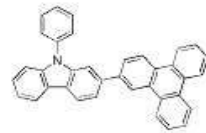
A71



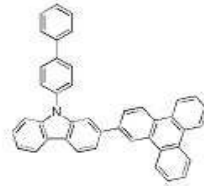
A72



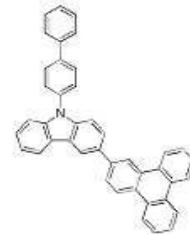
A73



A74

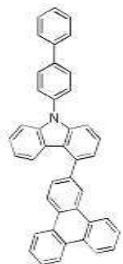


A75

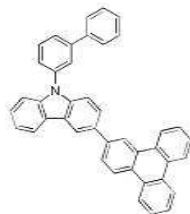


A76

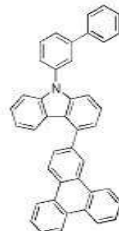
[0290]



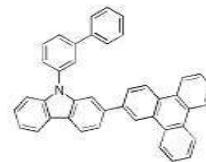
A77



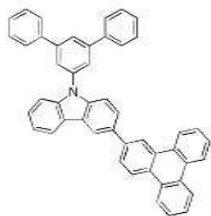
A78



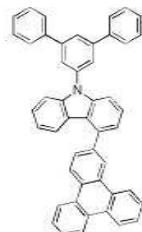
A79



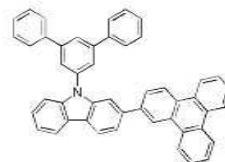
A80



A81

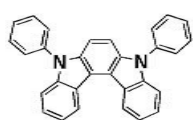


A82

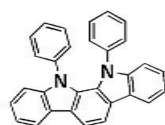


A83

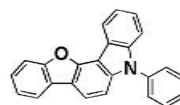
[0291]



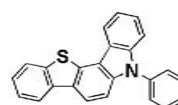
B1



B2

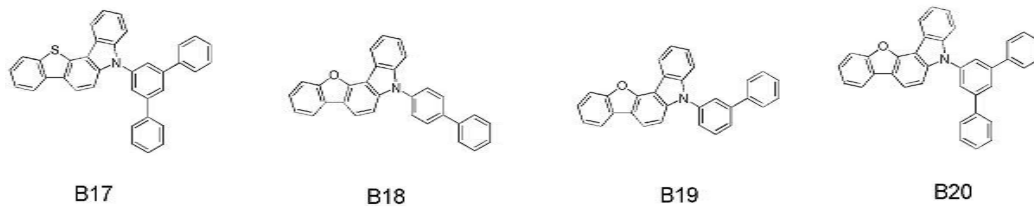
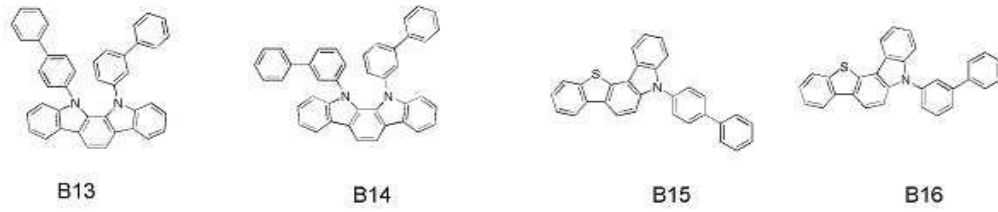
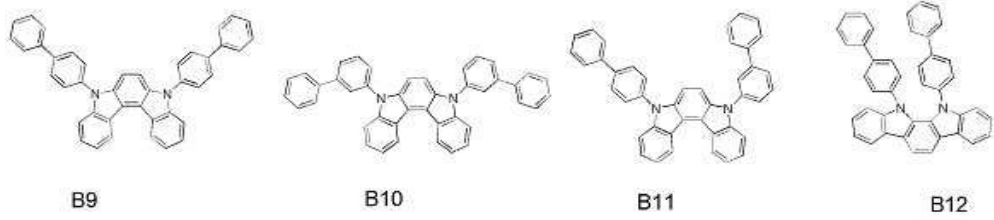
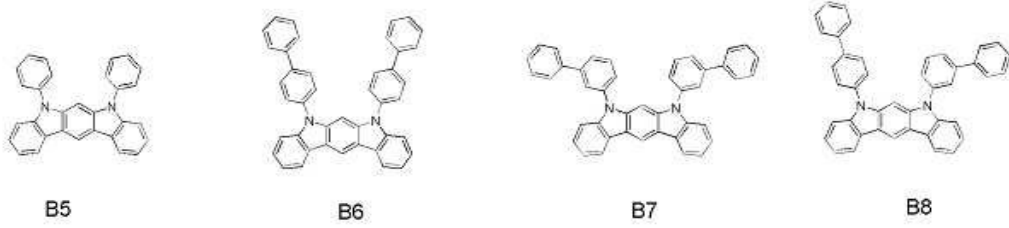


B3



B4

[0292]



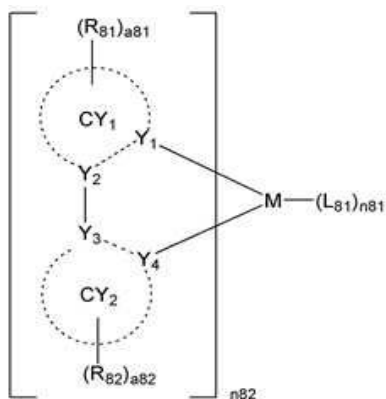
[0293]

[0294]

[0295] 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 81로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다:

[0296]

<화학식 81>



[0297]

[0298]

상기 화학식 81 중,

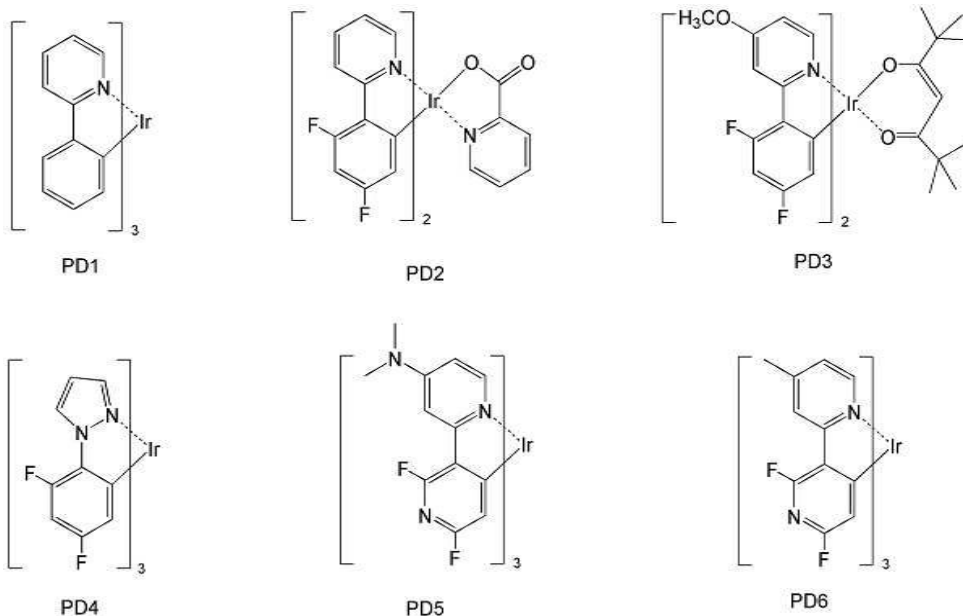
[0299]

M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 또는 툴륨(Tm)이고;

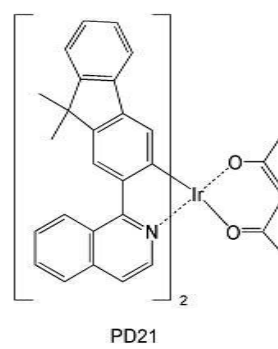
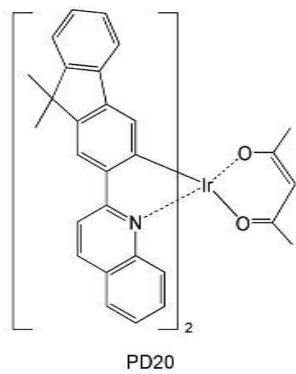
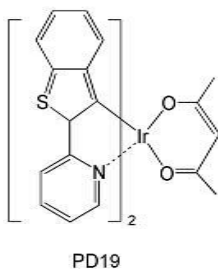
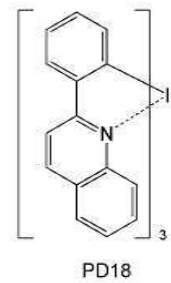
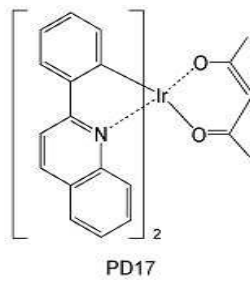
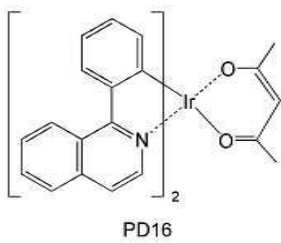
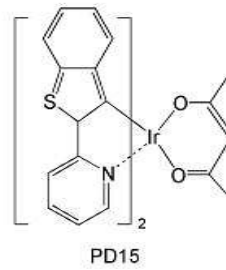
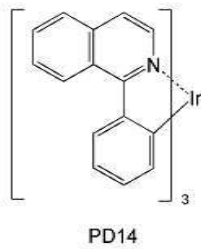
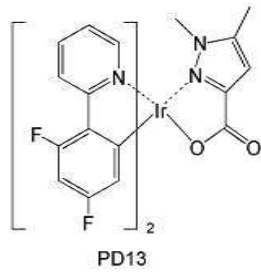
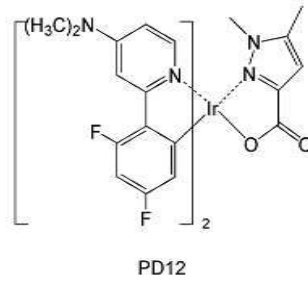
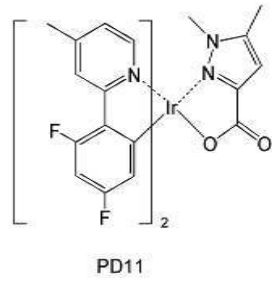
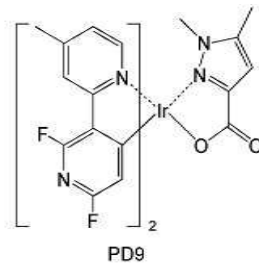
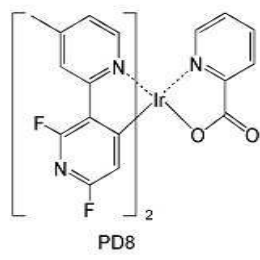
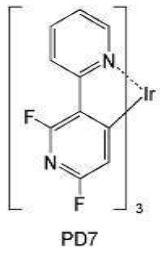
[0300]

Y₁ 내지 Y₄는 서로 독립적으로, 탄소(C) 또는 질소(N)이고;

- [0301] Y_1 과 Y_2 는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되어 있고, Y_3 와 Y_4 는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되어 있고;
- [0302] CY_1 및 CY_2 는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 플루오렌, 스파이로-플루오렌, 인텐, 피롤, 티오펜, 퓨란 (furan), 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이소옥사졸(isooxazole), 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 퀴놀살린, 퀴나졸린, 카바졸, 벤조이미다졸, 벤조퓨란 (benzofuran), 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 벤조옥사졸, 이소벤조옥사졸, 트리아졸, 테트라졸, 옥사디아졸, 트리아진, 디벤조퓨란(dibenzofuran) 또는 디벤조티오펜이고, CY_1 과 CY_2 는 선택적으로(optionally), 단일 결합 또는 유기 연결기(organic linking group)를 통하여 서로 결합되고;
- [0303] R_{81} 및 R_{82} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, -SF₅, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) 또는 -B(Q₆)(Q₇) 이고;
- [0304] a₈₁ 및 a₈₂는 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고;
- [0305] n₈₁은 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고;
- [0306] n₈₂는 1, 2 또는 3이고;
- [0307] L₈₁은 1가 유기 리간드, 2가 유기 리간드 또는 3가 유기 리간드이다.
- [0308] 상기 R₈₁ 및 R₈₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₄₁에 대한 설명을 참조한다.
- [0309] 상기 인광 도펀트는 하기 화합물 PD1 내지 PD78 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다 (하기 화합물 PD1은 Ir(ppy)₃임):



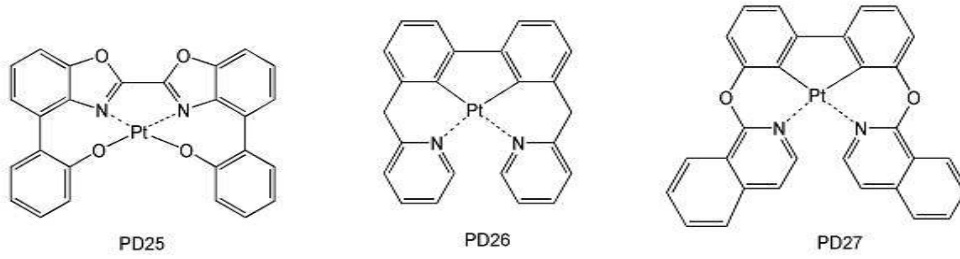
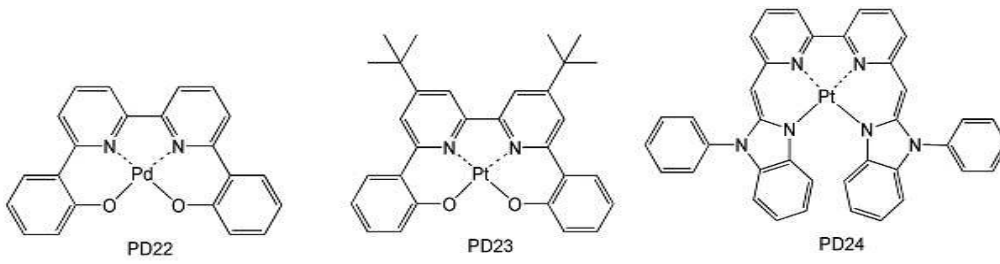
[0310]



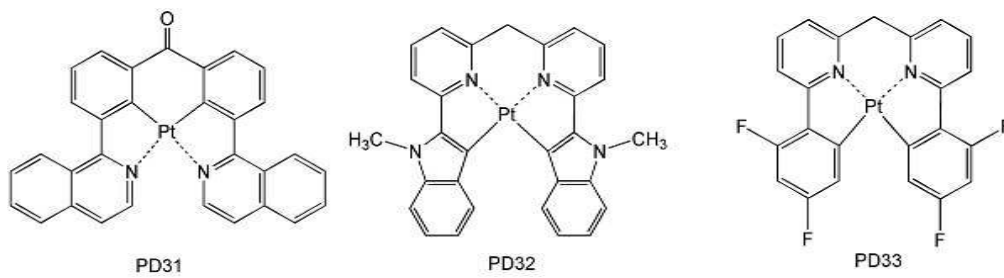
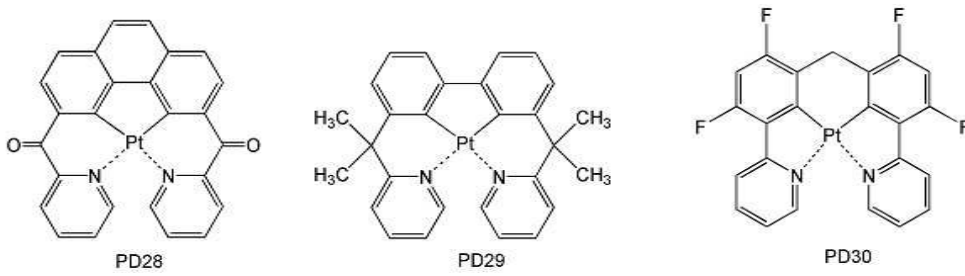
[0311]

[0312]

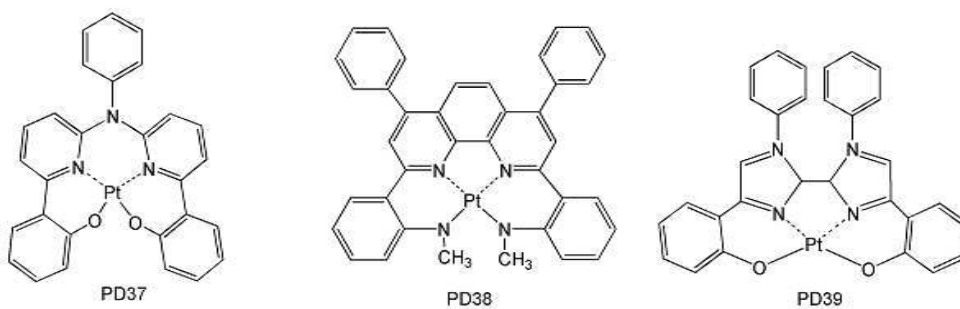
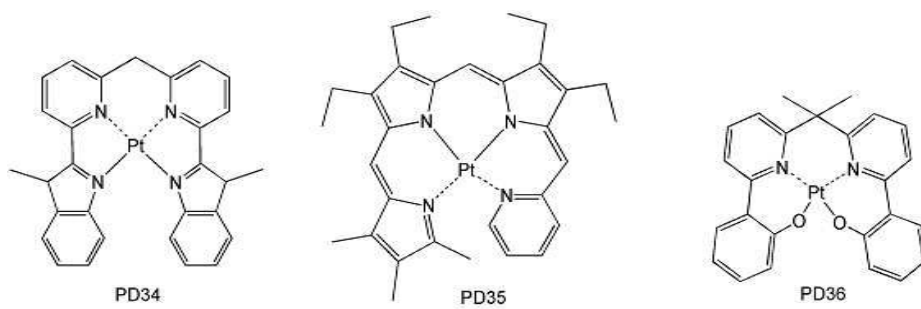
[0313]



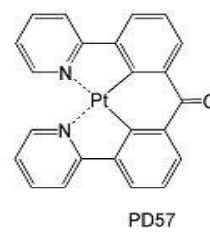
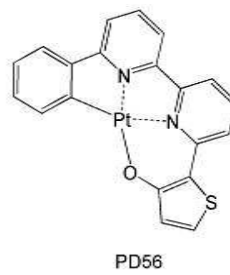
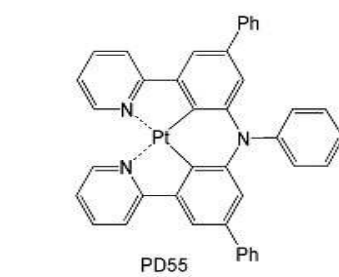
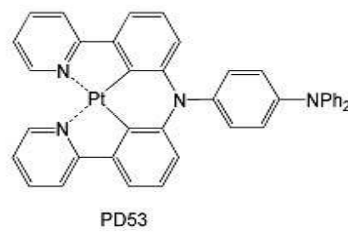
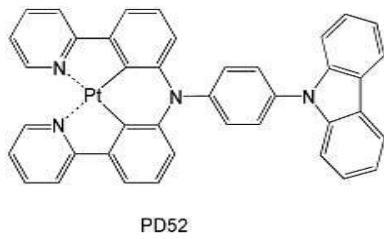
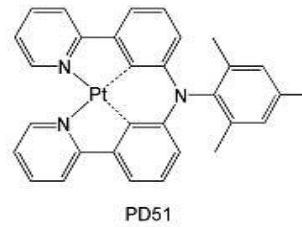
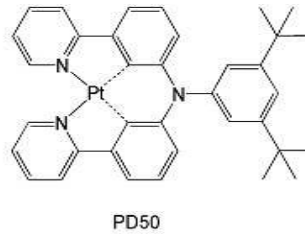
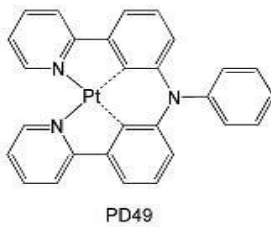
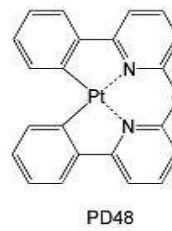
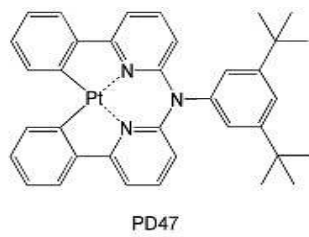
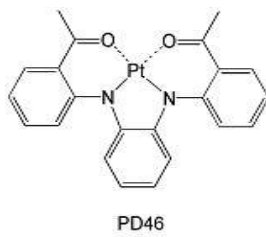
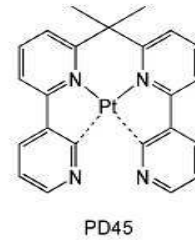
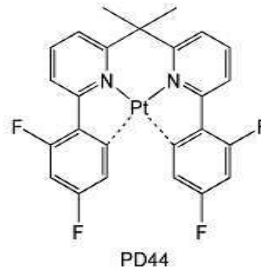
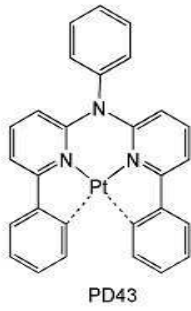
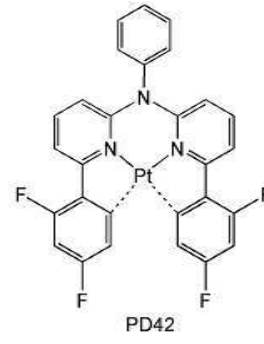
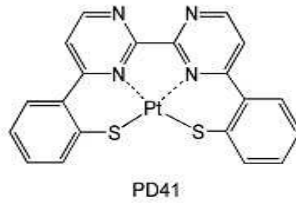
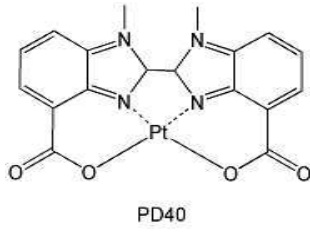
[0314]



[0315]



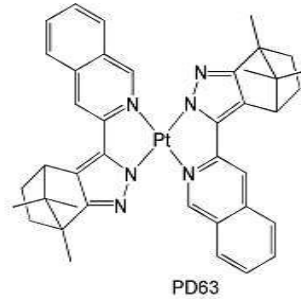
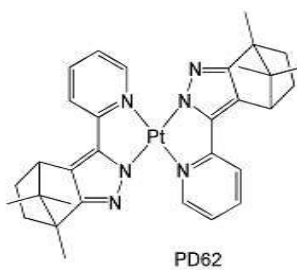
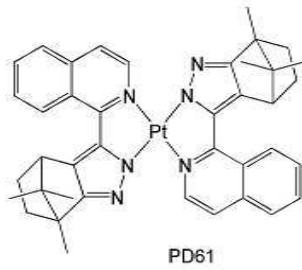
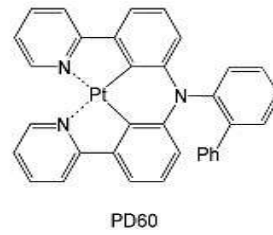
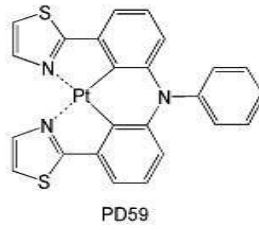
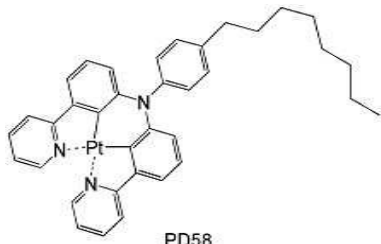
[0316]



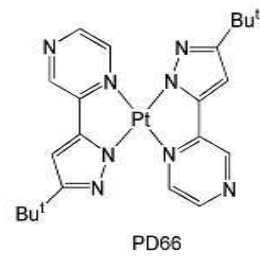
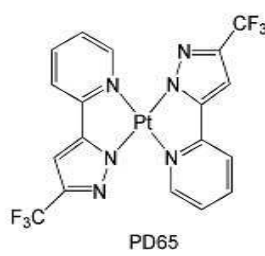
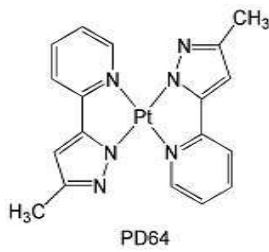
[0317]

[0318]

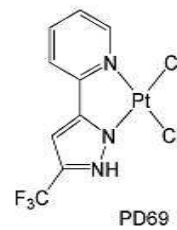
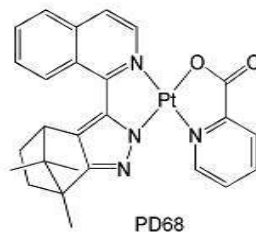
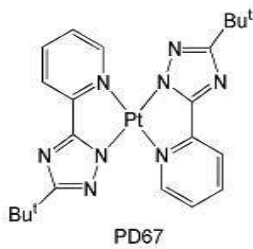
[0319]

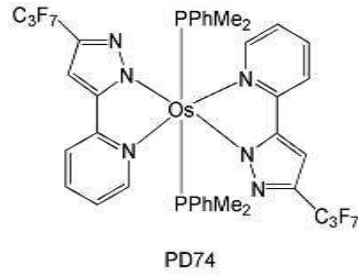
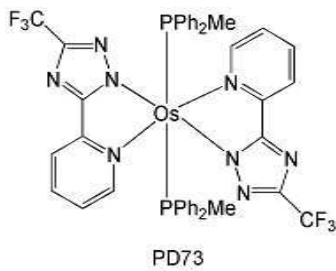
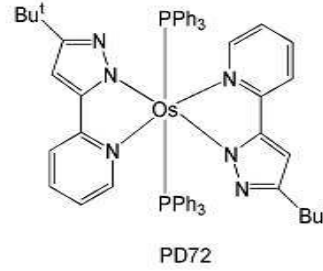
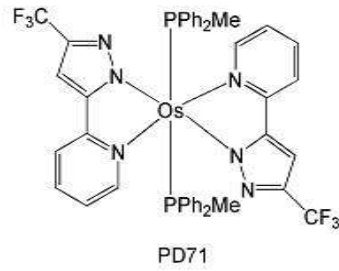
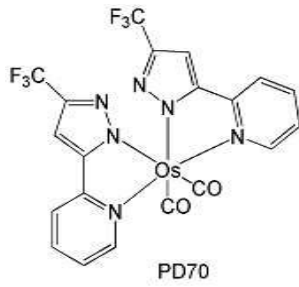


[0320]

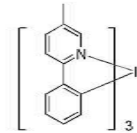
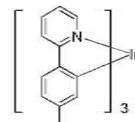
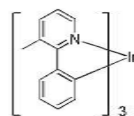
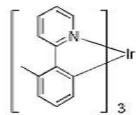


[0321]





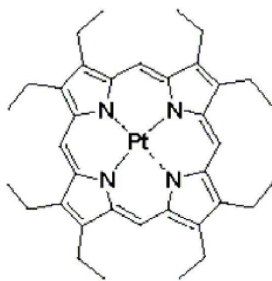
[0322]



[0323]

[0324]

또는, 상기 인광 도펀트는 하기 PtOEP를 포함할 수 있다:



[0325]

[0326]

상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0327]

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.

[0328]

다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.

[0329]

전자 수송 영역은 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

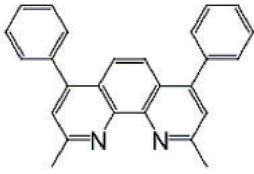
[0330]

예를 들어, 전자 수송 영역은 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층 또는 전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 전자 수송층은 단일층 또는 2 이상의 서로 다른 물질을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

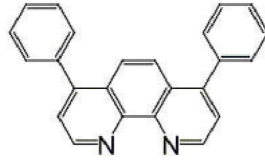
[0331]

상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참조한다.

[0332] 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP, Bphen 및 BA1q 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



BCP

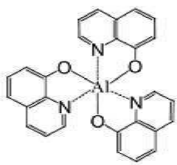


Bphen

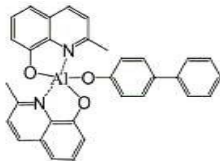
[0333]

[0334] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

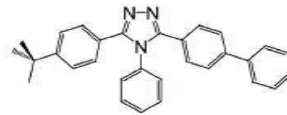
[0335] 상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq₃, BA1q, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.



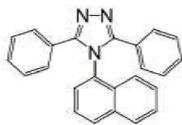
Alq₃



BA1q



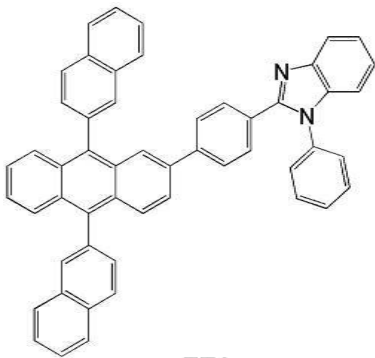
TAZ



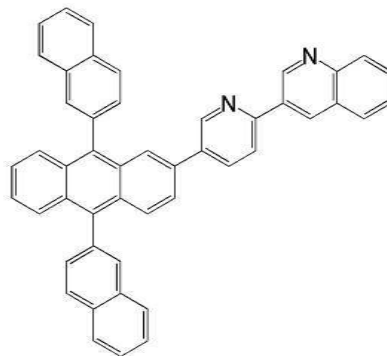
NTAZ

[0336]

[0337] 또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 및 ET2 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



ET1



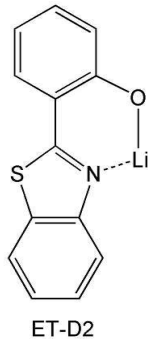
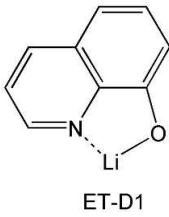
ET2

[0338]

[0339] 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.

[0340] 상기 전자 수송층은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0341] 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.



- [0342]
- [0343] 또한 전자 수송 영역은, 제2전극(19)으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 전자 주입층(EIL)을 포함할 수 있다.
- [0344] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li₂O 및 BaO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0345] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 진술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0346] 상기 유기층(15) 상부로는 제2전극(19)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(19)은 캐소드일 수 있다. 상기 제2전극(19)용 물질로는 상대적으로 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 제2전극(19) 형성용 물질로 사용할 수 있다. 또는, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용하여 투과형 제2전극(19)을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.
- [0347] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0348] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0349] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는 -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0350] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0351] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0352] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0353] 본 명세서 중 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 2 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0354] 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 구체예는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0355] 본 명세서 중 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 2 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-히드روف우라닐기, 2,3-히드로티오펜닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0356] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0357] 본 명세서 중 C₂-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 2 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C₂-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 2 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₂-C₆₀헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C₂-C₆₀헤테로아릴기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0358] 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.

[0359] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함(예를 들어, 탄소수는 8 내지 60일 수 있음)하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹을 의미한다. 상기 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예는 플루오레닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0360] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소(예를 들어, 탄소수는 2 내지 60일 수 있음) 외에 N, O, P 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은, 카바졸일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0361] 본 명세서 중 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬렌기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐렌기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 적어도 하나의 치환기는,

[0362] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀

알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

- [0363] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0364] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0365] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅) 및 -B(Q₂₆)(Q₂₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0366] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅) 및 -B(Q₃₆)(Q₃₇); 중에서 선택될 수 있다.
- [0367] 또한, 본 명세서 중 Q₁ 내지 Q₇, Q₁₁ 내지 Q₁₇ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₇은 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0368] 예를 들어, 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬렌기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐렌기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 적어도 하나의 치환기는,
- [0369] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0370] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0371] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헵세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기 및 퀴나졸리닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤조이미다졸일기, 푸라닐기, 벤조푸라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이소옥사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리미디닐기 및 이미다조피리디닐기;

[0372] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅) 및 -B(Q₂₆)(Q₂₇) 중 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헵세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기 및 퀴나졸리닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤조이미다졸일기, 푸라닐기, 벤조푸라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이소옥사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리미디닐기 및 이미다조피리디닐기; 및

[0373] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅) 및 -B(Q₃₆)(Q₃₇); 중에서 선택되고;

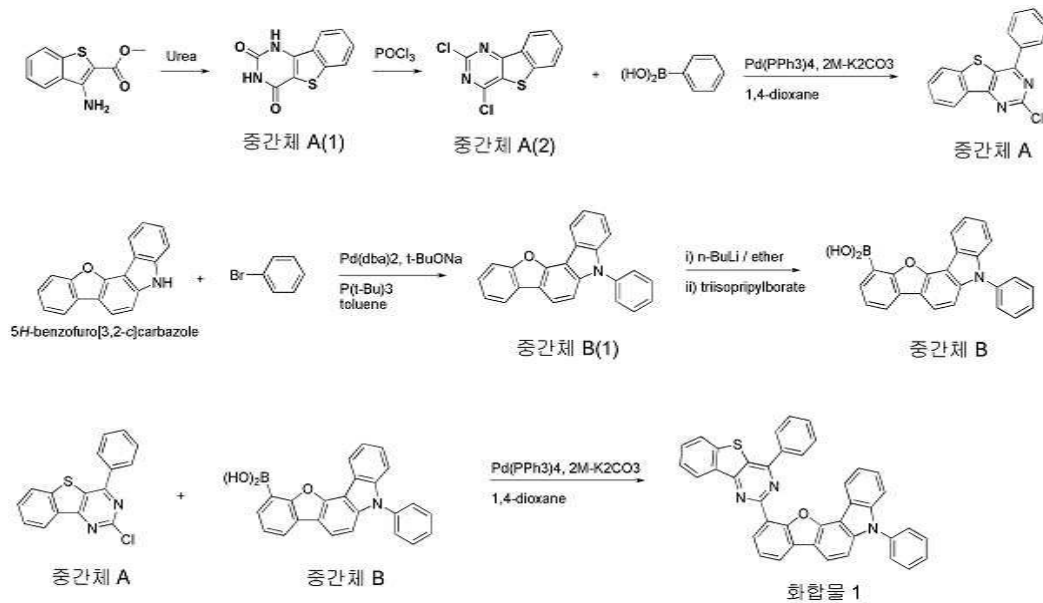
[0374] 상기 Q₁ 내지 Q₇, Q₁₁ 내지 Q₁₇ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₇은 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헵세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기 및 퀴나졸리닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤조이미다졸일기, 푸라닐기, 벤조푸라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이소옥사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리미디닐기 및 이미다조피리디닐기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0375] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다.

[0376] 이하, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 하기 합성에 중 "'A' 대신 'B'를 사용하였다"란 표현 중 'B'의 사용량과 'A'의 사용량은 몰당량 기준으로 동일하다.

[0377] [실시예]

[0378] **합성에 1 : 화합물 1의 합성**



[0379]

[0380] **중간체 A(1)(벤조-1H-티에노 [3,2-d]피리미딘-2,4-디온)의 합성**

[0381] 2000 mL 둥근 플라스크에 벤조-메틸 3-아미노-2-티오펜카르복실레이트 (47.5g, 0.23mol) 및 우레아 (79.4g, 1.15mol)의 혼합물을 200°C에서 2 시간 동안 교반하였다. 고온의 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 수산화나트륨 용액에 붓고, 불순물을 여과하여 제거한 다음, 반응물을 산성화하여 (HCl, 2N), 수득한 침전물을 건조시켜 중간체 A(1)을 수득하였다 (35g, 75%).

[0382] **중간체 A(2)(벤조-2,4-디클로로-티에노[3,2-d]피리미딘)의 합성**

[0383] 1000 mL 둥근 플라스크에 중간체 A(1)(벤조-1H-티에노[3,2-d]피리미딘-2,4-디온) (35 g, 0.16mol) 및 옥시염화인 (600mL)의 혼합물을 환류하에 6시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고, 세계 교반하면서 얼음/물에 부어, 침전물을 생성시켰다. 이로부터 수득한 반응물을 여과하여, 중간체 A(2)(벤조-2,4-디클로로-티에노[3,2-d]피리미딘) (35g, 85%, 백색 고체)를 수득하였다.

[0384] **중간체 A의 합성**

[0385] 1000 mL 플라스크에 중간체 A(2) 20.0 g (78.4 mmol), 페닐보론산 11.0 g (90.15 mmol), 탄산칼륨 27.09 g (195.99 mmol) Pd(PPh₃)₄(Tetrakis-(triphenylphosphine) palladium(0)) 4.53 g (3.9 mmol)을 1,4-다이옥산 300 mL, 물 150 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 12시간 동안 60°C로 가열하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 1000 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 중간체 A (13.9 g, 60%의 수율)를 수득하였다.

[0386] **중간체 B(1)의 합성**

[0387] 1L 플라스크에 5H-벤조푸로[3,2-c]카바졸(5H-benzofuro[3,2-c]carbazole) (40g, 155.47 mmol), 브로모벤젠 (293.3g, 186.56 mmol), 트리스디벤질리덴아세톤디필라듐 (4.27g, 4.66 mmol) 및 소듐-t-부톡사이드 (19.4g, 202.11 mmol) 을 넣고, 크실렌 750 ml 를 넣은 다음 교반하였다. 트리-t-부틸포스핀 (3.4 ml, 50% 용액(톨루엔))을 넣은 다음 질소기류하에서 130°C로 12 시간 동안 가열하였다. 이로부터 수득한 반응물을 상온으로 식힌 다음 1L의 메탄올에 반응물을 부어 생성된 고형물을 여과한 다음, 디클로로메탄과 메탄올을 사용하여 재결정 하여 중간체 B(1) (25g, 48%)을 얻었다.

[0388] 중간체 B의 합성

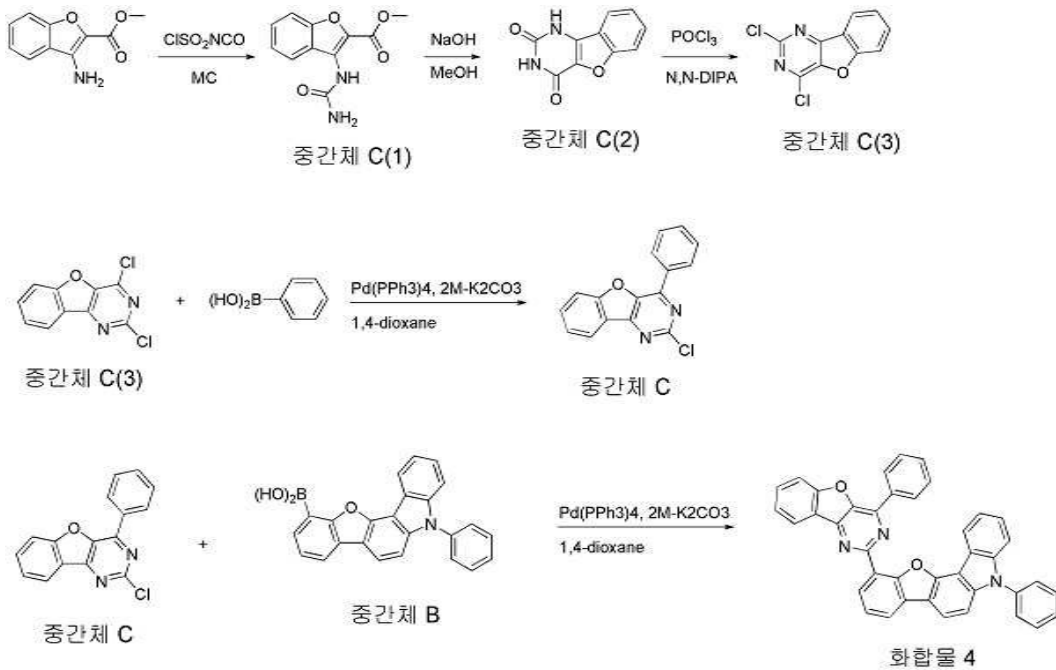
[0389] 반응기 내에서 상기 중간체 B(1) (25g, 74.99 mmol)을 테트라하이드로퓨란 250 ml에 녹인 다음, 액체질소를 사용하여 반응기를 냉각한 후, n-부틸리튬 (35.99 ml, 89.99 mmol)을 주사기를 사용하여 적가하고 6 시간 동안 상온에서 교반한 다음, 다시 반응기를 냉각시켰다. 여기에, 트리메틸보레이트 (10.03 ml, 89.99)를 서서히 적가한 다음 8시간 동안 교반하여 수득한 반응물을 1N-HCl 수용액 900 ml 에 부어 교반하고, 디클로로메탄으로 추출한 다음 디클로로메탄과 헥산을 사용하여 재결정하여 중간체 B (20g, 71%)을 얻었다.

[0390] 화합물 1의 합성

[0391] 500 ml의 플라스크에 상기 중간체 A (13g, 43.80 mmol), 중간체 B (16.52g, 43.80 mmol), 포타슘카보네이트 (12.1g, 87.61 mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀 (2.53g, 2.19 mmol)을 넣은 다음, 물 40 ml 와 1,4-디옥산 175 ml 를 넣어 100℃로 12시간 동안 가열하였다. 이로부터 수득한 반응물을 메탄올 500 ml에 부어 생긴 고형물을 여과하여 수득한 고형물을 1,2-디클로로벤젠을 사용하여 재결정하여 화합물 1 (20g, 77%)을 얻었다.

[0392] 300 MHz (CDCl₃, ppm) : 7.27~7.31 (m, 1H), 7.42~7.79 (m, 14H), 8.00~8.03 (m, 2H), 8.14~8.17 (d, 1H), 8.61~8.64 (m, 2H), 8.69~8.74 (t, 2H), 8.97~8.99 (d, 1H)

[0393] 합성예 2 : 화합물 4의 합성



[0394] 중간체 C(1)(벤조-메틸 3-우레이도푸란-2-카르복실레이트)의 합성

[0395] 1000 mL 둥근 플라스크에 -78℃에서 디클로로메탄 (1000ml) 중 벤조-메틸 3-아미노푸란-2-카르복실레이트(49.0 g, 0.25mol)의 용액에 클로로술포닐 이소시아네이트 (33.4 ml, 0.38mol)를 적가하였다. 반응물을 실온으로 천천히 가온시키고, 2시간 동안 교반하였다. 반응물을 농축시킨 후, 잔류물에 Conc. HCl (100 ml)을 첨가하고, 혼합물을 100℃로 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 포화 NaHCO₃ 수용액으로 중화시켰다. 생성된 고체를 여과하여, 중간체 C(1)(벤조-에틸 3-우레이도푸란-2-카르복실레이트) (52.1 g, 87%)를 베이지색 고체로서 수득하였다.

[0397] 중간체 C(2)(벤조-푸로[3,2-d]피리미딘-2,4-디올)의 합성

[0398] 2000 mL 둥근 플라스크에 중간체 C(1)(벤조-에틸 3-우레이도푸란-2-카르복실레이트) (50.0g, 0.21mol)를 메탄올 1000ml에 현탁시키고, 2 M NaOH(300ml)를 적가하였다. 반응 혼합물을 환류하에 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, Conc. HCl을 이용하여 pH 3까지 산성화시켰다. 혼합물을 농축시킨 후, 메탄올을 잔류물에 서서히 적가하여 고체를 침전시킨다. 생성된 고체를 여과 후, 건조하여 중간체 C(2)(벤조-푸로

[3,2-d]피리미딘-2,4-디올) (38.0g, 88%)을 수득하였다.

[0399] 중간체 C(3)(벤조-2,4-디클로로푸로[3,2-d]피리미딘)의 합성

[0400] 1000 mL 둥근 플라스크에 중간체 C(2)(벤조-푸로[3,2-d]피리미딘-2,4-디올) (37.2 g, 0.18mol)을 옥시염화인 (500 ml)에 용해시켰다. 혼합물을 -30℃로 냉각시키고, N,N-디이소프로필에틸아민 (52 ml, 0.36mol)을 천천히 첨가하였다. 반응물을 환류하에 36 시간동안 교반한 다음, 실온으로 냉각시켰다. 그 후 반응물을 얼음/물에 붓고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 포화 NaHCO₃ 수용액으로 세척한 후, Na₂SO₄를 이용하여 드라이시킨다. 이로부터 수득한 유기층을 농축시켜, 중간체 C(3)(벤조-2,4-디클로로푸로[3,2-d]피리미딘) (20.4g, 46%)을 수득하였다.

[0401] 중간체 C의 합성

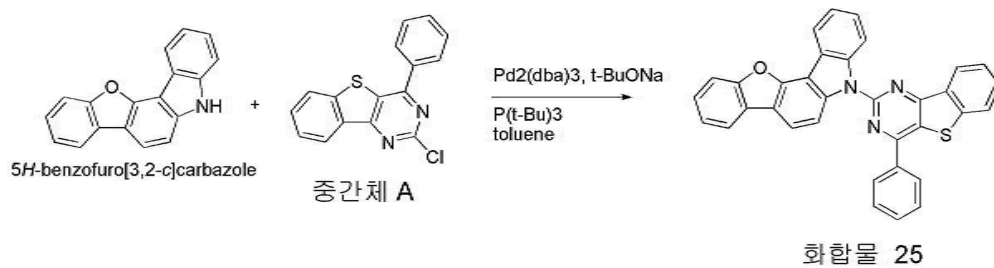
[0402] 2000 mL 플라스크에 중간체 C(3) 40.0 g (167.3 mmol), 페닐보로닉에시드 22.4 g (184.1 mmol), 탄산칼륨 57.8 g (418.3 mmol), Pd(PPh₃)₄ (Tetrakis (triphenylphosphine) palladium(0)) 9.7 g (8.4 mmol)을 1,4-다이옥산 500 mL, 물 250 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 8시간 동안 40℃로 가열하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 1500 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 중간체 C (31.0 g, 66%의 수율)을 수득하였다.

[0403] 화합물 4의 합성

[0404] 중간체 A (13g, 43.80 mmol), 중간체 B (16.52g, 43.80 mmol), 포타슘카보네이트 (12.1g, 87.61 mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀 (2.53g, 2.19 mmol) 대신, 중간체 C (15g, 53.44 mmol), 중간체 B (20.16g, 53.44 mmol), 포타슘카보네이트 (14.7g, 106.8 mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀 (3.09 g, 2.67 mmol) 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 4 (21g, 68%)를 수득하였다.

[0405] 300 MHz (CDCl₃, ppm) : 7.26~7.32 (m, 1H), 7.41~7.82 (m, 15H), 7.98~8.04 (d, 1H), 8.10~8.15 (d, 1H), 8.53~8.55 (d, 1H), 8.61~8.64 (d, 1H), 8.71~8.75 (d, 1H), 9.00~9.05 (d, 2H)

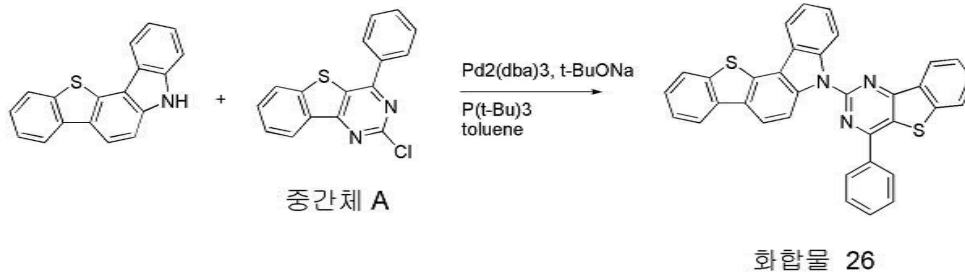
[0406] 합성예 3 : 화합물 25의 합성



[0407] 5H-벤조푸로[3,2-c]카바졸(5H-benzofuro[3,2-c]carbazole) (40g, 155.47 mmol) 및 브로모벤젠 (293.3g, 186.56 mmol) 대신, 5H-벤조퓨라노[3,2-c]카바졸 (14g, 54.41 mmol) 및 중간체 A (19.38g, 65.30 mmol)을 이용하였다는 점을 제외하고는, 합성에 1의 중간체 B(1)의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 25 (21g, 75%)를 수득하였다.

[0409] calcd. C₃₄H₁₉N₃OS : C, 78.90; H, 3.70; N, 8.12; O, 3.09; S, 6.19; found : C, 78.84; H, 3.71; N, 8.15

[0410] 합성예 4 : 화합물 26의 합성

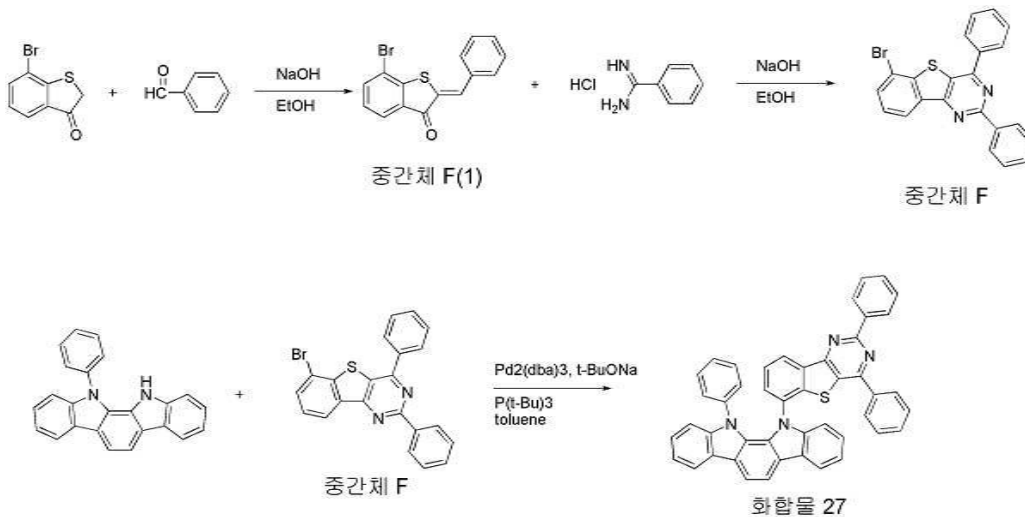


[0411]

[0412] 5H-벤조푸로[3,2-c]카바졸(5H-benzofuro[3,2-c]carbazole) (40g, 155.47 mmol) 및 브로모벤젠 (293.3g, 186.56 mmol) 대신, 5H-벤조티아노[3,2-c]카바졸 (15g, 54.48 mmol), 중간체 C (19.40g, 65.37 mmol)을 이용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1의 중간체 B(1)의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 26 (22g, 76%)를 수득하였다.

[0413] calcd. C₃₄H₁₉N₃S₂: C, 76.52; H, 3.59; N, 7.87; S, 12.02; found : C, 76.54; H, 3.60; N, 7.88

[0414] 합성예 5 : 화합물 27의 합성



[0415]

[0416] 중간체 F(1)의 합성

[0417] 500 ml 플라스크에 7-브로모벤조[b]티오펜-3(2H)-온 (18.1g, 78.81 mmol)과 벤즈알데히드 (5.1g, 78.81 mmol)를 넣고 소듐하이드록사이드 (4.729g, 118.22 mmol)를 넣은 다음 160 ml 의 에탄올을 부어 상온에서 12 시간 동안 교반하였다. 이로부터 수득한 고형물을 여가한 다음 에탄올로 씻어 중간체 F(1) (12g, 48%)을 얻었다.

[0418] 중간체 F의 합성

[0419] 중간체 F(1) (7.6g, 23.96 mmol)과 벤자미딘 하이드로클로라이드 (2.3g, 23.93 mmol), 소듐하이드록사이드 (2.875g, 71.89 mmol)을 100 ml의 에탄올에 넣고 상온에서 12시간 동안 교반하였다. 이로부터 수득한 고형물을 여과한 다음 디클로로메탄과 헥산을 용매로하여 칼럼크로마토그래피를 이용하여 정제하여 중간체 F (5.3g, 53%)를 얻었다.

[0420] 화합물 27의 합성

[0421] 5H-벤조푸로[3,2-c]카바졸(5H-benzofuro[3,2-c]carbazole) (40g, 155.47 mmol) 및 브로모벤젠 (293.3g, 186.56 mmol) 대신, 11,12-디하이드로-11-페닐인돌로[2,3-a]카바졸 (3g, 9.03 mmol) 및 중간체 F (4.52g, 10.83 mmol)을 이용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1의 중간체 B(1)의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 27 (3.5g, 58%)를 수득하였다.

[0436] **실시예 5**

[0437] 발광층 형성시 호스트로서 상기 화합물 1 대신 화합물 27을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기발광 소자를 제작하였다.

[0438] **평가예 1: 유기 발광 소자의 특성 평가**

[0439] 상기 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자에 대하여 전압에 따른 전류 밀도 변화, 휘도 변화 및 발광 효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 하기 표 3에 나타내었다.

[0440] (1) 전압 변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0441] 제조된 유기 발광 소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0442] (2) 전압 변화에 따른 휘도변화 측정

[0443] 제조된 유기 발광 소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그 때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0444] (3) 발광 효율 측정

[0445] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

표 2

[0446]

	호스트	도펀트	구동 전압 (V)	효율 (cd/A)	색좌표	
					CIE x	CIE y
실시예 1	화합물 1	PhGD	4.1	56.3	0.366	0.601
실시예 2	화합물 4	PhGD	4.4	53.7	0.379	0.591
실시예 3	화합물 25	PhGD	4.2	54.0	0.380	0.592
실시예 4	화합물 26	PhGD	4.2	55.2	0.376	0.595
실시예 5	화합물 27	PhGD	4.4	52.5	0.375	0.594
비교예 1	CBP	PhGD	7.8	44.6	0.33	0.62

[0447] 상기 표 2에 따르면, 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자가 비교예 1의 유기 발광 소자보다 우수한 발광 효율을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

- [0448] 11: 기관
 13: 제1전극
 15: 유기층
 17: 제2전극

도면

도면1

