



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2020-0076818  
(43) 공개일자 2020년06월30일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

H01L 51/00 (2006.01) C07D 401/10 (2006.01)  
C07D 401/14 (2006.01) C07D 413/10 (2006.01)  
C07D 417/10 (2006.01) C07D 471/04 (2006.01)  
C07D 471/16 (2006.01) C07D 498/04 (2006.01)  
C07D 513/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

H01L 51/0071 (2013.01)  
C07D 401/10 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0165472

(22) 출원일자 2018년12월19일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

성균관대학교산학협력단

경기도 수원시 장안구 서부로 2066 (천천동, 성균관대학교내)

(72) 발명자

박혜정

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

윤승수

경기도 수원시 장안구 서부로 2066 (천천동)

정혜인

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(74) 대리인

리엔특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

**(57) 요약**

헤테로시클릭 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

**대표도** - 도1

10

190
150
110

(52) CPC특허분류

*C07D 401/14* (2013.01)

*C07D 413/10* (2013.01)

*C07D 417/10* (2013.01)

*C07D 471/04* (2013.01)

*C07D 471/16* (2013.01)

*C07D 498/04* (2013.01)

*C07D 513/04* (2013.01)

*H01L 51/0072* (2013.01)

*H01L 51/5012* (2013.01)

---

명세서

청구범위

청구항 1

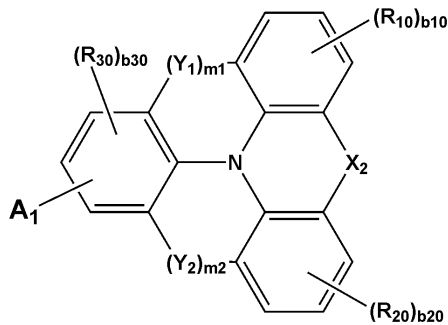
제1전극;

상기 제1전극에 대항하는 제2전극; 및

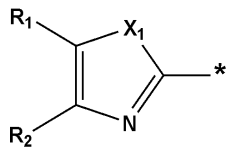
상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치된 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고,

상기 유기층은 하기 화학식 1로 표시된 헤테로시클릭 화합물을 포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 1>



<화학식 2>



상기 화학식 1 중,

A<sub>1</sub>은 상기 화학식 2로 표시되는 그룹이고,

상기 화학식 1 및 2 중,

X<sub>1</sub>은 O, S 또는 N(R<sub>3</sub>)이고,

X<sub>2</sub>는 O, S, N(R<sub>4</sub>), C(R<sub>4</sub>)(R<sub>5</sub>) 또는 Si(R<sub>4</sub>)(R<sub>5</sub>)이고,

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, C(R<sub>6</sub>)(R<sub>7</sub>) 또는 Si(R<sub>6</sub>)(R<sub>7</sub>)이고,

m<sub>1</sub>은 0 또는 1이고,

m<sub>2</sub>는 0 또는 1이고,

R<sub>3</sub>은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group), -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 및 -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되고,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group), -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 및 -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되거나,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub> 중 이웃한 2 이상의 치환기가 선택적으로(optionally) 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub> 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성하고,

m<sub>1</sub> 및 m<sub>2</sub>가 각각 1인 경우에, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성하고,

b<sub>10</sub>, b<sub>20</sub> 및 b<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 1 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

상기 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴옥시기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환

그룹; 및

-Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>);

중에서 선택되고,

상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>13</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>23</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

## 청구항 2

제1항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

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

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

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

## 청구항 3

제1항에 있어서,

상기 발광층이 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

## 청구항 4

제3항에 있어서,

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

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

## 청구항 5

제3항에 있어서,

상기 발광층에 포함된 헤테로시클릭 화합물이 하기 수식 1을 만족하는, 유기 발광 소자:

<수식 1>

$$|E_{D, S1} - E_{D, T1}| \leq 0.3 \text{ eV}$$

상기 수식 1 중

E<sub>D, S1</sub>는 상기 헤테로시클릭 화합물의 일중항 에너지(eV)이고

E<sub>D, T1</sub>는 상기 헤테로시클릭 화합물의 삼중항 에너지(eV)이다.

## 청구항 6

제3항에 있어서,

상기 발광층에 포함된 상기 헤테로시클릭 화합물은 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고, 상기 발광층이 지연 형광을 방출하는, 유기 발광 소자.

**청구항 7**

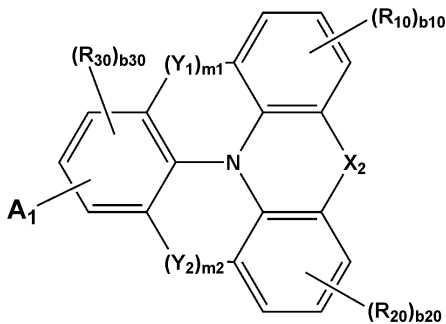
제3항에 있어서,

상기 발광층이 유기금속 화합물을 포함하지 않는, 유기 발광 소자.

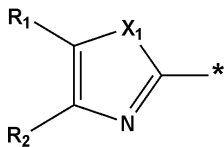
**청구항 8**

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 1>



<화학식 2>



상기 화학식 1 중,

A<sub>1</sub>은 상기 화학식 2로 표시되는 그룹이고,

상기 화학식 1 및 2 중,

X<sub>1</sub>은 O, S 또는 N(R<sub>3</sub>)이고,

X<sub>2</sub>은 O, S, N(R<sub>4</sub>), C(R<sub>4</sub>)(R<sub>5</sub>) 또는 Si(R<sub>4</sub>)(R<sub>5</sub>)이고,

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, C(R<sub>6</sub>)(R<sub>7</sub>) 또는 Si(R<sub>6</sub>)(R<sub>7</sub>)이고,

m<sub>1</sub>은 0 또는 1이고,

m<sub>2</sub>는 0 또는 1이고,

R<sub>3</sub>은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group), -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 및 -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되고,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아

노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group), -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 및 -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되거나,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub> 중 이웃한 2 이상의 치환기가 선택적으로(optionally) 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub> 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성하고,

m<sub>1</sub> 및 m<sub>2</sub>가 각각 1인 경우에, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성하고,

b<sub>10</sub>, b<sub>20</sub> 및 b<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 1 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

상기 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴옥시기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

-Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>);

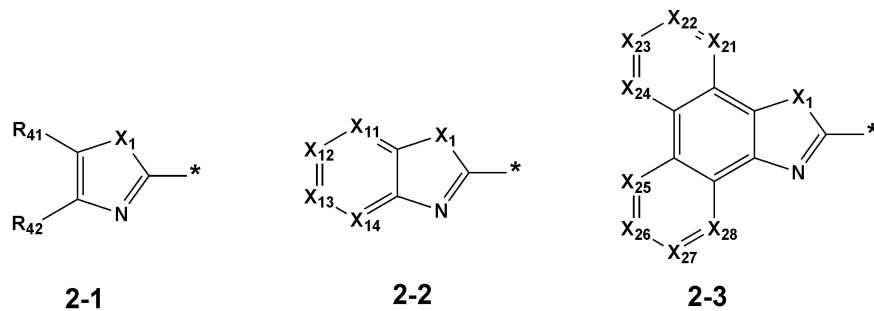
중에서 선택되고,

상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>13</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>23</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

**청구항 9**

제8항에 있어서,

상기 화학식 1 중 A<sub>1</sub>은 하기 화학식 2-1 내지 2-3 중에서 선택된 어느 하나로 표시되는, 헤테로시클릭 화합물:



상기 화학식 2-1 내지 2-3 중,

X<sub>1</sub>에 관한 설명은 제8항을 참조하고,

X<sub>11</sub>은 N 또는 C(R<sub>51</sub>)이고, X<sub>12</sub>는 N 또는 C(R<sub>52</sub>)이고, X<sub>13</sub>은 N 또는 C(R<sub>53</sub>)이고, X<sub>14</sub>는 N 또는 C(R<sub>54</sub>)이고,

X<sub>21</sub>은 N 또는 C(R<sub>61</sub>)이고, X<sub>22</sub>는 N 또는 C(R<sub>62</sub>)이고, X<sub>23</sub>은 N 또는 C(R<sub>63</sub>)이고, X<sub>24</sub>는 N 또는 C(R<sub>64</sub>)이고, X<sub>25</sub>는 N 또는 C(R<sub>65</sub>)이고, X<sub>26</sub>은 N 또는 C(R<sub>66</sub>)이고, X<sub>27</sub>은 N 또는 C(R<sub>67</sub>)이고, X<sub>28</sub>은 N 또는 C(R<sub>68</sub>)이고,

상기 화학식 1 중 m1 및 m2가 각각 1인 경우에, X<sub>11</sub> 내지 X<sub>14</sub> 중 적어도 하나가 N이고,

\*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

R<sub>41</sub>, R<sub>42</sub>, R<sub>51</sub> 내지 R<sub>54</sub> 및 R<sub>61</sub> 내지 R<sub>68</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에틸헥시, 프로펜기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, 및 tert-부톡시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이폴루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 벤조퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤

즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기;

중에서 선택된다.

**청구항 10**

제8항에 있어서,

m1 및 m2가 각각 0이거나,

m1 및 m2가 각각 1인, 헤테로시클릭 화합물.

**청구항 11**

제9항에 있어서,

R<sub>3</sub>은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, 및 tert-부톡시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기 및 펜타세닐기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, tert-부톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>), -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 및 -P(=S)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄

레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기 및 펜타세닐기;

중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

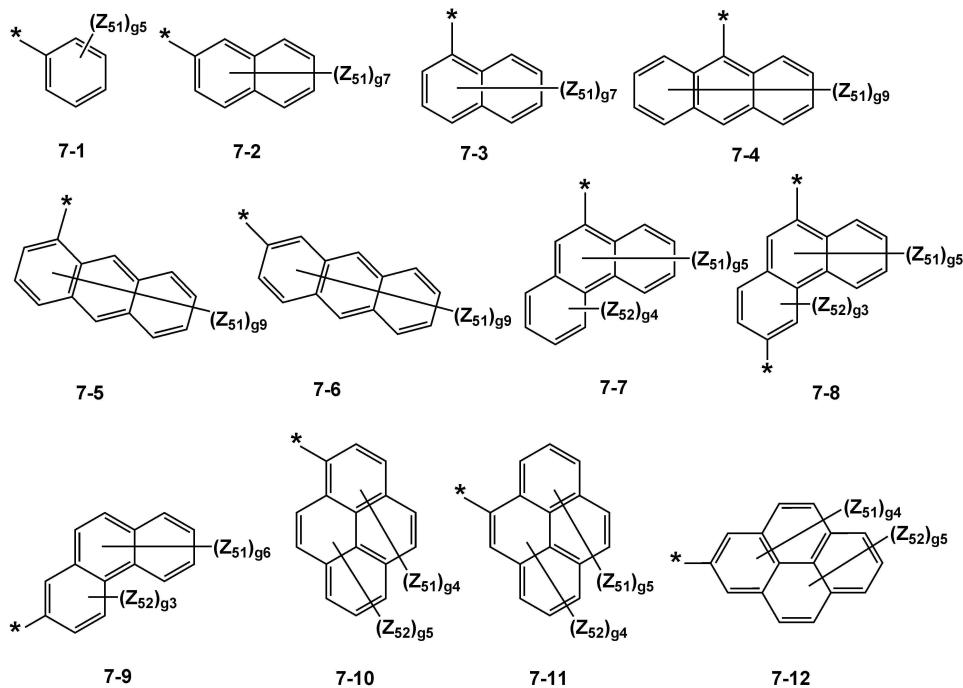
**청구항 12**

제8항에 있어서,

R<sub>3</sub>은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기; 및

상기 화학식 7-1 내지 7-12 중 어느 하나로 표시된 그룹; 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:



상기 화학식 7-1 내지 7-12 중,

Y<sub>51</sub>은 O, S, C(Z<sub>53</sub>)(Z<sub>54</sub>), N(Z<sub>53</sub>) 또는 Si(Z<sub>53</sub>)(Z<sub>54</sub>)이고,

Z<sub>51</sub> 내지 Z<sub>54</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페틸레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,

g<sub>3</sub>는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

g<sub>4</sub>는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

g<sub>5</sub>는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

g<sub>6</sub>은 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

g<sub>7</sub>은 1 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

g<sub>9</sub>는 1 내지 9의 정수 중에서 선택되고,

\* 은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 13

제8항에 있어서,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, 및 tert-부톡시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜틸기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포퓨라닐기, 디나프토펜틸기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜틸기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, tert-부톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜틸기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포퓨라닐기, 디나프토펜틸기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜틸기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>), -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 및 -P(=S)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐

기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 벤조퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기; 중에서 선택되거나,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub> 중 이웃한 2 이상의 치환기가 선택적으로 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub> 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성하는, 헤테로시클릭 화합물.

**청구항 14**

제8항에 있어서,

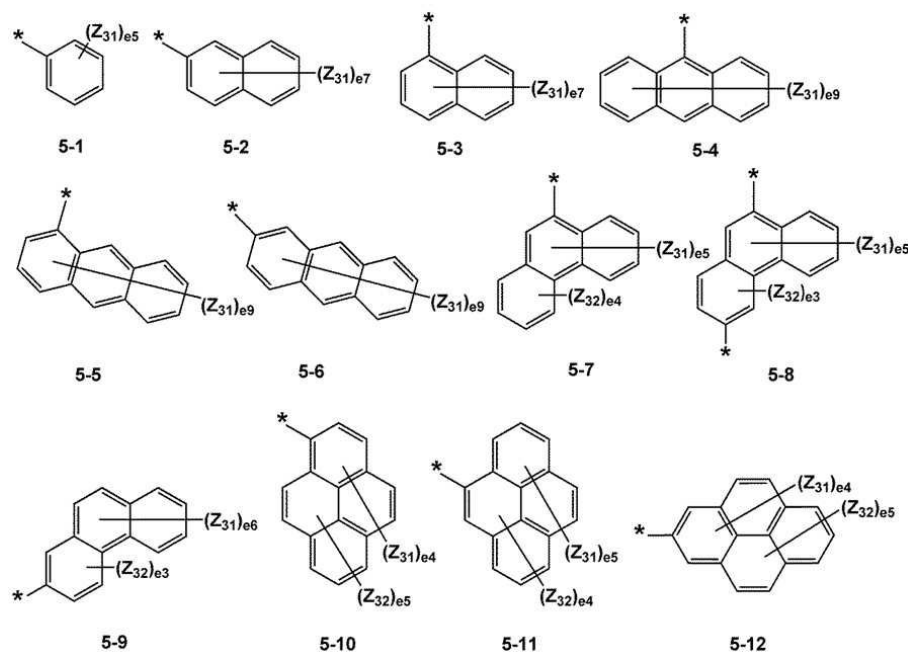
R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub>은 서로 독립적으로

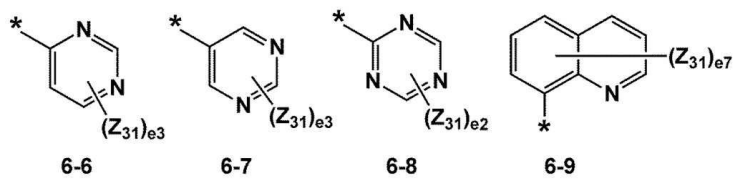
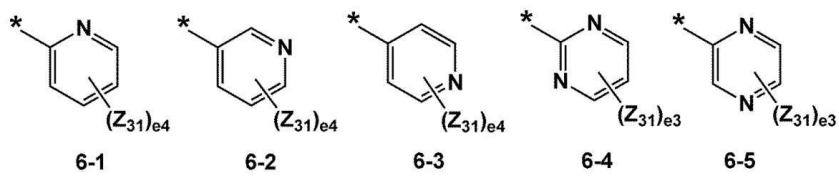
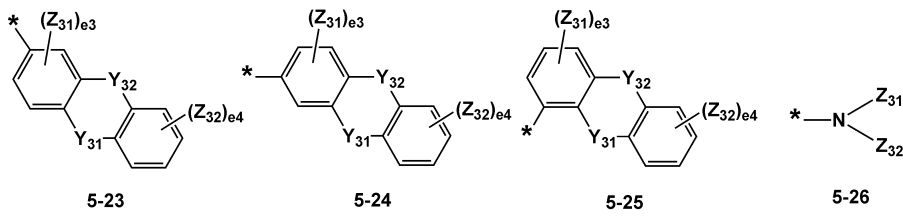
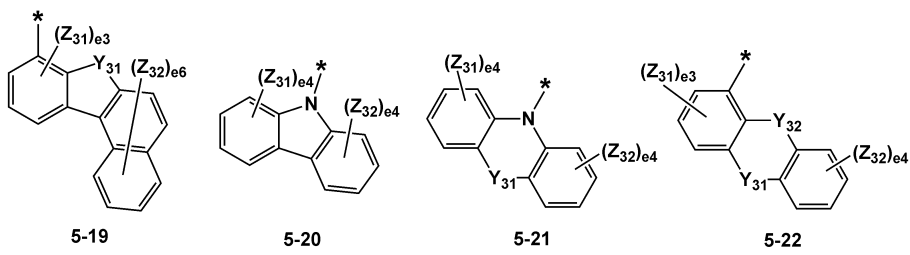
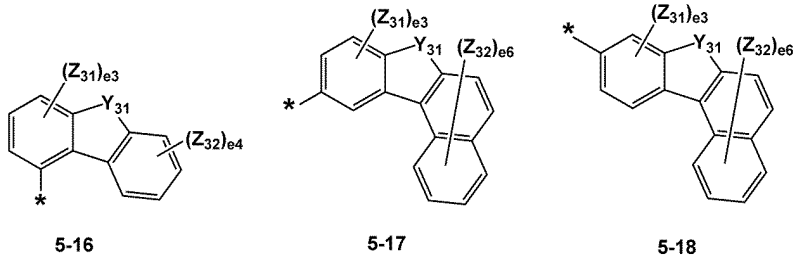
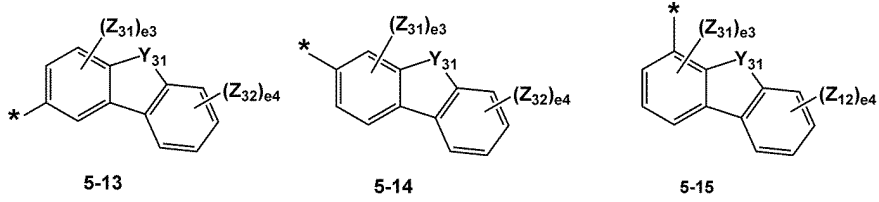
수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기; 및

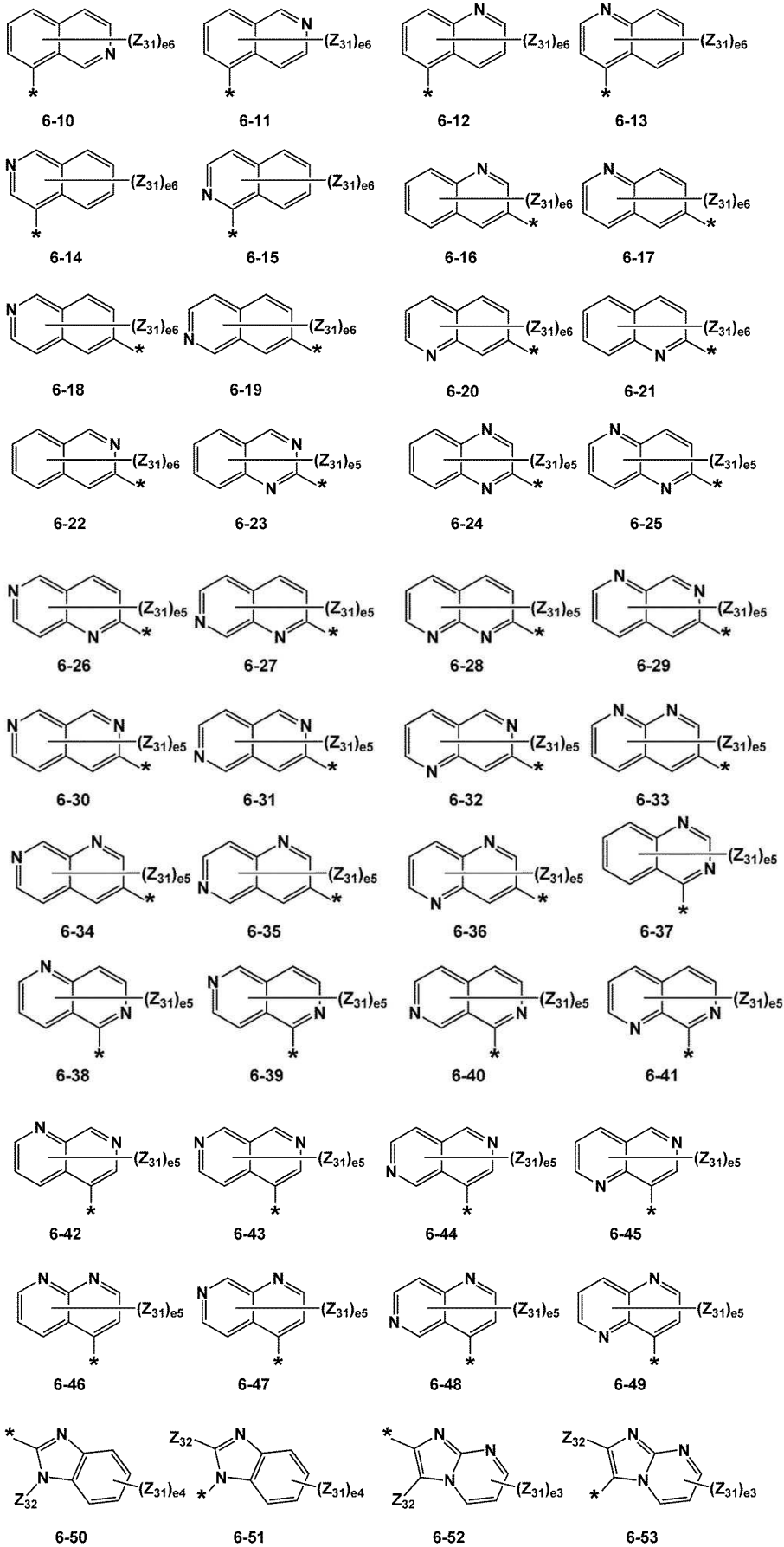
하기 화학식 5-1 내지 5-26 및 화학식 6-1 내지 6-55 중 어느 하나로 표시된 그룹;

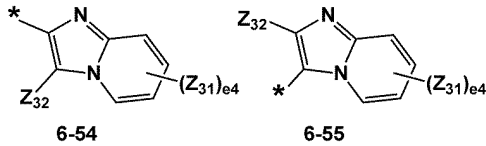
중에서 선택되거나,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub> 중 이웃한 2 이상의 치환기가 선택적으로 서로 결합하여, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub> 중 이웃한 2 이상의 치환기가 선택적으로 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub> 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성하는, 헤테로시클릭 화합물:









상기 화학식 5-1 내지 5-26 및 화학식 6-1 내지 6-55 중,

$Y_{31}$ 은 O, S, C( $Z_{34}$ )( $Z_{35}$ ), N( $Z_{34}$ ) 또는 Si( $Z_{34}$ )( $Z_{35}$ )이고,

$Z_{31}$  내지  $Z_{35}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알케닐기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알키닐기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페틸레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,

$e_2$ 는 1 또는 2이고,

$e_3$ 는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

$e_4$ 는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

$e_5$ 는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

$e_6$ 은 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

$e_7$ 은 1 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

$e_9$ 는 1 내지 9의 정수 중에서 선택되고,

\* 은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

### 청구항 15

제14항에 있어서,

$R_1$  및  $R_2$ 는 상기 화학식 5-1 내지 5-26 및 화학식 6-1 내지 6-55 중 어느 하나로 표시된 그룹; 중에서 선택되거나,

$R_1$  및  $R_2$ 가 선택적으로, 서로 결합하여,

벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 2,6-나프티리딘 그룹, 1,8-나프티리딘 그룹, 1,5-나프티리딘 그룹, 1,6-나프티리딘 그룹, 1,7-나프티리딘 그룹, 2,7-나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹 및 페난트롤린 그룹; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 2,6-나프티리딘 그룹, 1,8-나프티리딘 그룹, 1,5-나프티리딘 그룹, 1,6-나프티리딘 그룹, 1,7-나프티리딘 그룹, 2,7-나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹 및 페난트롤린 그룹;

중에서 선택된 어느 하나의 고리를 형성하는, 헤테로시클릭 화합물.

### 청구항 16

제8항에 있어서,

$R_4$  및  $R_5$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-

부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

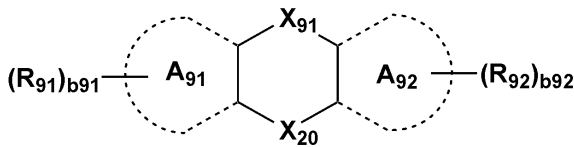
페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기 및 디벤조실롤일기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기 및 디벤조실롤일기;

중에서 선택되거나,

R<sub>4</sub>와 R<sub>5</sub>가 선택적으로, 서로 결합하여, 하기 화학식 9로 표시되는 그룹을 형성하는, 헤테로시클릭 화합물:

<화학식 9>



상기 화학식 9 중,

X<sub>20</sub>은 상기 X<sub>2</sub> 중 C 또는 Si를 나타내고,

X<sub>91</sub>은 단일 결합, O, S, Se, N(R<sub>93</sub>), B(R<sub>93</sub>), C(R<sub>93</sub>)(R<sub>94</sub>) 및 Si(R<sub>93</sub>)(R<sub>94</sub>) 중에서 선택되고,

A<sub>91</sub> 및 A<sub>92</sub>는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 플루오렌 그룹 및 카바졸 그룹 중에서 선택되고,

R<sub>91</sub> 내지 R<sub>94</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되고,

Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기,

C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고;

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

**청구항 17**

제8항에 있어서,

R<sub>6</sub> 및 R<sub>7</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, 및 tert-부톡시기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

**청구항 18**

제8항에 있어서,

R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기 및 tert-부틸기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기 및 tert-부틸기;

페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴어로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜기 및 디벤조실롤일기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴어로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜기 및 디벤조실롤일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴어로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜기 및 디벤조실롤일기; 및

-N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>);

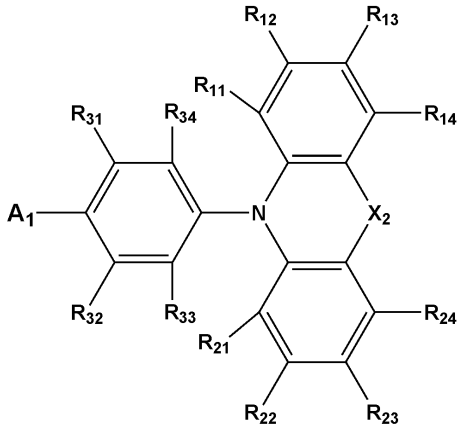
중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물.

**청구항 19**

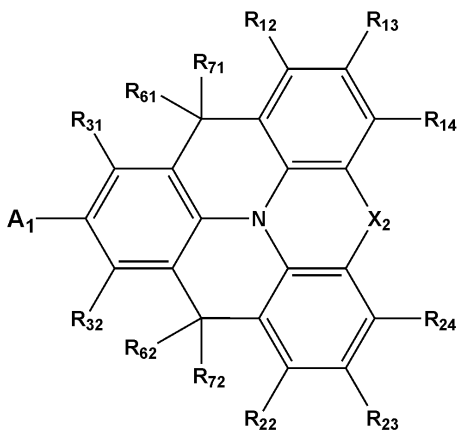
제8항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 하기 화학식 10A 또는 10B로 표시되는 화합물인, 헤테로시클릭 화합물.

<화학식 10A>



<화학식 10B>



상기 화학식 10A 및 10B 중,

A<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>에 관한 설명은 제8항을 참조하고,

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>에 관한 설명은 제8항 중 R<sub>10</sub>에 관한 설명을 참조하고,

R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>에 관한 설명은 제8항 중 R<sub>20</sub>에 관한 설명을 참조하고,

R<sub>31</sub> 내지 R<sub>34</sub>에 관한 설명은 제8항 중 R<sub>30</sub>에 관한 설명을 참조하고,

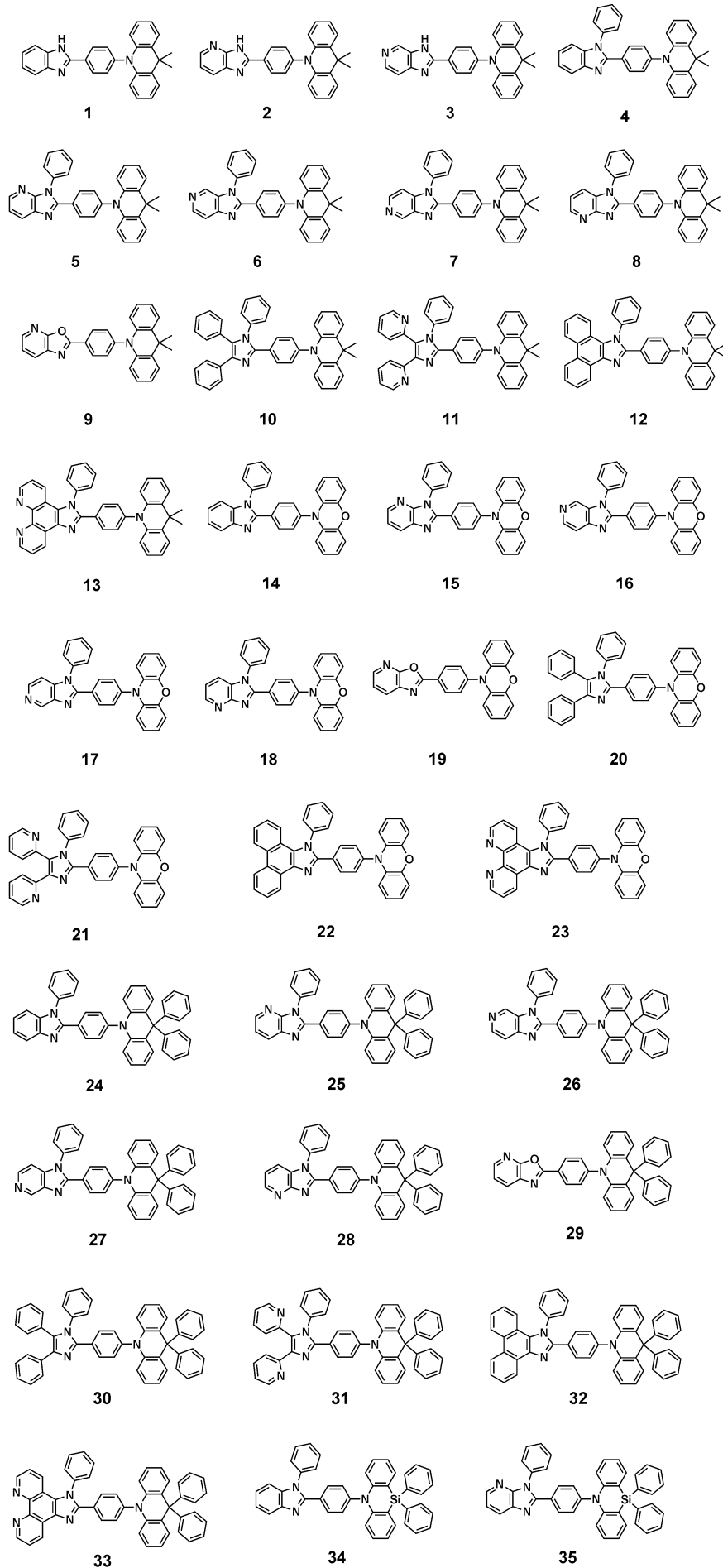
R<sub>61</sub> 및 R<sub>62</sub>에 관한 설명은 제8항 중 R<sub>6</sub>에 관한 설명을 참조하고,

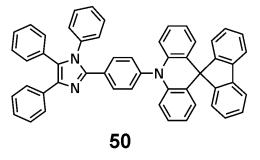
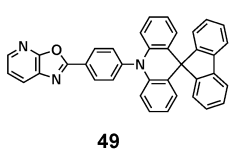
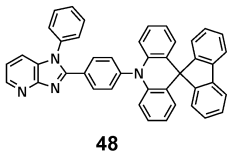
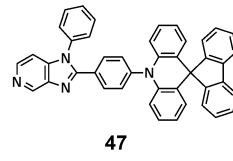
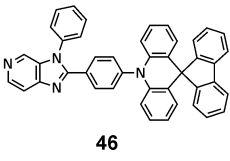
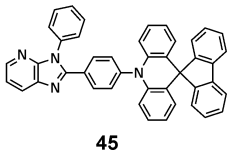
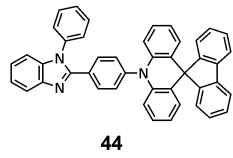
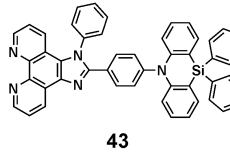
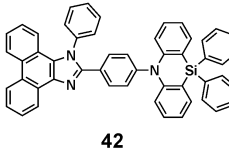
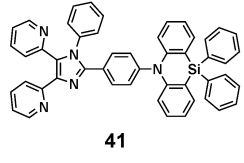
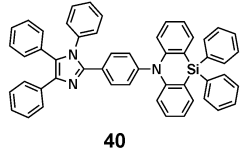
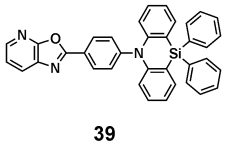
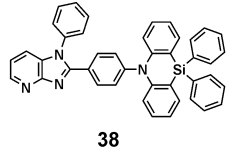
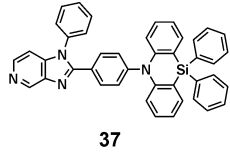
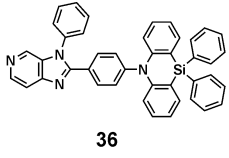
R<sub>71</sub> 및 R<sub>72</sub>에 관한 설명은 제8항 중 R<sub>7</sub>에 관한 설명을 참조한다.

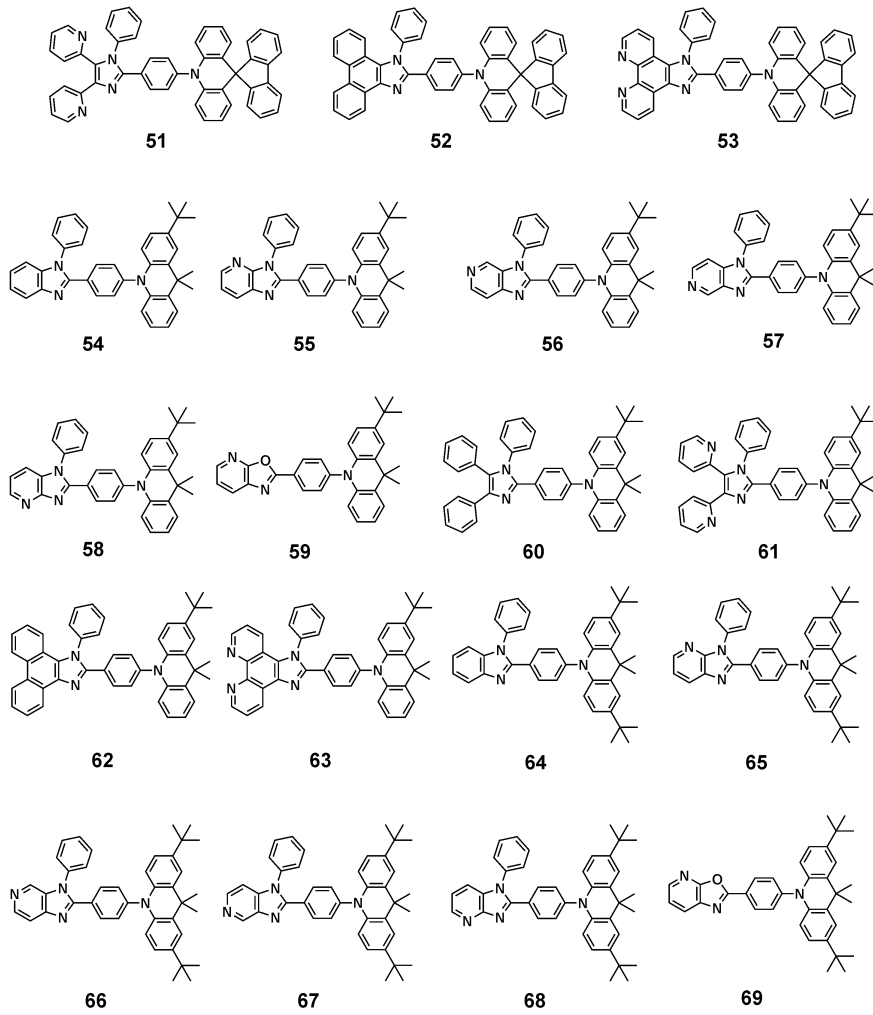
**청구항 20**

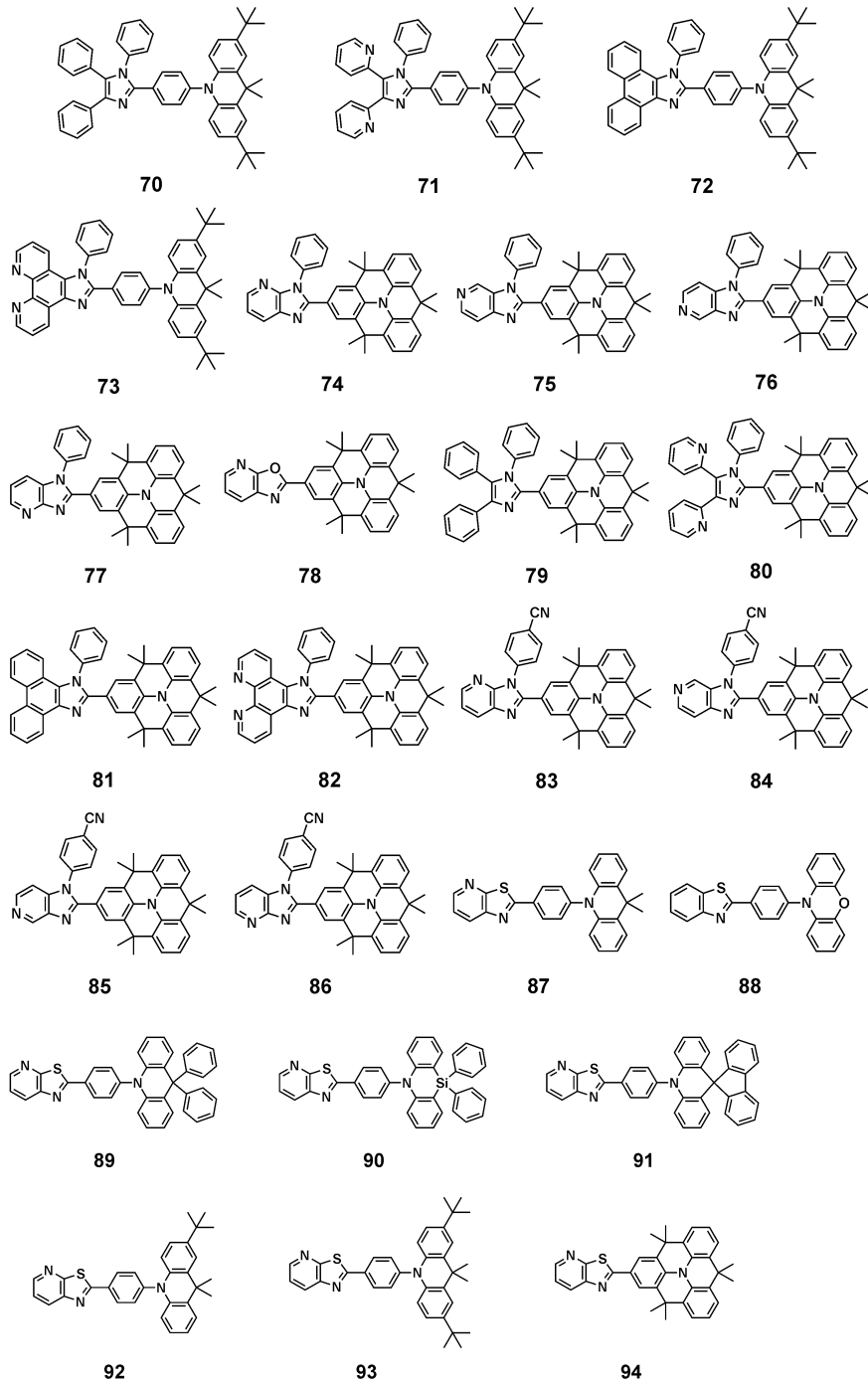
제8항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 94 중에서 선택된, 헤테로시클릭 화합물:









**발명의 설명**

**기술 분야**

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

**배경 기술**

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

[0003] 상기 유기 발광 소자는 기판 상부에 제1전극이 배치되어 있고, 상기 제1전극 상부에 정공 수송 영역(hole transport region), 발광층, 전자 수송 영역(electron transport region) 및 제2전극이 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 상기 제1전극으로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동

하고, 제2전극으로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

**발명의 내용**

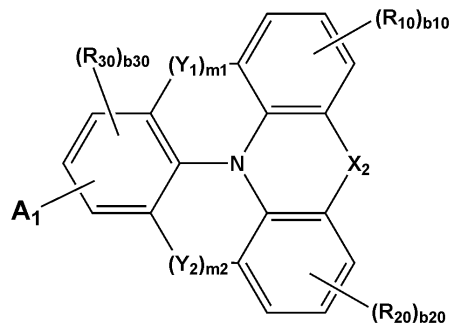
**해결하려는 과제**

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

**과제의 해결 수단**

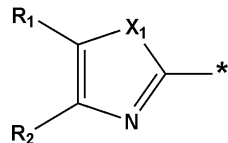
[0005] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물이 제공된다:

[0006] <화학식 1>



[0007]

[0008] <화학식 2>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1 중,

[0011] A<sub>1</sub>은 상기 화학식 2로 표시되는 그룹이고,

[0012] 상기 화학식 1 및 2 중,

[0013] X<sub>1</sub>은 O, S 또는 N(R<sub>3</sub>)이고,

[0014] X<sub>2</sub>는 O, S, N(R<sub>4</sub>), C(R<sub>4</sub>)(R<sub>5</sub>) 또는 Si(R<sub>4</sub>)(R<sub>5</sub>)이고,

[0015] Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, C(R<sub>6</sub>)(R<sub>7</sub>) 또는 Si(R<sub>6</sub>)(R<sub>7</sub>)이고,

[0016] m<sub>1</sub>은 0 또는 1이고,

[0017] m<sub>2</sub>는 0 또는 1이고,

[0018] R<sub>3</sub>은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group), -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 및 -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되고,

- [0019] R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group), -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 및 -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되거나,
- [0020] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub> 중 이웃한 2 이상의 치환기가 선택적으로(optionally) 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub> 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성하고,
- [0021] m<sub>1</sub> 및 m<sub>2</sub>가 각각 1인 경우에, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성하고,
- [0022] b<sub>10</sub>, b<sub>20</sub> 및 b<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 1 내지 4 중에서 선택된 정수이고,
- [0023] 상기 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴옥시기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0024] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0025] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0026] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0027] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환

그룹; 및

[0028]  $-\text{Si}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})(\text{Q}_{33})$ ,  $-\text{N}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$ ,  $-\text{B}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$ ,  $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{31})$ ,  $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{31})$  및  $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$ ;

[0029] 중에서 선택되고,

[0030] 상기  $\text{Q}_1$  내지  $\text{Q}_3$ ,  $\text{Q}_{11}$  내지  $\text{Q}_{13}$ ,  $\text{Q}_{21}$  내지  $\text{Q}_{23}$  및  $\text{Q}_{31}$  내지  $\text{Q}_{33}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소,  $-\text{F}$ ,  $-\text{Cl}$ ,  $-\text{Br}$ ,  $-\text{I}$ , 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{60}$ 알킬기,  $\text{C}_2$ - $\text{C}_{60}$ 알케닐기,  $\text{C}_2$ - $\text{C}_{60}$ 알키닐기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{60}$ 알콕시기,  $\text{C}_3$ - $\text{C}_{10}$ 시클로알킬기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기,  $\text{C}_3$ - $\text{C}_{10}$ 시클로알케닐기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기,  $\text{C}_6$ - $\text{C}_{60}$ 아릴기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

[0031] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시된 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

### 발명의 효과

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

### 도면의 간단한 설명

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

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0034] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다. 본 발명의 효과 및 특징, 그리고 그것들을 달성하는 방법은 도면과 함께 상세하게 후술되어 있는 실시예들을 참조하면 명확해질 것이다. 그러나 본 발명은 이하에서 개시되는 실시예들에 한정되는 것이 아니라 다양한 형태로 구현될 수 있다.

[0035] 이하, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시예들을 상세히 설명하기로 하며, 도면을 참조하여 설명할 때 동일하거나 대응하는 구성 요소는 동일한 도면부호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다.

[0036] 이하의 실시예에서, 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.

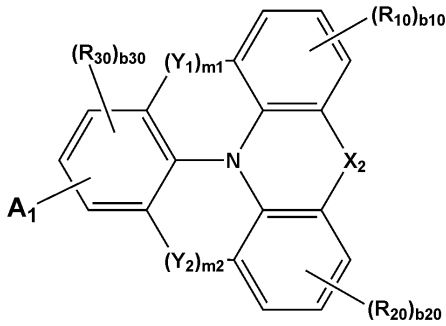
[0037] 이하의 실시예에서, 포함하다 또는 가지다 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 또는 구성요소가 존재함을 의미하는 것이고, 하나 이상의 다른 특징들 또는 구성요소가 부가될 가능성을 미리 배제하는 것은 아니다.

[0038] 이하의 실시예에서, 막, 영역, 구성 요소 등의 부분이 다른 부분 위에 또는 상에 있다고 할 때, 다른 부분의 바로 위에 있는 경우뿐만 아니라, 그 중간에 다른 막, 영역, 구성 요소 등이 개재되어 있는 경우도 포함한다.

[0039] 도면에서는 설명의 편의를 위하여 구성 요소들이 그 크기가 과장 또는 축소될 수 있다. 예컨대, 도면에서 나타난 각 구성의 크기 및 두께는 설명의 편의를 위해 임의로 나타내었으므로, 본 발명이 반드시 도시된 바에 한정되지 않는다.

[0040] 상기 헤테로시클릭 화합물은, 하기 화학식 1로 표시된다:

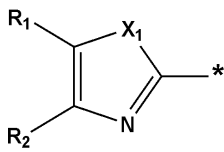
[0041] <화학식 1>



[0042]

[0043] 상기 화학식 1 중, A<sub>1</sub>은 화학식 2로 표시되는 그룹이다.

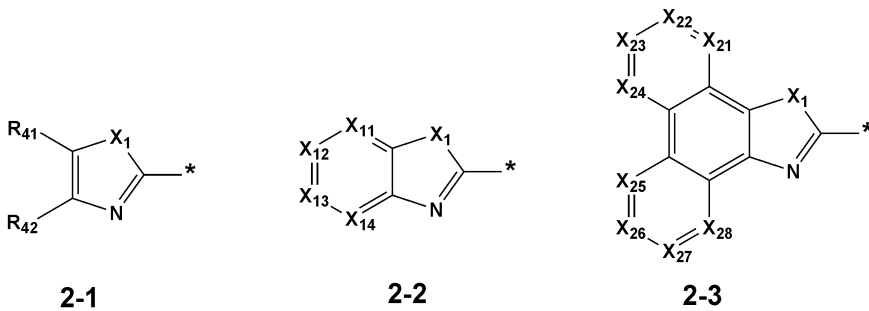
[0044] <화학식 2>



[0045]

[0046] 상기 화학식 2 중, X<sub>1</sub>은 O, S 또는 N(R<sub>3</sub>)이다.

[0047] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중 A<sub>1</sub>은 하기 화학식 2-1 내지 2-3 중에서 선택된 어느 하나로 표시될 수 있다:



[0048]

[0049] 상기 화학식 2-1 내지 2-3 중,

[0050] X<sub>1</sub>에 관한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0051] X<sub>11</sub>은 N 또는 C(R<sub>51</sub>)이고, X<sub>12</sub>는 N 또는 C(R<sub>52</sub>)이고, X<sub>13</sub>은 N 또는 C(R<sub>53</sub>)이고, X<sub>14</sub>는 N 또는 C(R<sub>54</sub>)이고,

[0052] X<sub>21</sub>은 N 또는 C(R<sub>61</sub>)이고, X<sub>22</sub>는 N 또는 C(R<sub>62</sub>)이고, X<sub>23</sub>은 N 또는 C(R<sub>63</sub>)이고, X<sub>24</sub>는 N 또는 C(R<sub>64</sub>)이고, X<sub>25</sub>는 N 또는 C(R<sub>65</sub>)이고, X<sub>26</sub>은 N 또는 C(R<sub>66</sub>)이고, X<sub>27</sub>은 N 또는 C(R<sub>67</sub>)이고, X<sub>28</sub>은 N 또는 C(R<sub>68</sub>)이고,

[0053] 상기 화학식 1 중 m<sub>1</sub> 및 m<sub>2</sub>가 각각 1인 경우에, X<sub>11</sub> 내지 X<sub>14</sub> 중 적어도 하나가 N이고,

[0054] \*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

[0055] R<sub>41</sub>, R<sub>42</sub>, R<sub>51</sub> 내지 R<sub>54</sub> 및 R<sub>61</sub> 내지 R<sub>68</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, 및 tert-부톡시기;

[0056] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로

폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

[0057] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토피라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기;

[0058] 중에서 선택된다.

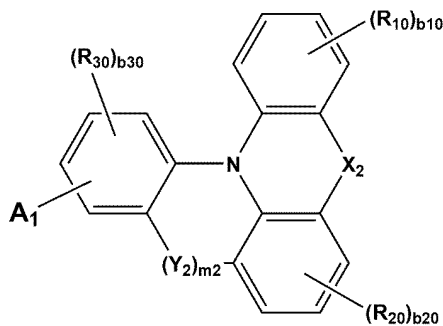
[0059] 상기 화학식 1 중,  $X_2$ 는 O, S,  $N(R_4)$ ,  $C(R_4)(R_5)$  또는  $Si(R_4)(R_5)$ 이다.

[0060] 상기 화학식 1 중,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 서로 독립적으로,  $C(R_6)(R_7)$  또는  $Si(R_6)(R_7)$ 이고,  $m_1$ 은 0 또는 1이고,  $m_2$ 는 0 또는 1이다.

[0061] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중,  $m_1$  및  $m_2$ 가 각각 0이거나,  $m_1$  및  $m_2$ 가 각각 1일 수 있다.

[0062] 상기 화학식 1 중  $m_1$ 이 0인 경우에,  $Y_1$ 이 존재하지 않는다. 예를 들어, 상기  $m_1$ 이 0인 경우에, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1A로 표시될 수 있다:

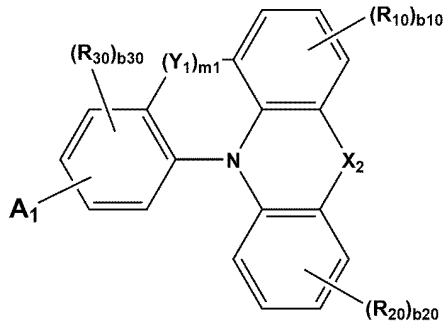
[0063] <화학식 1A>



[0064]

[0065] 상기 화학식 1 중  $m_2$ 이 0인 경우에,  $Y_2$ 가 존재하지 않는다. 예를 들어, 상기  $m_2$ 가 0인 경우에, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1B로 표시될 수 있다:

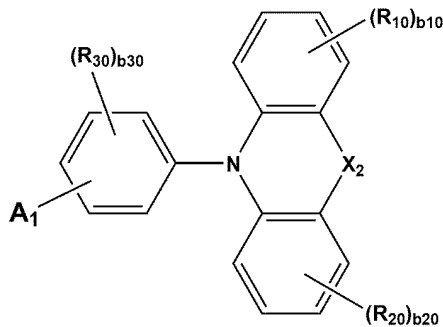
[0066] <화학식 1B>



[0067]

[0068] 또 하나의 예를 들어, 상기 m1 및 m2가 각각 0인 경우에, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1C로 표시될 수 있다:

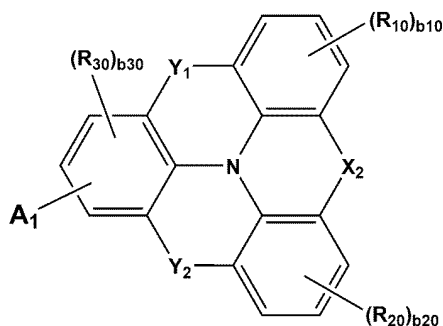
[0069] <화학식 1C>



[0070]

[0071] 또 하나의 예를 들어, 상기 m1 및 m2가 각각 1인 경우에, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1D로 표시될 수 있다:

[0072] <화학식 1D>



[0073]

[0074] 상기 화학식 1A 내지 1D 중,

[0075] A<sub>1</sub>, X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>, Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>, m<sub>1</sub>, m<sub>2</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub>, R<sub>30</sub>, b<sub>10</sub>, b<sub>20</sub> 및 b<sub>30</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0076] 상기 화학식 2 중, R<sub>3</sub>은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group), -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 및 -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택된다.

[0077] 일 구현예를 따르면, 상기 R<sub>3</sub>은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프

로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, 및 tert-부톡시기;

[0078] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

[0079] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥실기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기 및 펜타세닐기; 및

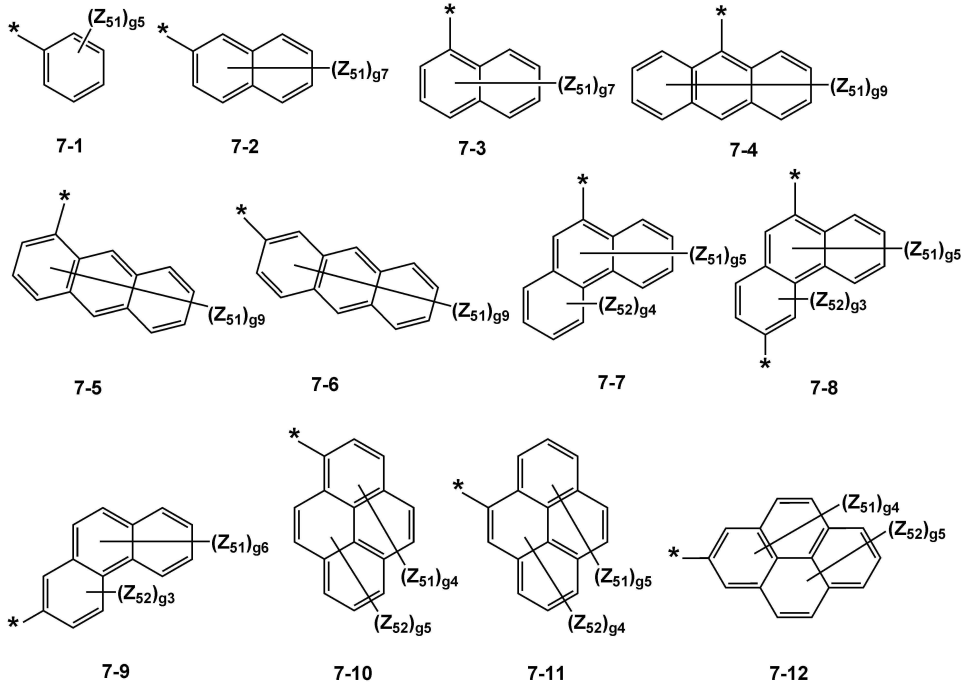
[0080] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, tert-부톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥실기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 벤조퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토티라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>), -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 및 -P(=S)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥실기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기 및 펜타세닐기;

[0081] 중에서 선택될 수 있다.

[0082] 일 구현예를 따르면, 상기 R<sub>3</sub>은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0083] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기; 및

[0084] 하기 화학식 7-1 내지 7-12 중 어느 하나로 표시된 그룹; 중에서 선택될 수 있다:



[0085]

[0086] 상기 화학식 7-1 내지 7-12 중,

[0087]  $Y_{51}$ 은 O, S,  $C(Z_{53})(Z_{54})$ ,  $N(Z_{53})$  또는  $Si(Z_{53})(Z_{54})$ 이고,

[0088]  $Z_{51}$  내지  $Z_{54}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알케닐기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알키닐기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페틸레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,

[0089]  $g_3$ 는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0090]  $g_4$ 는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0091]  $g_5$ 는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0092]  $g_6$ 는 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

[0093]  $g_7$ 은 1 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

[0094]  $g_9$ 는 1 내지 9의 정수 중에서 선택되고,

[0095] \* 은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0096] 상기 화학식 1 및 2 중,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_4$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{20}$  및  $R_{30}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group),  $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ ,  $-B(Q_1)(Q_2)$ ,  $-C(=O)(Q_1)$ ,  $-N(Q_1)(Q_2)$ ,  $P(=O)(Q_1)(Q_2)$  및  $-S(=O)_2(Q_1)(Q_2)$  중에서 선택되거나,

[0097] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub> 중 이웃한 2 이상의 치환기가 선택적으로(optionally) 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub> 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.

[0098] 상기 화학식 1 중, b<sub>10</sub>, b<sub>20</sub> 및 b<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 1 내지 4 중에서 선택된 정수이다.

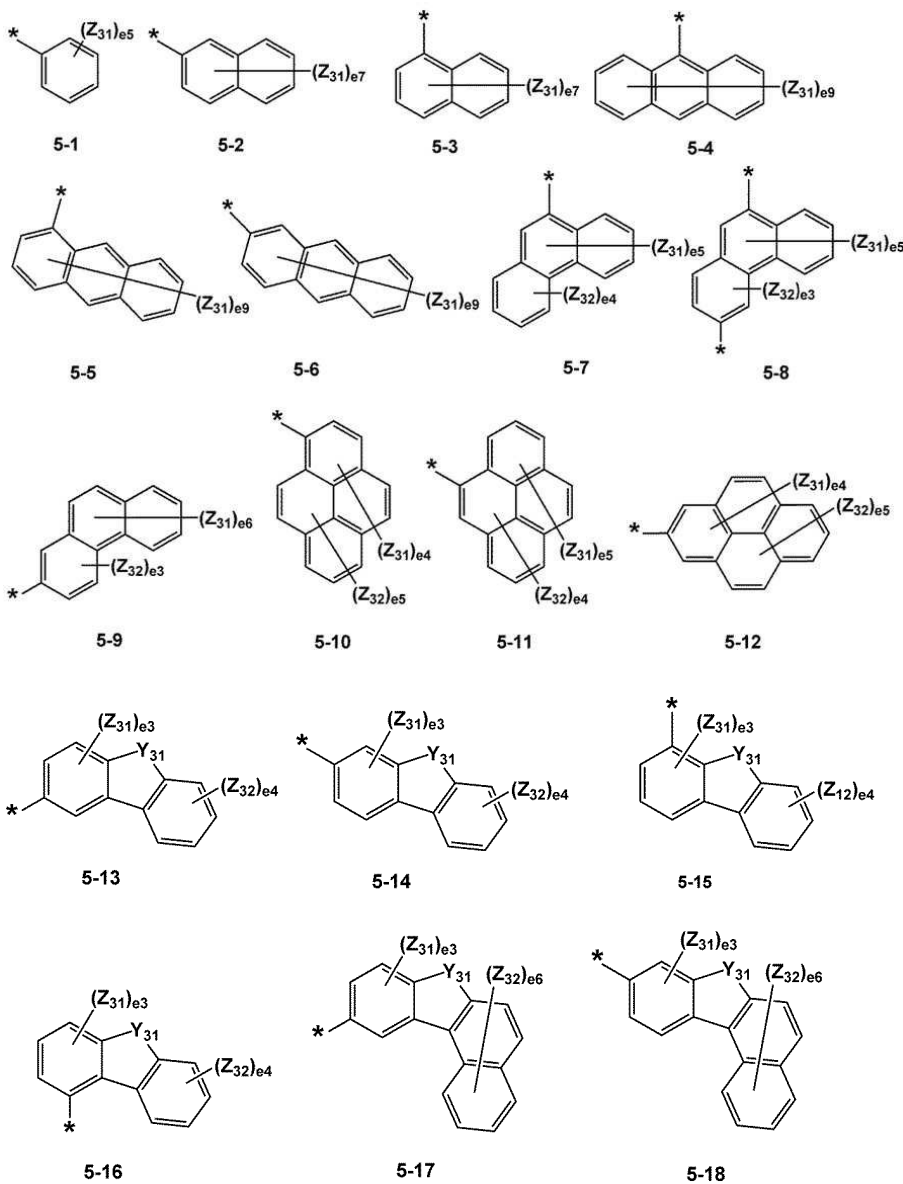
[0099] 일 구현예를 따르면, 상기 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub>은 서로 독립적으로

[0100] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기; 및

[0101] 하기 화학식 5-1 내지 5-26 및 화학식 6-1 내지 6-55 중 어느 하나로 표시된 그룹;

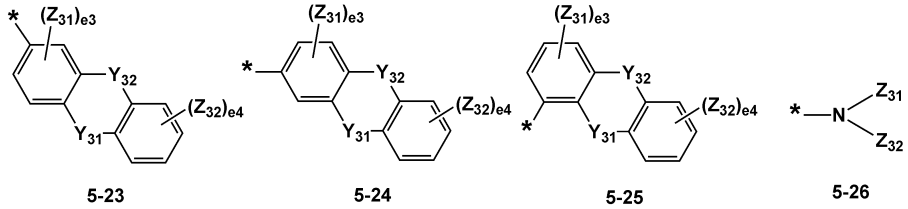
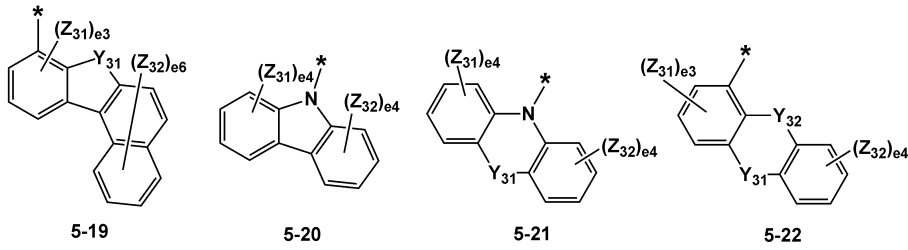
[0102] 중에서 선택되거나,

[0103] R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub> 중 이웃한 2 이상의 치환기가 선택적으로 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub> 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub> 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다:

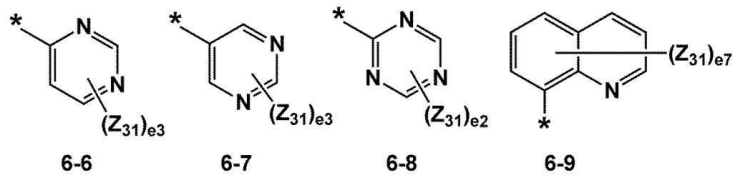
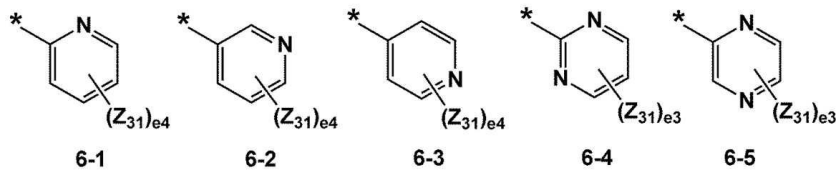


[0104]

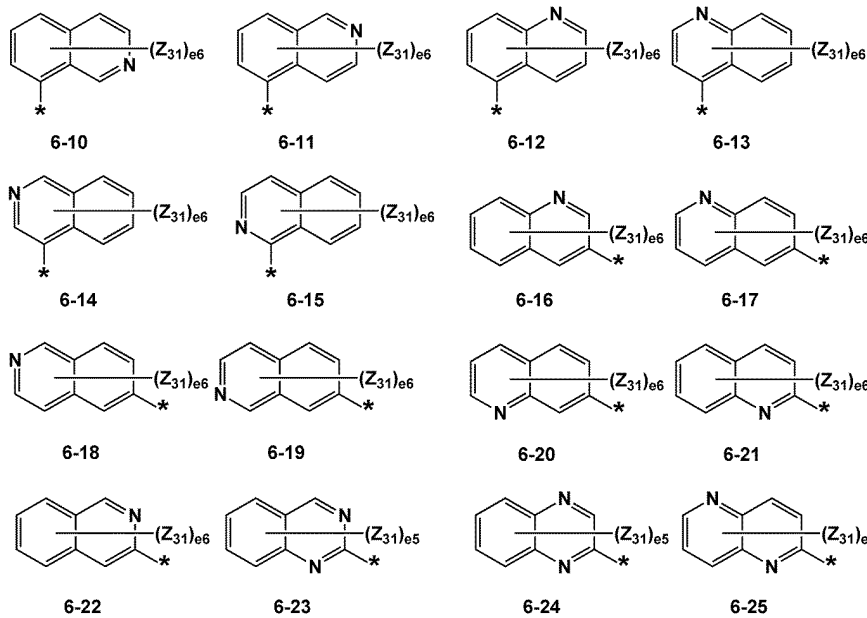
[0105]



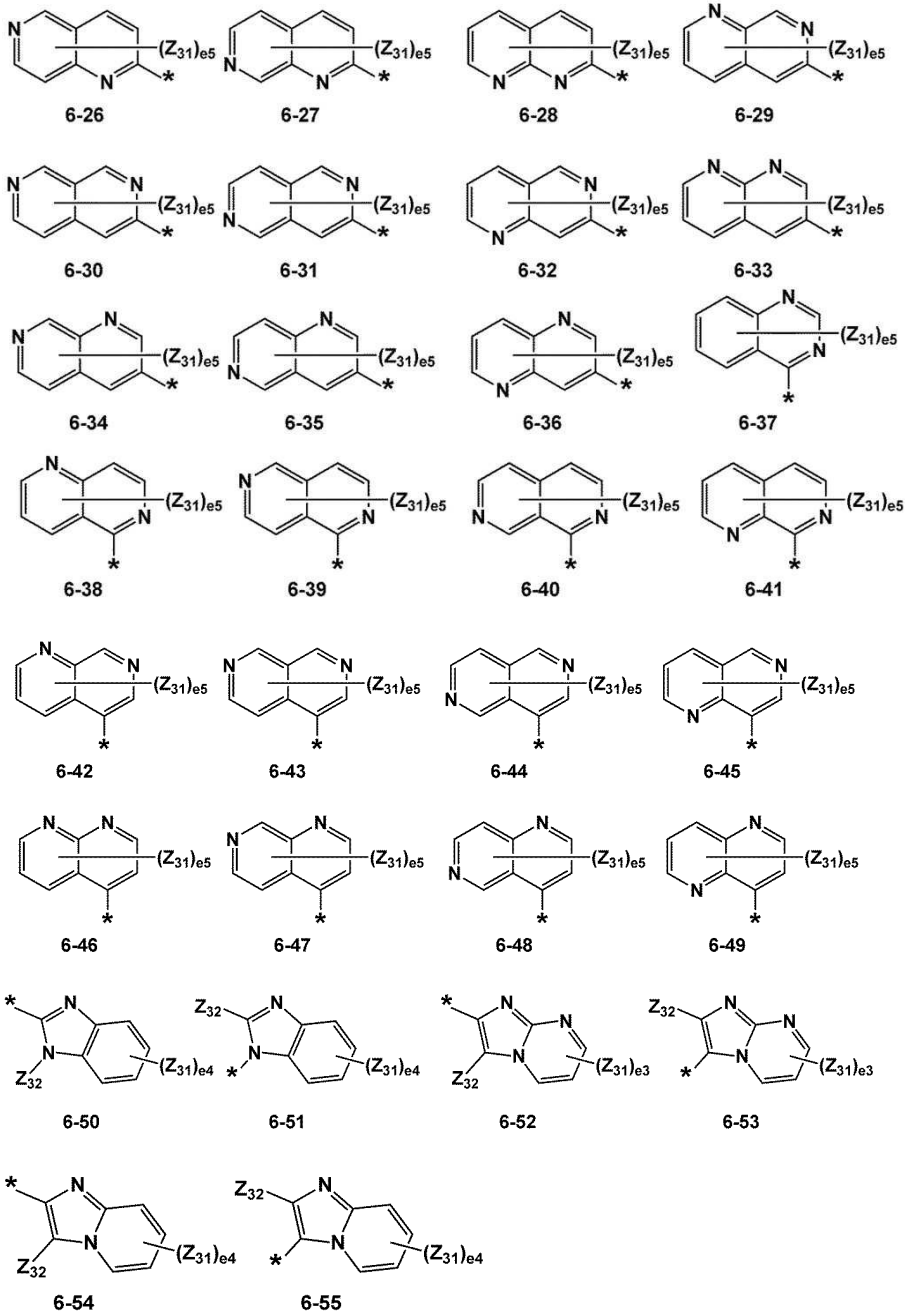
[0106]



[0107]



[0108]



[0109]

[0110]

[0111]

[0112]

[0113]

[0114]

[0115]

[0116]

[0117]

[0118]

[0119]

상기 화학식 5-1 내지 5-26 및 화학식 6-1 내지 6-55 중,

$Y_{31}$ 은 O, S,  $C(Z_{34})(Z_{35})$ ,  $N(Z_{34})$  또는  $Si(Z_{34})(Z_{35})$ 이고,

$Z_{31}$  내지  $Z_{35}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알케닐기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알키닐기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페틸레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,

$e_2$ 는 1 또는 2이고,

$e_3$ 는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

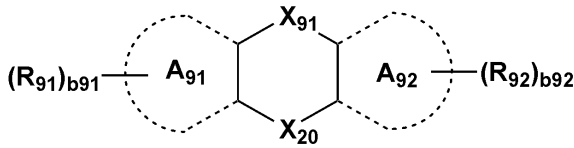
$e_4$ 는 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

$e_5$ 는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

$e_6$ 는 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

- [0120] e7은 1 내지 7의 정수 중에서 선택되고,
- [0121] e9는 1 내지 9의 정수 중에서 선택되고,
- [0122] \* 은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0123] 일 구현예를 따르면, 상기 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 상기 화학식 5-1 내지 5-26 및 화학식 6-1 내지 6-55 중 어느 하나로 표시된 그룹; 중에서 선택되거나,
- [0124] 상기 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>가 선택적으로, 서로 결합하여,
- [0125] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 2,6-나프티리딘 그룹, 1,8-나프티리딘 그룹, 1,5-나프티리딘 그룹, 1,6-나프티리딘 그룹, 1,7-나프티리딘 그룹, 2,7-나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹 및 페난트롤린 그룹; 및
- [0126] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 2,6-나프티리딘 그룹, 1,8-나프티리딘 그룹, 1,5-나프티리딘 그룹, 1,6-나프티리딘 그룹, 1,7-나프티리딘 그룹, 2,7-나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트리딘 그룹 및 페난트롤린 그룹;
- [0127] 중에서 선택된 어느 하나의 고리를 형성할 수 있다.
- [0128] 일 구현예를 따르면, 상기 R<sub>4</sub> 및 R<sub>5</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;
- [0129] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;
- [0130] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기 및 디벤조실롤일기; 및
- [0131] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기 및 디벤조실롤일기;
- [0132] 중에서 선택되거나,
- [0133] 상기 R<sub>4</sub>와 R<sub>5</sub>가 선택적으로, 서로 결합하여, 하기 화학식 9로 표시되는 그룹을 형성할 수 있다:

[0134] <화학식 9>



[0135]

[0136] 상기 화학식 9 중,

[0137]  $X_{20}$ 은 상기  $X_2$  중 C 또는 Si를 나타내고,

[0138]  $X_{91}$ 은 단일 결합, O, S, Se, N( $R_{93}$ ), B( $R_{93}$ ) C( $R_{93}$ )( $R_{94}$ ) 및 Si( $R_{93}$ )( $R_{94}$ ) 중에서 선택되고,

[0139]  $A_{91}$  및  $A_{92}$ 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 디벤조푸란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 플루오렌 그룹 및 카바졸 그룹 중에서 선택되고,

[0140]  $R_{91}$  내지  $R_{94}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si( $Q_1$ )( $Q_2$ )( $Q_3$ ), -N( $Q_1$ )( $Q_2$ ), -B( $Q_1$ )( $Q_2$ ), -C(=O)( $Q_1$ ), -S(=O)<sub>2</sub>( $Q_1$ ) 및 -P(=O)( $Q_1$ )( $Q_2$ ) 중에서 선택되고,

[0141]  $Q_1$  내지  $Q_3$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기,  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알킬기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기,  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고;

[0142]  $b_{91}$  및  $b_{92}$ 는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택된다.

[0143] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 9 중  $A_{91}$  및  $A_{92}$ 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 디벤조푸란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 플루오렌 그룹 및 카바졸 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0144] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 9 중  $R_{91}$  내지  $R_{94}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, tert-부톡시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴어로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오페닐기 및 디벤조실릴일기 중에서 선택될 수 있다.

[0145] 일 구현예를 따르면, 상기  $R_6$  및  $R_7$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기, 및 tert-부톡시기; 및

[0146] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, iso-프로폭시기, n-부톡시기, sec-부톡시기, iso-부톡시기 및 tert-부톡시기;

[0147] 중에서 선택될 수 있다.

[0148] 일 구현예를 따르면, 상기 R<sub>10</sub>, R<sub>20</sub> 및 R<sub>30</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기 및 tert-부틸기;

[0149] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기 및 tert-부틸기;

[0150] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기 및 디벤조실롤일기;

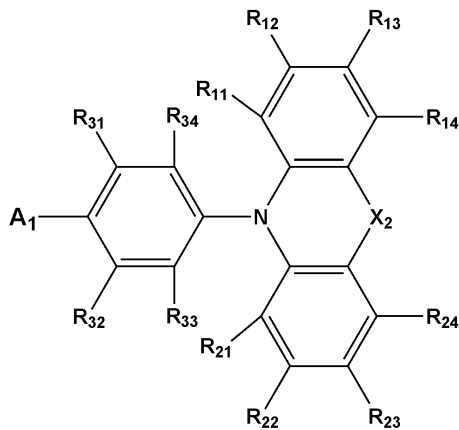
[0151] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기 및 디벤조실롤일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기 및 디벤조실롤일기; 및

[0152] -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>);

[0153] 중에서 선택될 수 있다.

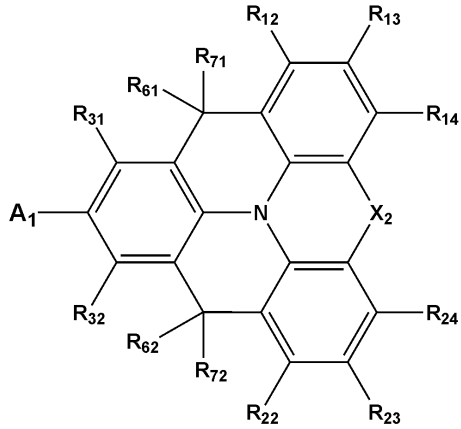
[0154] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 하기 화학식 10A 또는 10B로 표시되는 화합물일 수 있다:

[0155] <화학식 10A>



[0156]

[0157] <화학식 10B>



[0158]

[0159] 상기 화학식 10A 및 10B 중,

[0160] A<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>에 관한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0161] R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>에 관한 설명은 R<sub>10</sub>에 관한 설명을 참조하고,

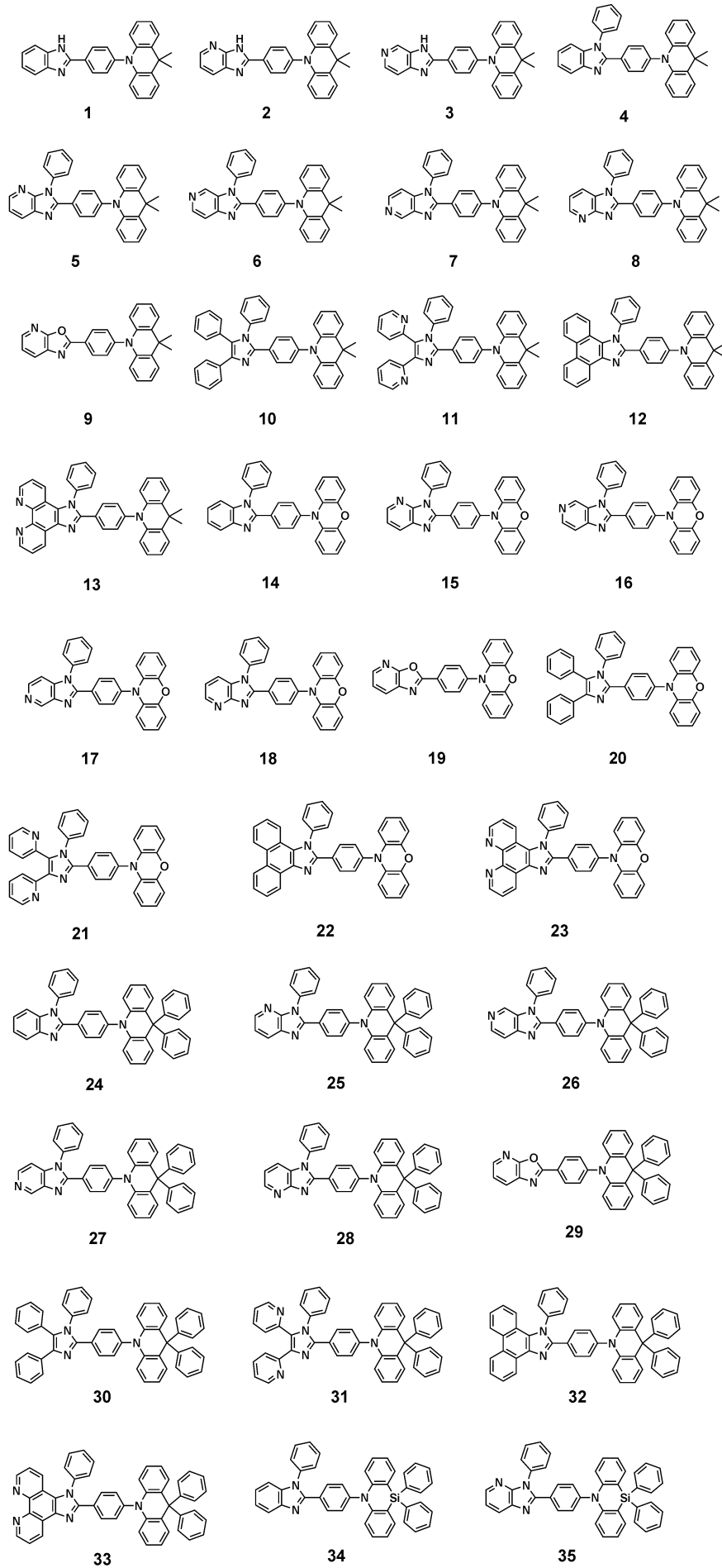
[0162] R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>에 관한 설명은 R<sub>20</sub>에 관한 설명을 참조하고,

[0163] R<sub>31</sub> 내지 R<sub>34</sub>에 관한 설명은 R<sub>30</sub>에 관한 설명을 참조하고,

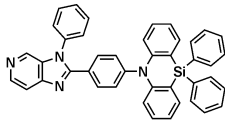
[0164] R<sub>61</sub> 및 R<sub>62</sub>에 관한 설명은 R<sub>6</sub>에 관한 설명을 참조하고,

[0165] R<sub>71</sub> 및 R<sub>72</sub>에 관한 설명은 R<sub>7</sub>에 관한 설명을 참조한다.

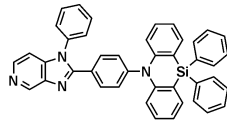
[0166] 일 구현예에 따르면, 상기 헤테로시클릭 화합물은 하기 화합물 1 내지 94 중에서 선택될 수 있다:



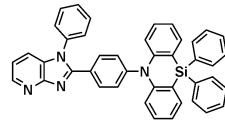
[0168]



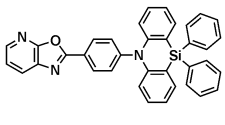
36



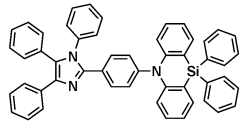
37



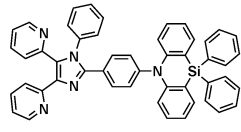
38



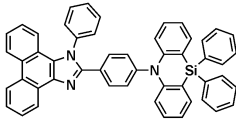
39



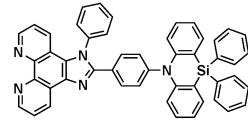
40



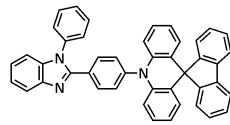
41



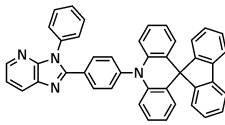
42



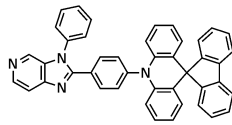
43



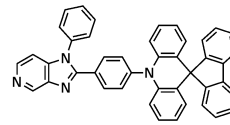
44



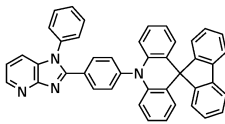
45



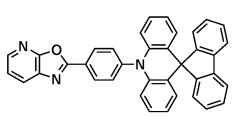
46



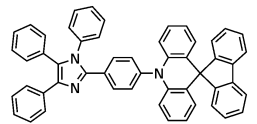
47



48

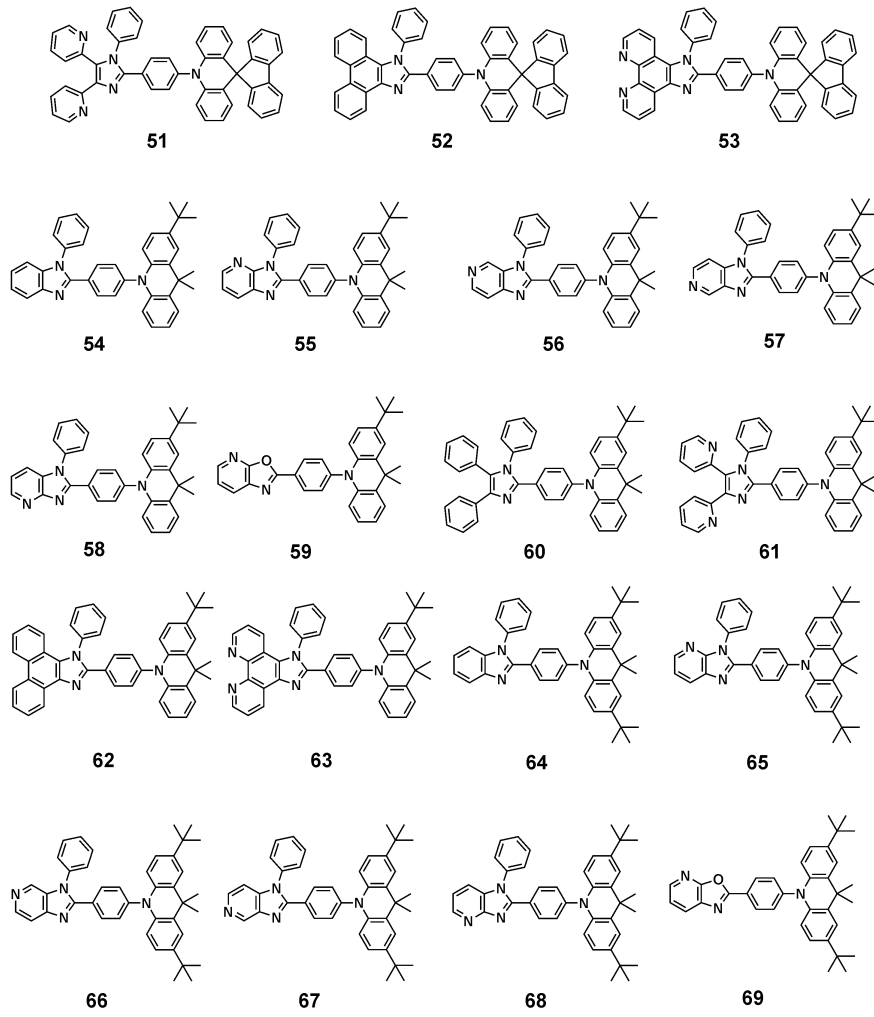


49

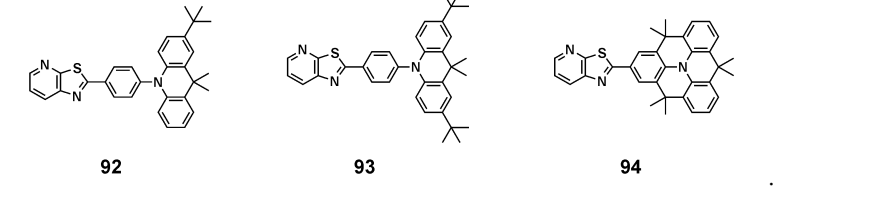
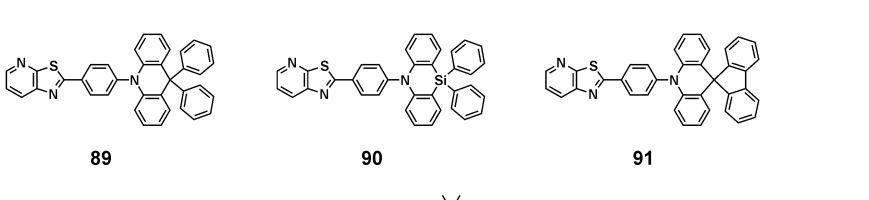
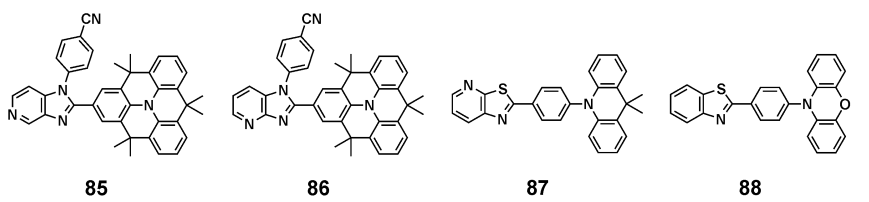
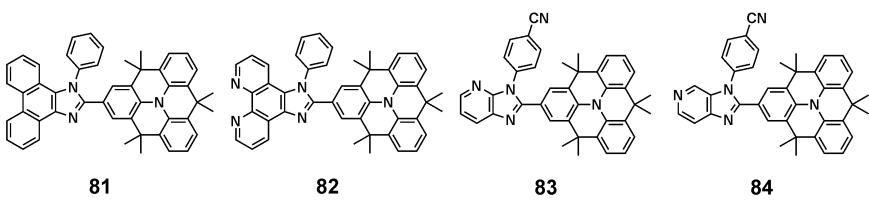
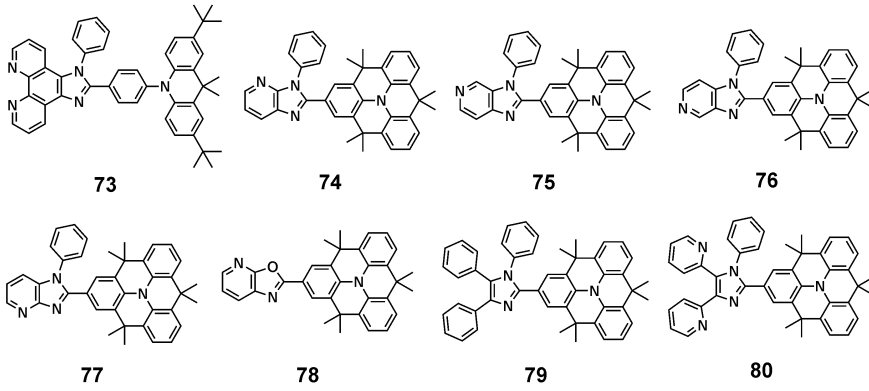
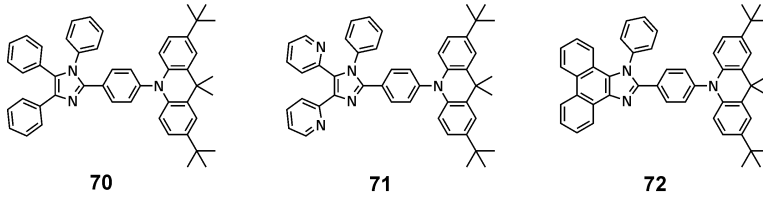


50

[0169]



[0170]



[0171]

[0172]

[0173]

[0174]

[0175]

상기 헤테로시클릭 화합물은 상기 화학식 1 중 A<sub>1</sub>으로 표시되는 전자 받개(electron acceptor) 모이어티와 상기 화학식 1의 코어 구조로 표시되는 전자 주개(electron donor) 모이어티를 포함하여, 분자 내 전하 이동이 쉽게 이루어질 수 있어 발광 효율이 향상된다. 또한, 전자주개 모이어티에서 전자받개 모이어티로 쌍극자(dipole)가 형성되어 분자 내부의 쌍극자 모멘트(dipole moment)가 증가됨으로써, 광효율이 더욱 상승된다.

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

나아가, 상기 헤테로시클릭 화합물은 상대적으로 높은 전하(정공 또는 전자) 수송 능력을 가지므로, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 채용한 유기 발광 소자 중 발광층 내에서의 엑시톤 형성 비율이 향상될

수 있어, 상기 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 장수명 및 높은 최대 양자 효율을 가질 수 있다.

- [0176] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0177] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 헤테로시클릭 화합물은 정공 수송 영역, 전자 수송 영역 및 발광층 중 적어도 하나에 포함될 수 있다. 또는, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극의 외측에 위치한 캡핑층 재료로 사용될 수 있다.
- [0178] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물을 1 종 이상 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0179] 본 명세서 중 "(유기층)이 헤테로시클릭 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층)이 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 헤테로시클릭 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0180] 예를 들어, 상기 유기층은, 상기 헤테로시클릭 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 헤테로시클릭 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1은 발광층에 존재하고 상기 화합물 2는 전자 수송층에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0181] 일 구현예에 따르면, 상기 제1전극이 애노드이고, 상기 제2전극이 캐소드이고, 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 배치된 전자 수송 영역을 더 포함하고, 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,
- [0182] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0183] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 발광층이 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함할 수 있다.
- [0184] 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 발광층이 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함하고, 상기 발광층에 포함된 상기 헤테로시클릭 화합물은 지연 형광 에미터(TADF emitter)이고, 상기 발광층이 지연 형광을 방출할 수 있다.
- [0185] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 발광층이 상기 헤테로시클릭 화합물로 이루어지거나(consist of); 또는 상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층 100중량부 당 상기 헤테로시클릭 화합물의 함량이 0.1중량부 내지 50중량부일 수 있다.
- [0186] 예를 들어, 상기 발광층이 상기 헤테로시클릭 화합물로 이루어지고, 상기 헤테로시클릭 화합물이 지연 형광 에미터이고, 상기 지연 형광 에미터는 하기 수식 1을 만족할 수 있다.
- [0187] <수식 1>
- [0188]  $|E_{D, S1} - E_{D, T1}| \leq 0.3 \text{ eV}$
- [0189] 상기 수식 1 중
- [0190]  $E_{D, S1}$ 는 상기 지연 형광 에미터의 일중항 에너지(eV)이고
- [0191]  $E_{D, T1}$ 는 상기 지연 형광 에미터의 삼중항 에너지(eV)이다.
- [0192] 상기 지연 형광 에미터 즉, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물의 단일항 에너지( $E_{D, S1}$ )와 삼중항 에너지( $E_{D, T1}$ )의 차이는 0.3 eV 이하이므로, 전계에 의해 생성된 단일항 상태 여기자 및 삼중항 상태 여기자가 중간 상태로 용이하게 전이될 수 있고 이에 따라 상기 헤테로시클릭 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 발광 효율이 우수하다.
- [0193] 다른 예를 들어, 상기 발광층이 상기 헤테로시클릭 화합물 및 호스트를 포함하고, 상기 헤테로시클릭 화합물이

지연 형광 에미터이고, 상기 지연 형광 에미터 및 상기 호스트는 하기 수식 2 또는 3을 만족할 수 있다.

- [0194] <수식 2>
- [0195]  $|E_{H, HOMO} - E_{D, HOMO}| \leq 0.5 \text{ eV}$
- [0196] <수식 3>
- [0197]  $|E_{H, LUMO} - E_{D, LUMO}| \leq 0.5 \text{ eV}$
- [0198] 상기 수식 2 및 3 중
- [0199]  $E_{H, HOMO}$ 는 상기 호스트의 최고준위 점유 분자궤도 레벨이고,
- [0200]  $E_{D, HOMO}$ 는 상기 도펀트의 최고준위 점유 분자궤도 레벨이고,
- [0201]  $E_{H, LUMO}$ 는 상기 호스트의 최저준위 점유 분자궤도 레벨이고,
- [0202]  $E_{D, LUMO}$ 는 상기 도펀트의 최저준위 점유 분자궤도 레벨이다.
- [0203] 상기 지연 형광 에미터 즉, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로시클릭 화합물 및 상기 호스트의 최고준위 점유 분자궤도 레벨의 차이 또는 최저준위 점유 분자궤도 레벨의 차이는 0.5 eV 이하이므로, 상기 호스트에서 상기 지연 형광 에미터로의 전하 이동이 용이하고, 이에 따라 상기 헤테로시클릭 화합물 및 호스트를 채용한 유기 발광 소자는 발광 효율이 우수하다.
- [0204] 상기 발광층 중 호스트는 안트라센계 화합물, 파이렌계 화합물, 스파이로-바이플루오렌계 화합물, 카바졸계 화합물, 벤즈이미다졸계 화합물 및 포스핀옥사이드계 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0205] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 발광층이 상기 헤테로시클릭 화합물을 포함하고, 상기 발광층이 최대 발광 파장이 400nm 이상 500nm 이하인 청색광을 방출할 수 있다.
- [0206] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 정공 수송 영역이 p-도펀트를 포함하고, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다.
- [0207] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 전자 수송 영역이 포스핀옥사이드계 화합물 및 벤즈이미다졸계 화합물 중 적어도 하나를 포함하고,
- [0208] 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체, 또는 이들 중 임의의 조합을 더 포함할 수 있다.
- [0209] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.
- [0210] [도 1에 대한 설명]
- [0211] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 유기 발광 소자(10)는 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)을 포함한다.
- [0212] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0213] [제1전극(110)]
- [0214] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기관이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기관으로는, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기관 또는 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.
- [0215] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기관 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록, 제1전극용 물질은, 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다.
- [0216] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을

형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0217] 상기 제1전극(110)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0218] [유기층(150)]

[0219] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.

[0220] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극(110)과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.

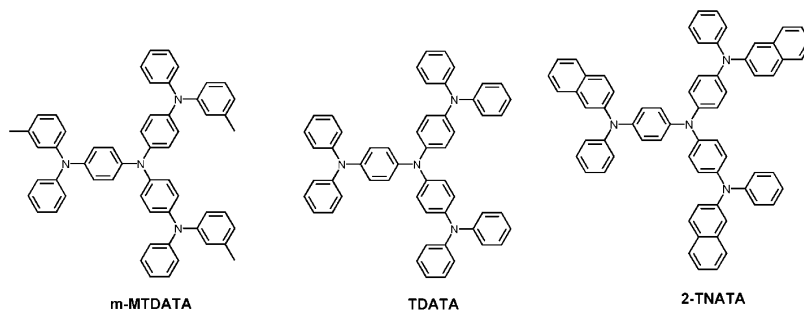
[0221] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]

[0222] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

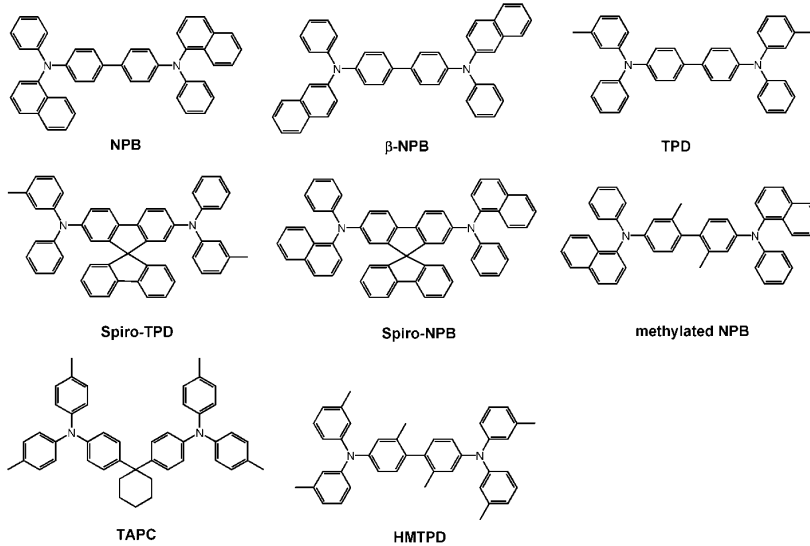
[0223] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.

[0224] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조를 갖거나, 제1전극(110)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/발광 보조층, 정공 주입층/발광 보조층, 정공 수송층/발광 보조층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 다층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0225] 상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine (4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민)), PANI/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐린/도데실벤젠설포닉산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트))), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페르설포닉산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트))), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다:



[0226]



[0227]

[0228] <화학식 201>

[0229]

[0230] <화학식 202>

[0231]

[0232] 상기 화학식 201 및 202 중,

[0233]

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

[0234]

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

[0235]

$xa_1$  내지  $xa_4$ 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0236]

$xa_5$ 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

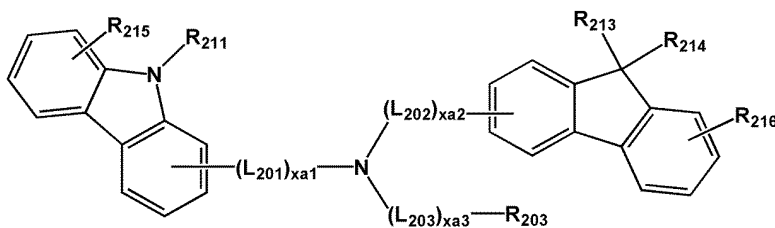
[0237]

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

- [0238] 예를 들어, 상기 화학식 202 중  $R_{201}$ 과  $R_{202}$ 는, 선택적으로(optionally), 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있고,  $R_{203}$ 과  $R_{204}$ 는, 선택적으로, 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0239] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,
- [0240]  $L_{201}$  내지  $L_{205}$ 는 서로 독립적으로,
- [0241] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기; 및
- [0242] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si( $Q_{31}$ )( $Q_{32}$ )( $Q_{33}$ ) 및 -N( $Q_{31}$ )( $Q_{32}$ ) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;
- [0243] 중에서 선택되고,
- [0244] 상기  $Q_{31}$  내지  $Q_{33}$ 은 서로 독립적으로,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0245] 다른 구현예에 따르면,  $xa_1$  내지  $xa_4$ 는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0246] 또 다른 구현예에 따르면,  $xa_5$ 는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.
- [0247] 또 다른 구현예에 따르면,  $R_{201}$  내지  $R_{204}$  및  $Q_{201}$ 은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0248] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐

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

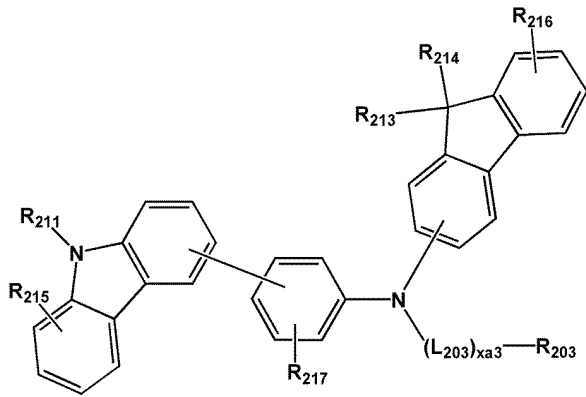
- [0249]       중에서 선택될 수 있고,
- [0250]       상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0251]       또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R<sub>201</sub> 내지 R<sub>203</sub> 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0252]       플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및
- [0253]       중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;
- [0254]       중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0255]       또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R<sub>201</sub>과 R<sub>202</sub>은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R<sub>203</sub>과 R<sub>204</sub>은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0256]       또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R<sub>201</sub> 내지 R<sub>204</sub> 중 적어도 하나는,
- [0257]       카바졸일기; 및
- [0258]       중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;
- [0259]       중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0260]       상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:
- [0261]       <화학식 201A>



- [0262]       [0263]       예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것

은 아니다:

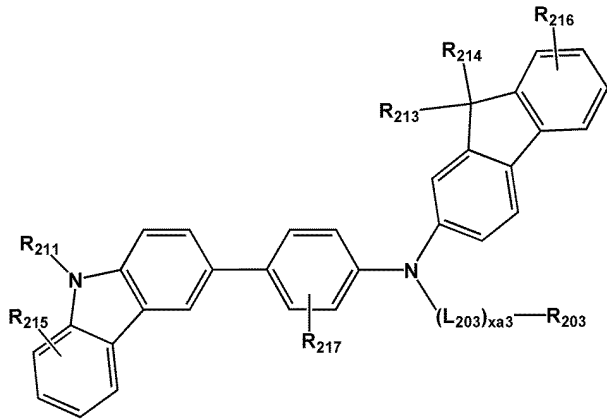
[0264] <화학식 201A(1)>



[0265]

[0266] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

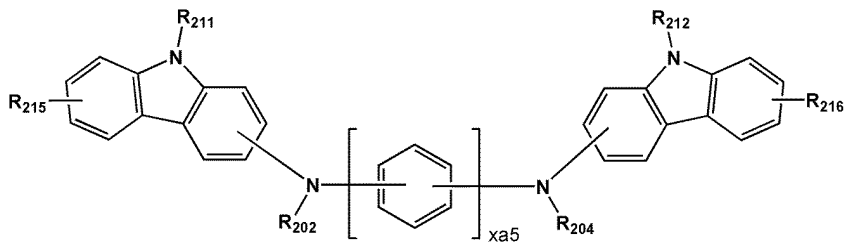
[0267] <화학식 201A-1>



[0268]

[0269] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

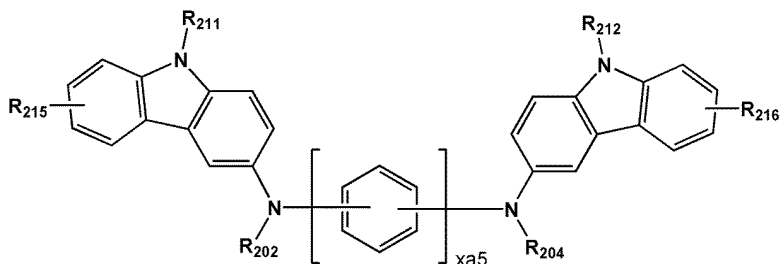
[0270] <화학식 202A>



[0271]

[0272] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0273] <화학식 202A-1>



[0274]

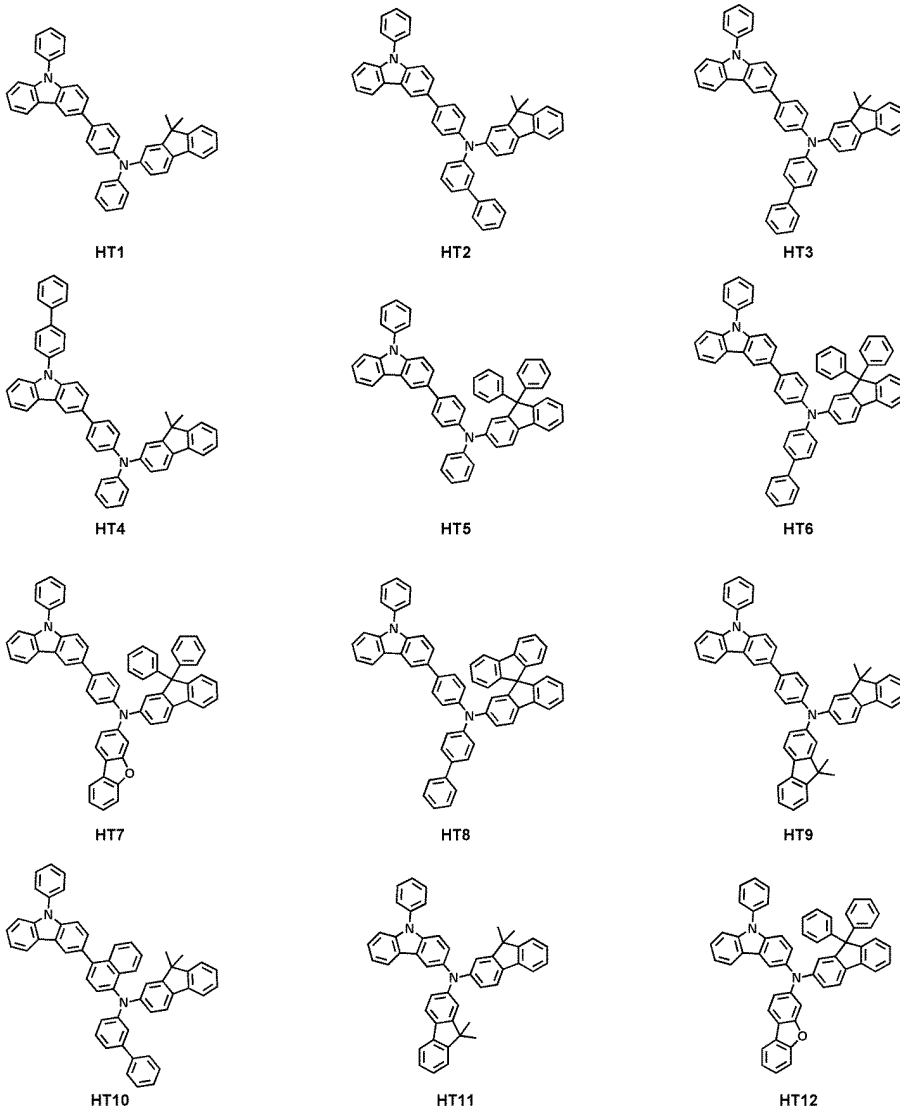
[0275] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

[0276] L<sub>201</sub> 내지 L<sub>203</sub>, xa1 내지 xa3, xa5 및 R<sub>202</sub> 내지 R<sub>204</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

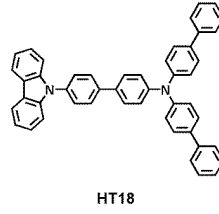
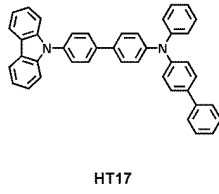
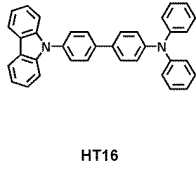
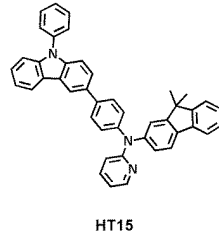
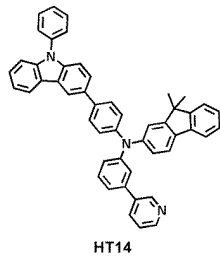
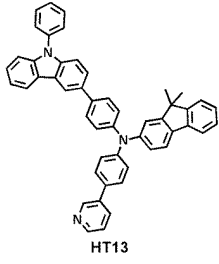
[0277] R<sub>211</sub> 및 R<sub>212</sub>에 대한 설명은 본 명세서 중 R<sub>203</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0278] R<sub>213</sub> 내지 R<sub>217</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헨테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

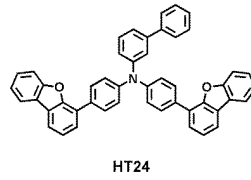
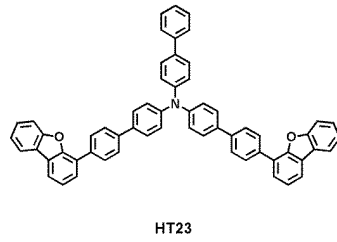
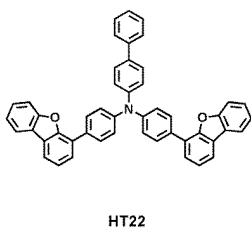
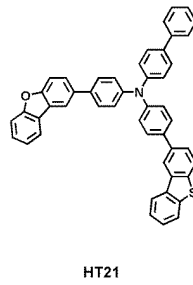
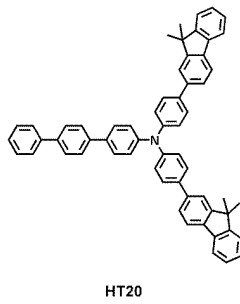
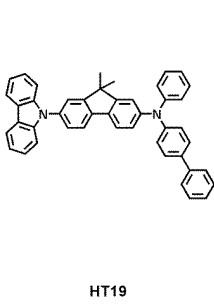
[0279] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



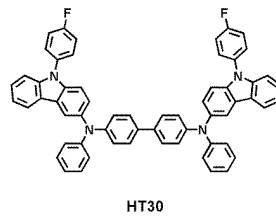
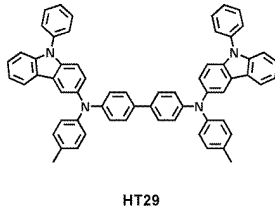
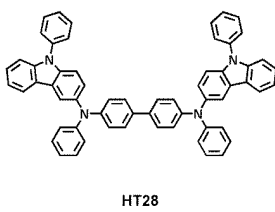
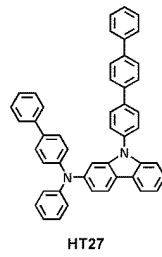
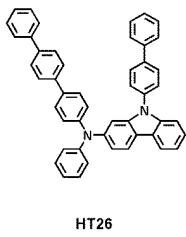
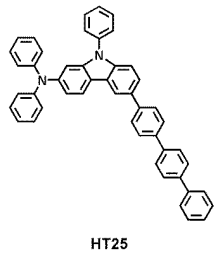
[0281]



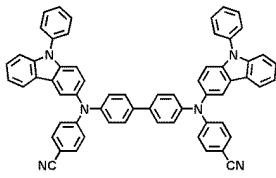
[0282]



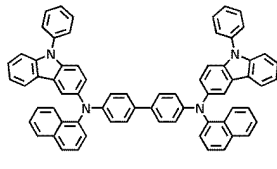
[0283]



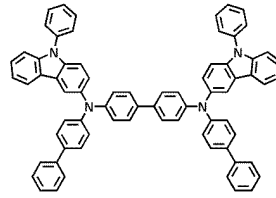
[0284]



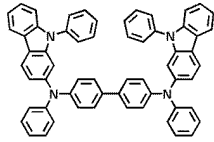
HT31



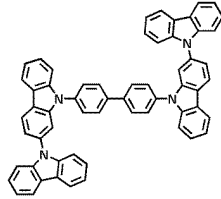
HT32



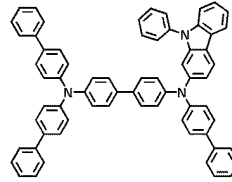
HT33



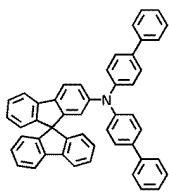
HT34



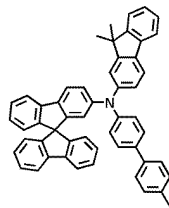
HT35



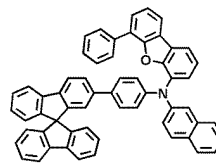
HT36



HT37



HT38



HT39

[0285]

[0286]

[0287]

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

[0288]

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

[0289]

[p-도펀트]

[0290]

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.

[0291]

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0292]

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

[0293]

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

[0294]

예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0295]

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

[0296]

텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

[0297]

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

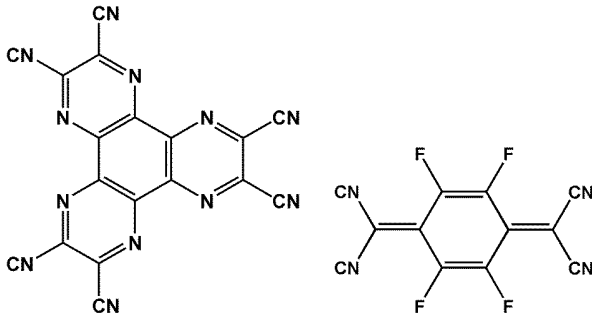
[0298]

하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

[0299]

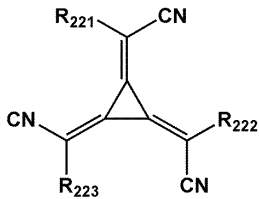
중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0300] <HAT-CN> <F4-TCNQ>



[0301]

[0302] <화학식 221>



[0303]

[0304] 상기 화학식 221 중,

[0305] R<sub>221</sub> 내지 R<sub>223</sub>은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R<sub>221</sub> 내지 R<sub>223</sub> 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, -Cl로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, -Br로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 -I로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0306] [유기층(150) 중 발광층]

[0307] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

[0308] 상기 발광층은 지연 형광 에미터를 포함할 수 있고, 전술한 헤테로시클릭 화합물이 상기 지연 형광 에미터에 포함될 수 있다.

[0309] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 지연 형광 도펀트를 포함할 수 있고, 전술한 헤테로시클릭 화합물이 상기 지연 형광 에미터에 포함될 수 있다.

[0310] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0311] 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.

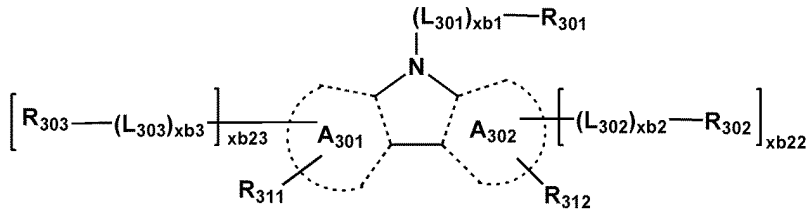
[0312] [발광층 중 호스트]

[0313] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0314] <화학식 301>

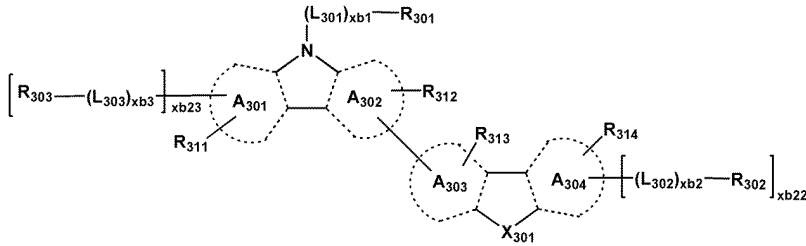
- [0315]  $[Ar_{301}]_{xb11}-[(L_{301})_{xb1}-R_{301}]_{xb21}$
- [0316] 상기 화학식 301 중,
- [0317]  $Ar_{301}$ 은 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{60}$ 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0318]  $xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0319]  $L_{301}$ 은, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로아틸렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0320]  $xb1$ 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0321]  $R_{301}$ 은, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{60}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{60}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸티오기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로아틸기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,  $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$ ,  $-N(Q_{301})(Q_{302})$ ,  $-B(Q_{301})(Q_{302})$ ,  $-C(=O)(Q_{301})$ ,  $-S(=O)_2(Q_{301})$  및  $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$  중에서 선택되고,
- [0322]  $xb21$ 는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0323]  $Q_{301}$  내지  $Q_{303}$ 는 서로 독립적으로,  $C_1-C_{10}$ 알킬기,  $C_1-C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0324] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중  $Ar_{301}$ 은,
- [0325] 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹; 및
- [0326] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1-C_{20}$ 알킬기,  $C_1-C_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기,  $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ ,  $-N(Q_{31})(Q_{32})$ ,  $-B(Q_{31})(Q_{32})$ ,  $-C(=O)(Q_{31})$ ,  $-S(=O)_2(Q_{31})$  및  $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$  중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;
- [0327] 중에서 선택되고,
- [0328]  $Q_{31}$  내지  $Q_{33}$ 는 서로 독립적으로,  $C_1-C_{10}$ 알킬기,  $C_1-C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0329] 상기 화학식 301 중  $xb11$ 이 2 이상일 경우 2 이상의  $Ar_{301}$ 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0330] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0331] <화학식 301-1>



[0332]

[0333] <화학식 301-2>



[0334]

[0335] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0336] A<sub>301</sub> 내지 A<sub>304</sub>는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 피리딘, 피리미딘, 인덴, 플루오렌, 스파이로-비플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 인돌, 카바졸, 벤조카바졸, 디벤조카바졸, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 나프토피란, 벤조나프토피란, 디나프토피란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 나프토티오펜, 벤조나프토티오펜 및 디나프토티오펜 중에서 선택되고,

[0337] X<sub>301</sub>은 O, S 또는 N-[(L<sub>304</sub>)<sub>xb4</sub>-R<sub>304</sub>]이고,

[0338] R<sub>311</sub> 내지 R<sub>314</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택되고,

[0339] xb<sub>22</sub> 및 xb<sub>23</sub>은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0340] L<sub>301</sub>, xb<sub>1</sub>, R<sub>301</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0341] L<sub>302</sub> 내지 L<sub>304</sub>에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L<sub>301</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0342] Xb<sub>2</sub> 내지 Xb<sub>4</sub>에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 Xb<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0343] R<sub>302</sub> 내지 R<sub>304</sub>에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R<sub>301</sub>에 대한 설명을 참조한다.

[0344] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L<sub>301</sub> 내지 L<sub>304</sub>는 서로 독립적으로,

[0345] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리다닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0346] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-

C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;

[0347] 중에서 선택되고,

[0348] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0349] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R<sub>301</sub> 내지 R<sub>304</sub>는 서로 독립적으로,

[0350] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0351] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기,

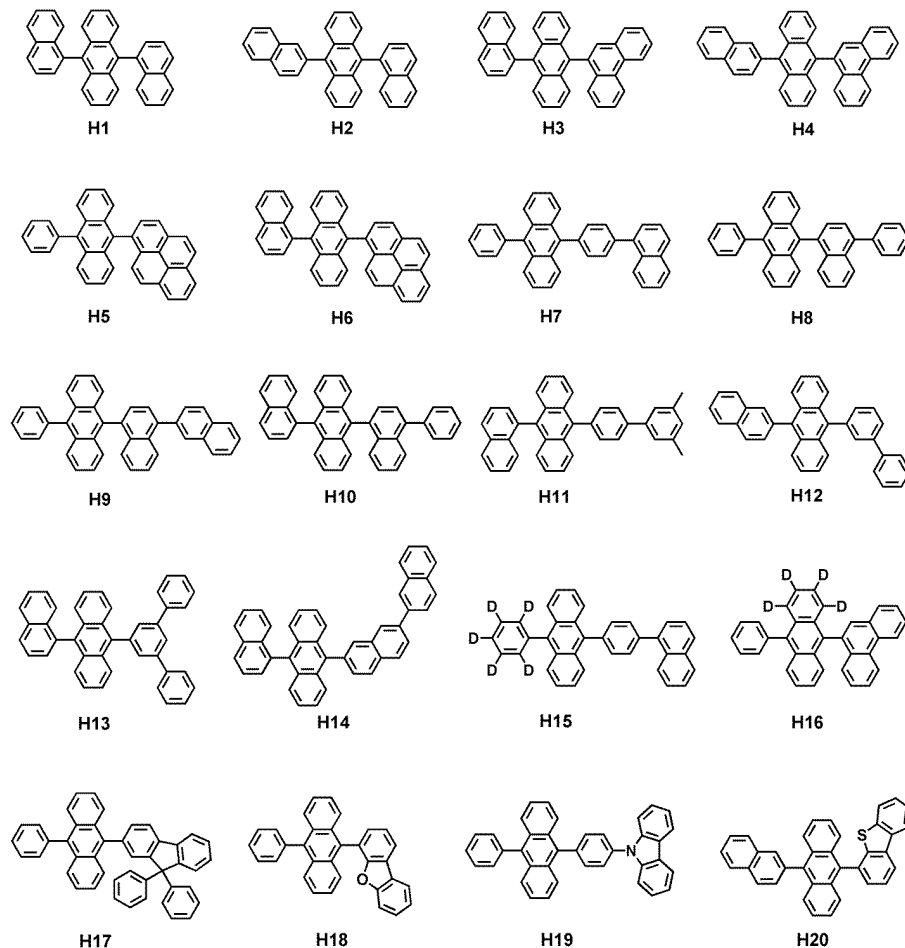
플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기,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

[0352] 중에서 선택되고,

[0353] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

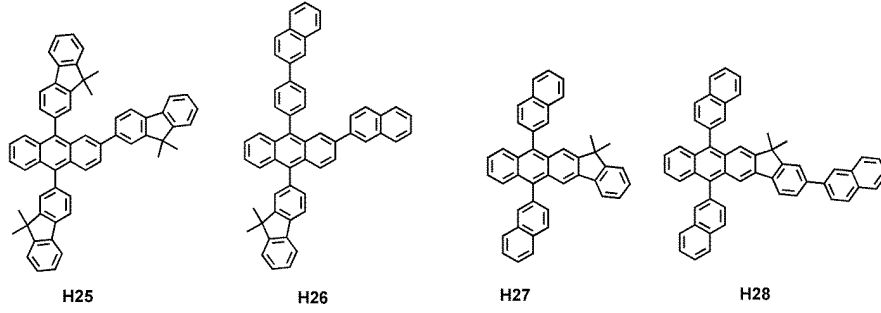
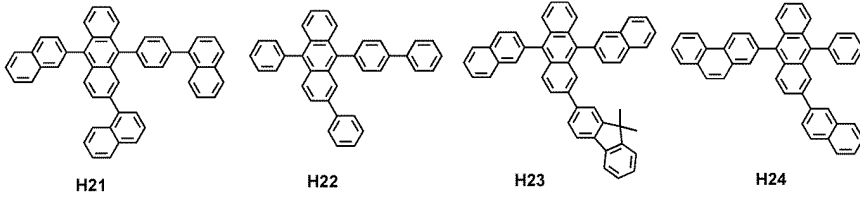
[0354] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 알칼리토 금속 착체를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 Be 착체 (예를 들면, 하기 화합물 H55), Mg 착체 및 Zn 착체 중에서 선택될 수 있다.

[0355] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

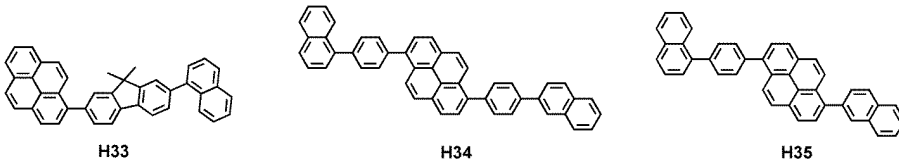
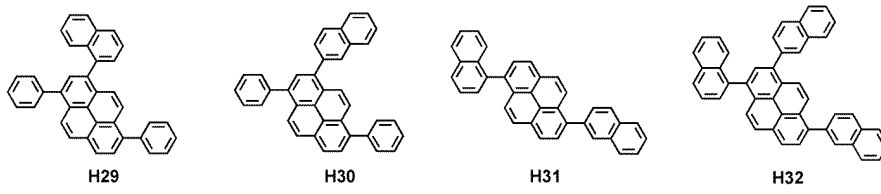


[0356]

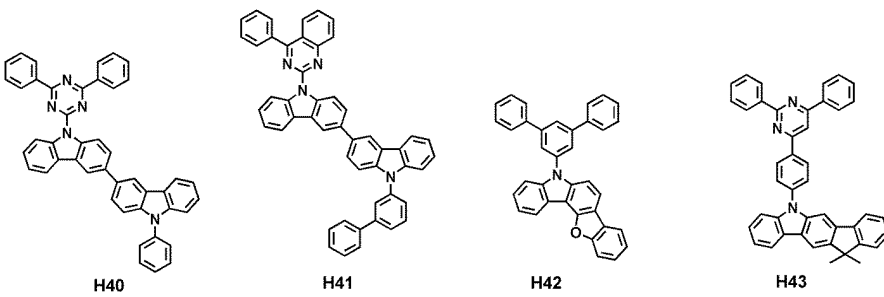
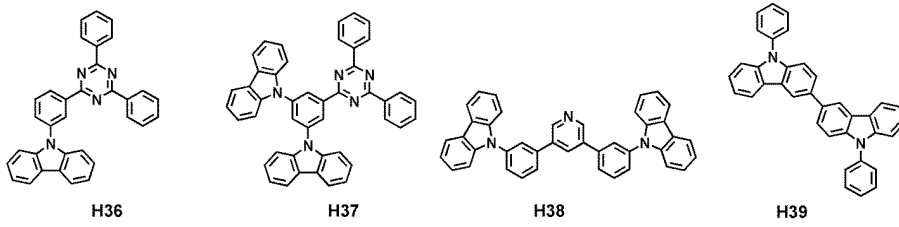
[0357]



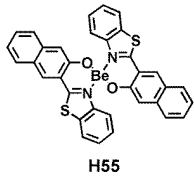
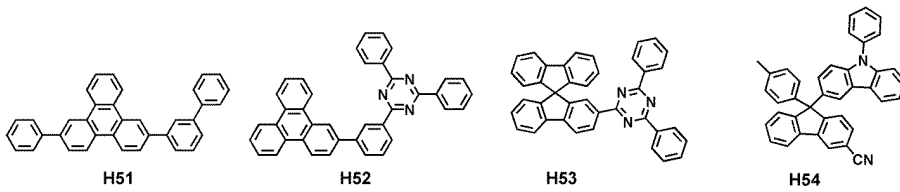
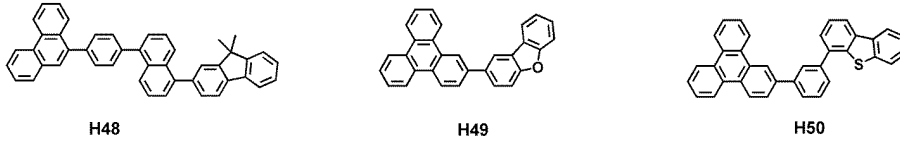
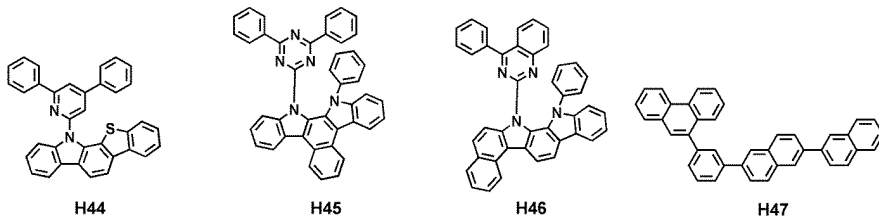
[0358]



[0359]



[0360]



[0361]

[0362]

[0363]

[0364]

[0365]

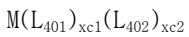
[0366]

[0367]

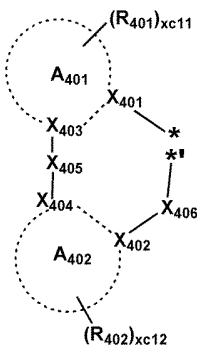
[유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]

상기 발광층은 인광 도펀트를 더 포함할 수 있다. 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함할 수 있다:

<화학식 401>



<화학식 402>



[0368]

[0369]

[0370]

[0371]

[0372]

상기 화학식 401 및 402 중,

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

L<sub>401</sub>은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, xc1은 1, 2 또는 3이고, xc1이 2 이상일 경우 2 이상의 L<sub>401</sub>은 서로 동일하거나 상이하고,

L<sub>402</sub>는 유기 리간드이고, xc2는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, xc2가 2 이상일 경우 2 이상의 L<sub>402</sub>는 서로 동일하거나 상이하고,

- [0373]  $X_{401}$  내지  $X_{404}$ 는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,
- [0374]  $X_{401}$ 과  $X_{403}$ 은 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,  $X_{402}$ 와  $X_{404}$ 는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,
- [0375]  $A_{401}$  및  $A_{402}$ 는 서로 독립적으로,  $C_5$ - $C_{60}$ 카보시클릭 그룹 또는  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0376]  $X_{405}$ 는 단일 결합, \*-O-\*, \*-S-\*, \*-C(=O)-\*, \*-N(Q<sub>411</sub>)-\*, \*-C(Q<sub>411</sub>)(Q<sub>412</sub>)-\*, \*-C(Q<sub>411</sub>)=C(Q<sub>412</sub>)-\*, \*-C(Q<sub>411</sub>)=\* 또는 \*=C(Q<sub>411</sub>)\*이고, 상기 Q<sub>411</sub> 및 Q<sub>412</sub>는, 수소, 중수소, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0377]  $X_{406}$ 은 단일 결합, O 또는 S이고,
- [0378]  $R_{401}$  및  $R_{402}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>401</sub>)(Q<sub>402</sub>)(Q<sub>403</sub>), -N(Q<sub>401</sub>)(Q<sub>402</sub>), -B(Q<sub>401</sub>)(Q<sub>402</sub>), -C(=O)(Q<sub>401</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>401</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>401</sub>)(Q<sub>402</sub>) 중에서 선택되고, 상기 Q<sub>401</sub> 내지 Q<sub>403</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>아릴기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>헤테로아릴기 중에서 선택되고,
- [0379] xc11 및 xc12는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,
- [0380] 상기 화학식 402 중 \* 및 \*'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.
- [0381] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중  $A_{401}$  및  $A_{402}$ 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스퀴이로-바이플루오렌 그룹, 인텐 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란(furan) 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸(isoxazole) 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 카바졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조퓨란(benzofuran) 그룹, 벤조티오펜 그룹, 이소벤조티오펜 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 디벤조퓨란(dibenzofuran) 그룹 및 디벤조티오펜 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0382] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 i)  $X_{401}$ 은 질소이고,  $X_{402}$ 는 탄소이거나, 또는 ii)  $X_{401}$ 과  $X_{402}$ 가 모두 질소일 수 있다.
- [0383] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중  $R_{401}$  및  $R_{402}$ 는 서로 독립적으로,
- [0384] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0385] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 페닐기, 나프틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 노르보나닐기 및 노르보네닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0386] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸리닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;
- [0387] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비

페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만틸기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및

[0388]  $-\text{Si}(\text{Q}_{401})(\text{Q}_{402})(\text{Q}_{403})$ ,  $-\text{N}(\text{Q}_{401})(\text{Q}_{402})$ ,  $-\text{B}(\text{Q}_{401})(\text{Q}_{402})$ ,  $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{401})$ ,  $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{401})$  및  $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{401})(\text{Q}_{402})$ ;

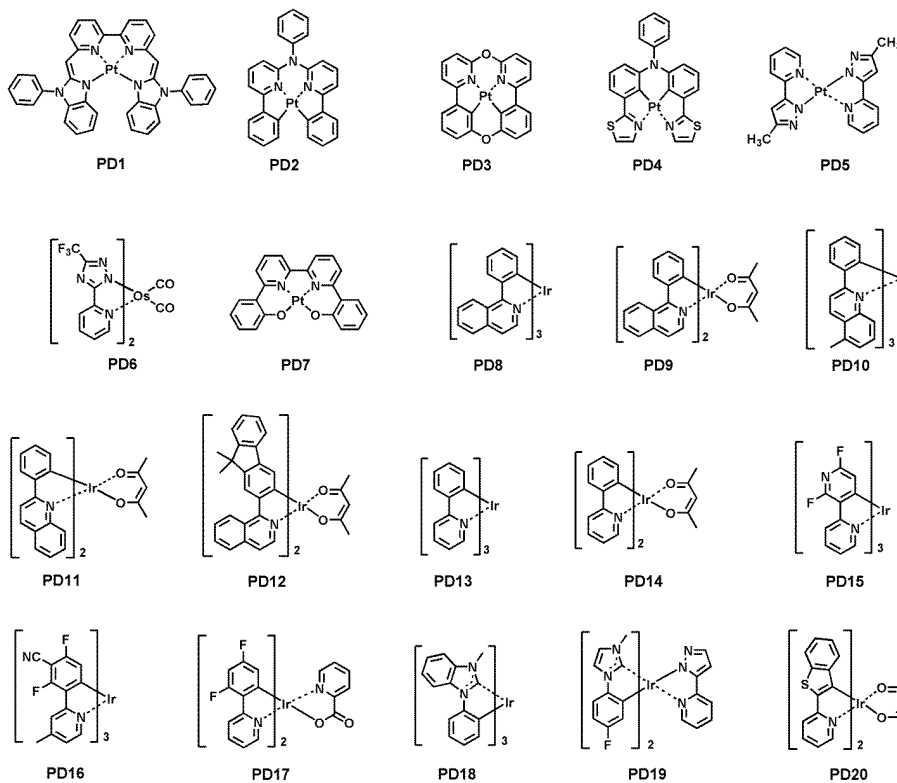
[0389] 중에서 선택되고,

[0390] 상기  $\text{Q}_{401}$  내지  $\text{Q}_{403}$ 은 서로 독립적으로,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ 알킬기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

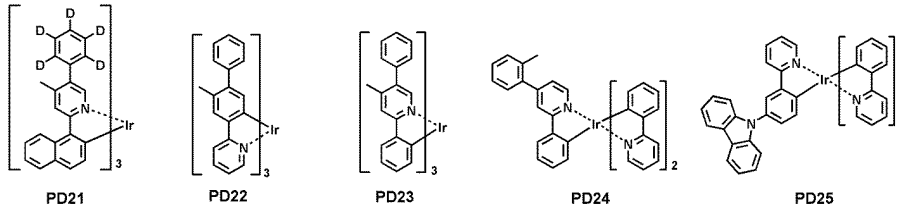
[0391] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 401 중 xc1이 2 이상일 경우, 2 이상의  $\text{L}_{401}$  중 2개의  $\text{A}_{401}$ 은 선택적으로 (optionally), 연결기인  $\text{X}_{407}$ 을 통하여 서로 연결되거나, 2개의  $\text{A}_{402}$ 는 선택적으로, 연결기인  $\text{X}_{408}$ 을 통하여 서로 연결될 수 있다 (하기 화합물 PD1 내지 PD4 및 PD7 참조). 상기  $\text{X}_{407}$  및  $\text{X}_{408}$ 은 서로 독립적으로, 단일 결합,  $-\text{O}-*$ ,  $-\text{S}-*$ ,  $-\text{C}(=\text{O})-*$ ,  $-\text{N}(\text{Q}_{413})-*$ ,  $-\text{C}(\text{Q}_{413})(\text{Q}_{414})-*$  또는  $-\text{C}(\text{Q}_{413})=\text{C}(\text{Q}_{414})-*$  (여기서,  $\text{Q}_{413}$  및  $\text{Q}_{414}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{20}$ 알킬기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기임)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0392] 상기 화학식 401 중  $\text{L}_{402}$ 는 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기  $\text{L}_{402}$ 는 할로겐, 디케톤 (예를 들면, 아세틸아세토네이트), 카르복실산 (예를 들면, 피콜리네이트),  $-\text{C}(=\text{O})$ , 이소니트릴,  $-\text{CN}$  및 포스포러스 (예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphite)) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0393] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0395]



[0396]

[0397]

[0398]

[0399]

[0400]

[0401]

[0402]

[0403]

[0404]

[0405]

[0406]

[0407]

[0408]

[0409]

[0410]

[0411]

[0412]

[0413]

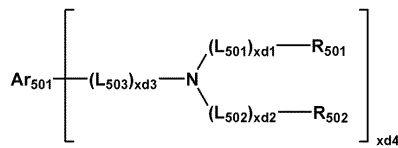
[발광층 중 형광 도펀트]

상기 형광 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

또한, 상기 형광 도펀트는 아릴아민 화합물 또는 스티릴아민 화합물을 더 포함할 수 있다.

또한, 상기 형광 도펀트는 하기 화학식 501로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

<화학식 501>



상기 화학식 501 중,

Ar<sub>501</sub>은 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹이고,

L<sub>501</sub> 내지 L<sub>503</sub>은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

xd1 내지 xd3는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

R<sub>501</sub> 및 R<sub>502</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

xd4는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar<sub>501</sub>은,

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

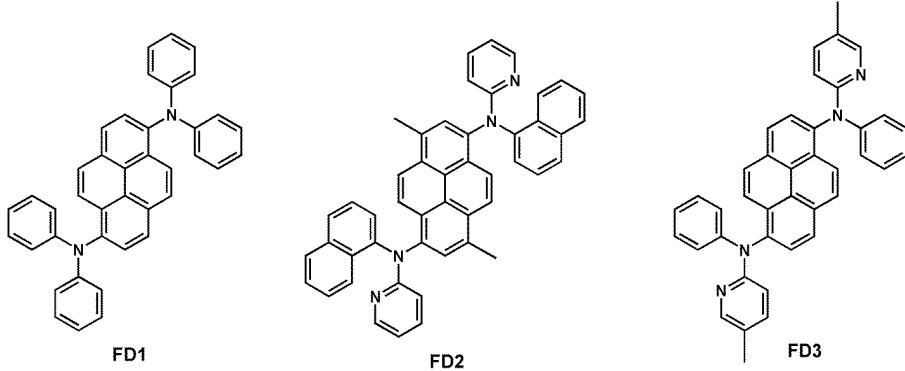
중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹;

중에서 선택될 수 있다.

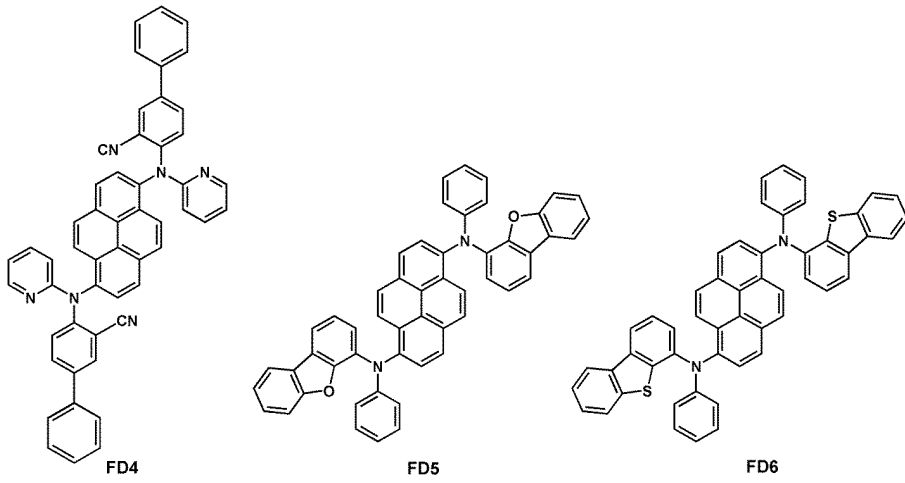
다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L<sub>501</sub> 내지 L<sub>503</sub>은 서로 독립적으로,

- [0414] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및
- [0415] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기;
- [0416] 중에서 선택될 수 있다.
- [0417] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 R<sub>501</sub> 및 R<sub>502</sub>는 서로 독립적으로,
- [0418] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0419] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 및 -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;
- [0420] 중에서 선택되고,
- [0421] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0422] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd4는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

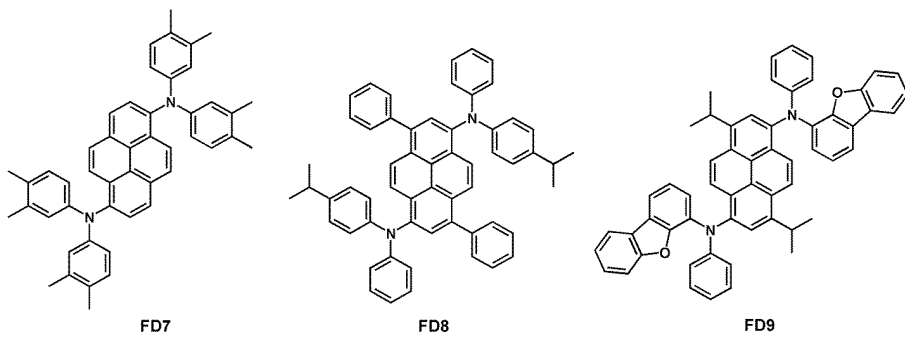
[0423] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:



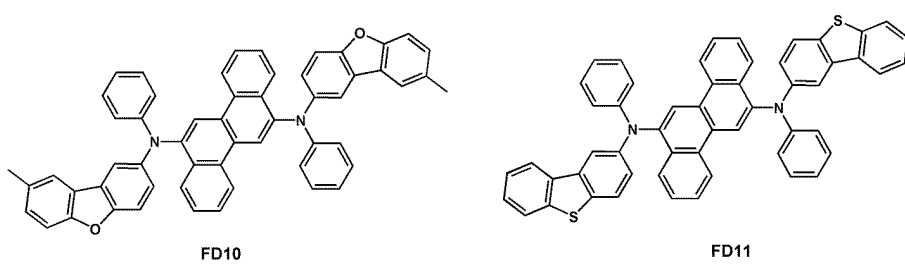
[0424]



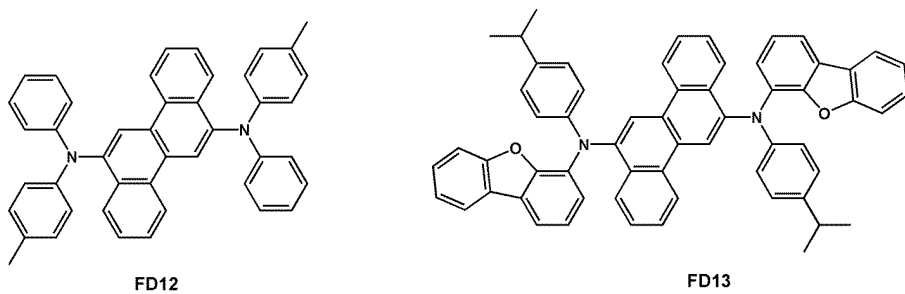
[0425]



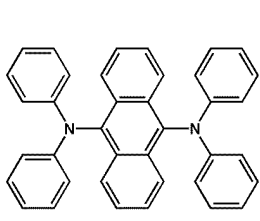
[0426]



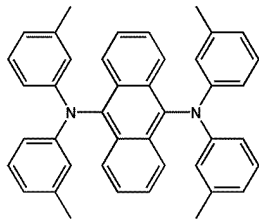
[0427]



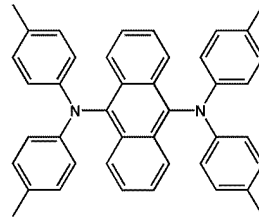
[0428]



FD14

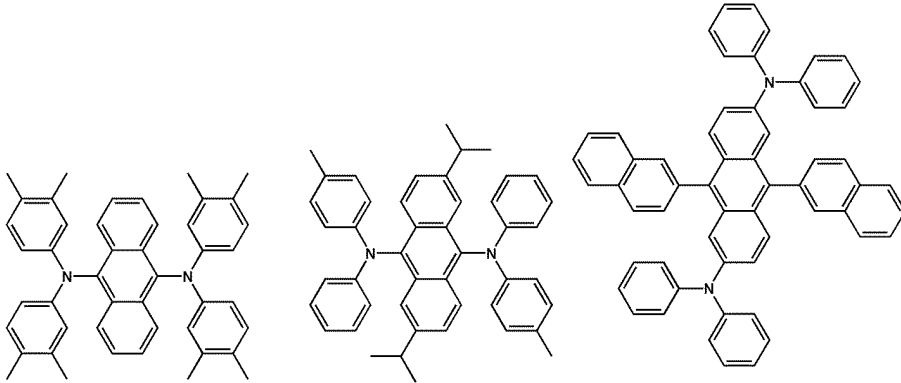


FD15



FD16

[0429]

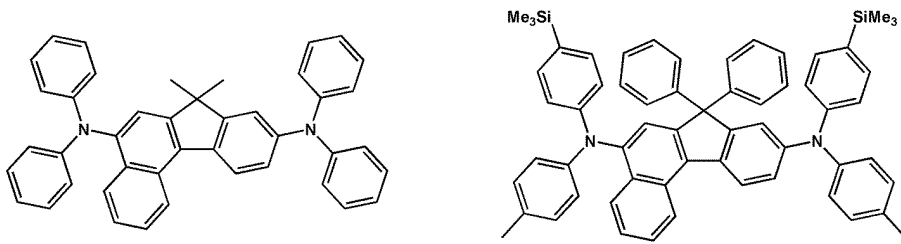


FD17

FD18

FD19

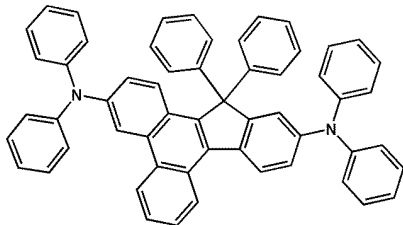
[0430]



FD20

FD21

[0431]

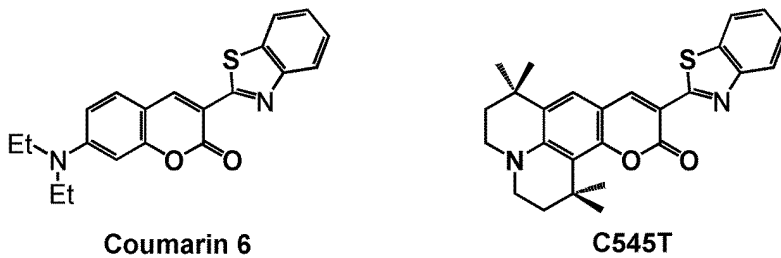
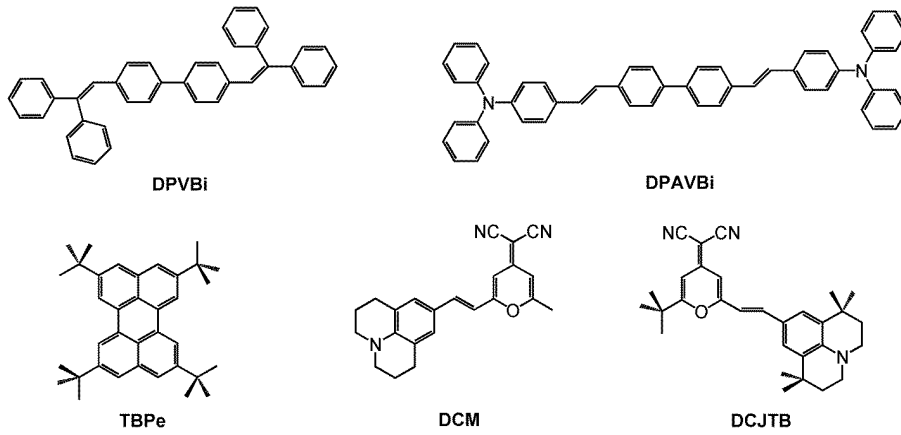


FD22

[0432]

[0433]

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



[0434]

[0435]

[0436] [유기층(150) 중 전자 수송 영역]

[0437] 상기 전자 수송 영역은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0438] 상기 전자 수송 영역은, 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0439] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적층된 전자 수송층/전자 주입층, 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층, 전자 조절층/전자 수송층/전자 주입층, 또는 버퍼층/전자 수송층/전자 주입층 등의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0440] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은,  $\pi$  전자 결핍성 합질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.

[0441] 상기 " $\pi$  전자 결핍성 합질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 \*-N=\* 모이어티를 갖는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹을 의미한다.

[0442] 예를 들어, 상기 " $\pi$  전자 결핍성 합질소 고리"는, i) 적어도 하나의 \*-N=\* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹이거나, ii) 적어도 하나의 \*-N=\* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 2 이상이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹이거나, 또는 iii) 적어도 하나의 \*-N=\* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 적어도 하나와, 적어도 하나의 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.

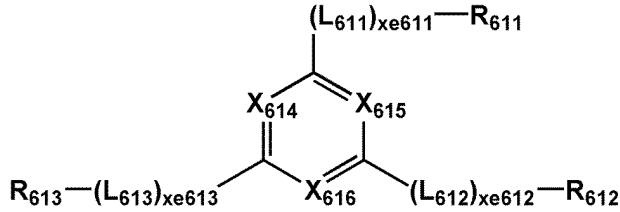
[0443] 상기  $\pi$  전자 결핍성 합질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 인다졸, 푸린(purine), 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴놀살린, 퀴나졸린, 시놀린, 페난트리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 벤조이미다졸, 이소벤조티아졸, 벤조옥사졸, 이소벤조옥사졸, 트리아졸, 테트라졸, 옥사디아졸, 트리아진, 티아디아졸, 이미다조피리딘, 이미다조피리미딘, 아자카바졸 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0444] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0445] <화학식 601>

- [0446]  $[Ar_{601}]_{xe11} - [(L_{601})_{xe1} - R_{601}]_{xe21}$
- [0447] 상기 화학식 601 중,
- [0448]  $Ar_{601}$ 은 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{60}$ 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0449]  $xe11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0450]  $L_{601}$ 은, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로아틸렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0451]  $xe1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0452]  $R_{601}$ 은, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸티오기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로아틸기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,  $-Si(Q_{601})(Q_{602})(Q_{603})$ ,  $-C(=O)(Q_{601})$ ,  $-S(=O)_2(Q_{601})$  및  $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$  중에서 선택되고,
- [0453] 상기  $Q_{601}$  내지  $Q_{603}$ 은 서로 독립적으로,  $C_1-C_{10}$ 알킬기,  $C_1-C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0454]  $xe21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0455] 일 구현예에 따르면, 상기  $xe11$ 개의  $Ar_{601}$  및  $xe21$ 개의  $R_{601}$  중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은  $\pi$  전자 결핍성 합질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0456] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리  $Ar_{601}$ 은,
- [0457] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹; 및
- [0458] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1-C_{20}$ 알킬기,  $C_1-C_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기,  $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ ,  $-S(=O)_2(Q_{31})$  및  $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$  중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹;

- [0459] 중에서 선택될 수 있고,
- [0460] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0461] 상기 화학식 601 중 xe<sub>11</sub>이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar<sub>601</sub>은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0462] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar<sub>601</sub>은 안트라센 그룹일 수 있다.
- [0463] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:
- [0464] <화학식 601-1>



- [0465] 상기 화학식 601-1 중,
- [0466] X<sub>614</sub>는 N 또는 C(R<sub>614</sub>)이고, X<sub>615</sub>는 N 또는 C(R<sub>615</sub>)이고, X<sub>616</sub>은 N 또는 C(R<sub>616</sub>)이고, X<sub>614</sub> 내지 X<sub>616</sub> 중 적어도 하나는 N이고,
- [0468] L<sub>611</sub> 내지 L<sub>613</sub>은 서로 독립적으로, 상기 L<sub>601</sub>에 대한 설명을 참조하고,
- [0469] xe<sub>611</sub> 내지 xe<sub>613</sub>은 서로 독립적으로, 상기 xe<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고,
- [0470] R<sub>611</sub> 내지 R<sub>613</sub>은 서로 독립적으로, 상기 R<sub>601</sub>에 대한 설명을 참조하고,
- [0471] R<sub>614</sub> 내지 R<sub>616</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0472] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L<sub>601</sub> 및 L<sub>611</sub> 내지 L<sub>613</sub>은 서로 독립적으로,
- [0473] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및
- [0474] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기,

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

[0475]

중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0476]

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

[0477]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R<sub>601</sub> 및 R<sub>611</sub> 내지 R<sub>613</sub>은 서로 독립적으로,

[0478]

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

[0479]

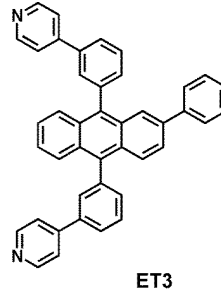
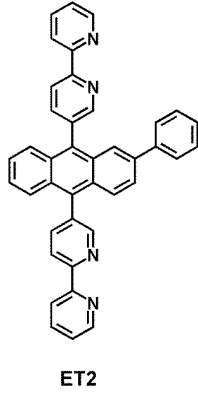
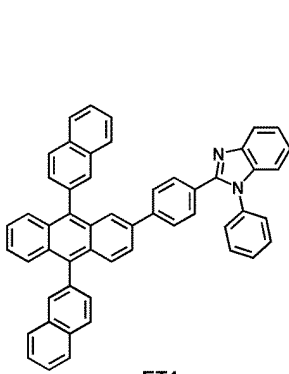
중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0480]  $-S(=O)_2(Q_{601})$  및  $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$ ;

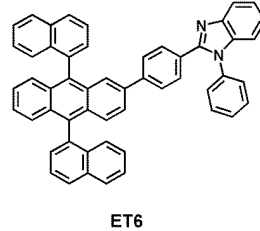
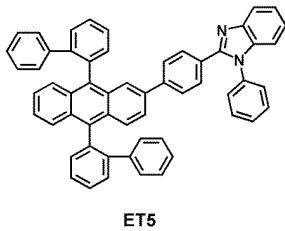
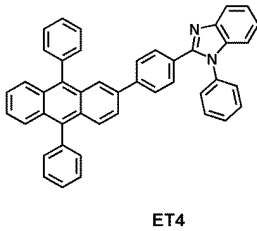
[0481] 중에서 선택되고,

[0482] 상기  $Q_{601}$  및  $Q_{602}$ 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

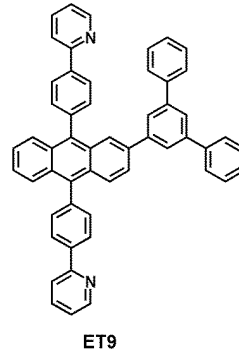
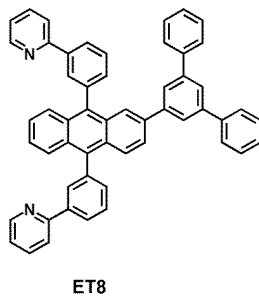
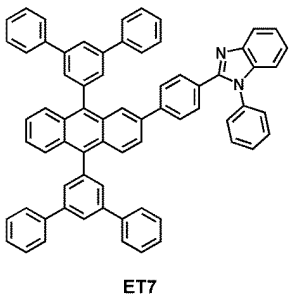
[0483] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



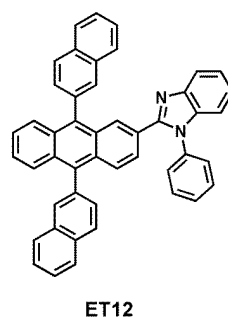
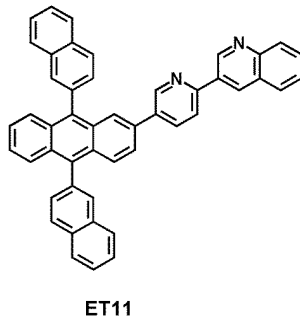
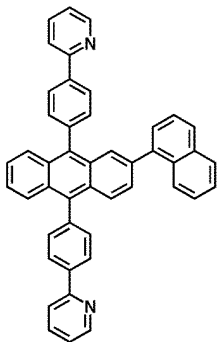
[0484]



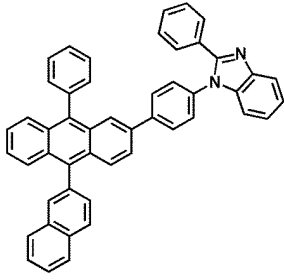
[0485]



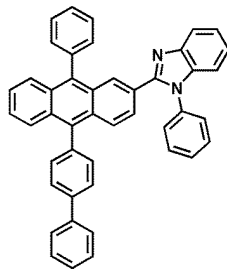
[0486]



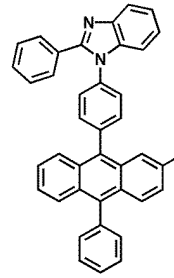
[0487]



ET13

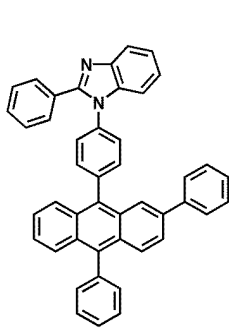


ET14

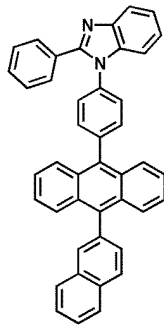


ET15

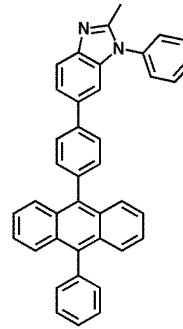
[0488]



ET16

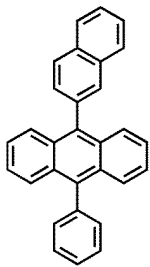


ET17

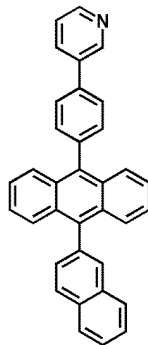


ET18

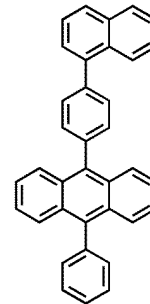
[0489]



ET19

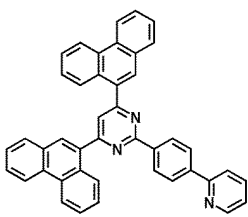


ET20

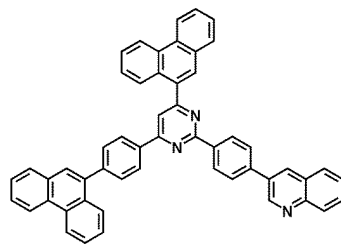


ET21

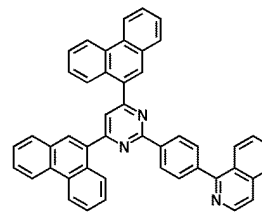
[0490]



ET22

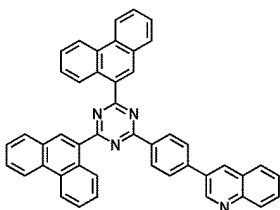


ET23

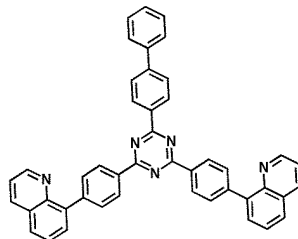


ET24

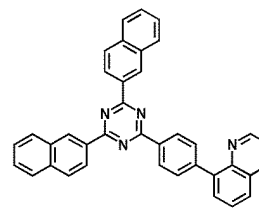
[0491]



ET25

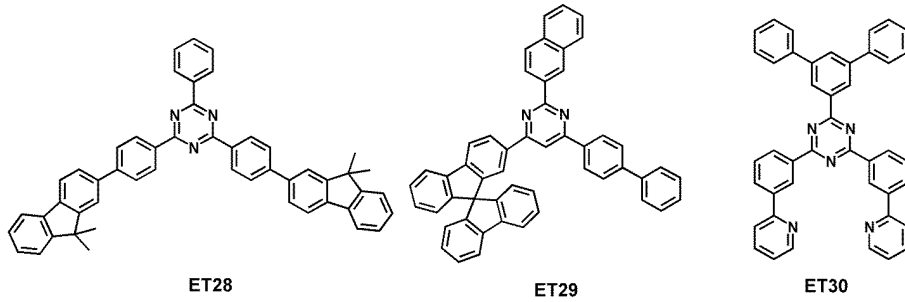


ET26

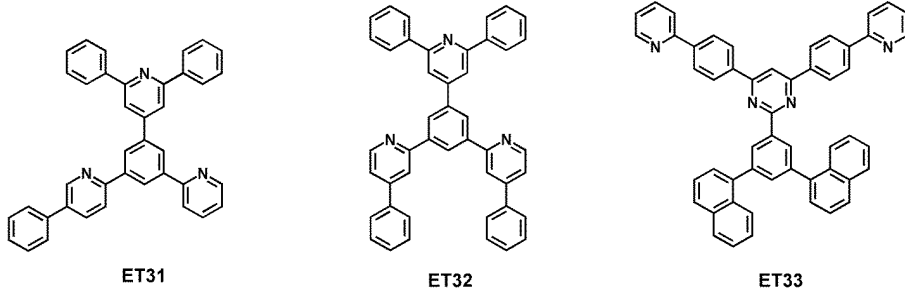


ET27

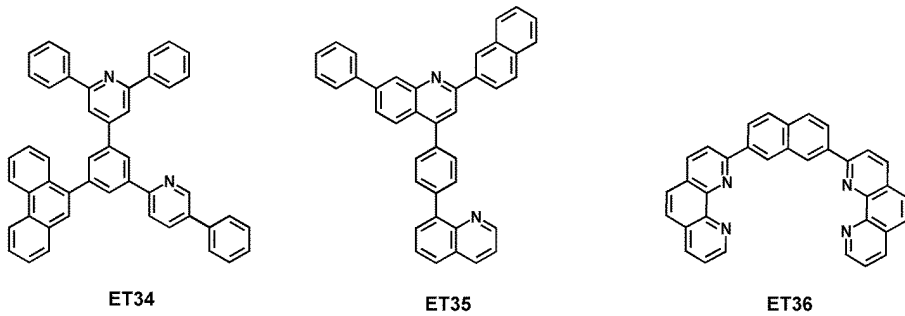
[0492]



[0493]



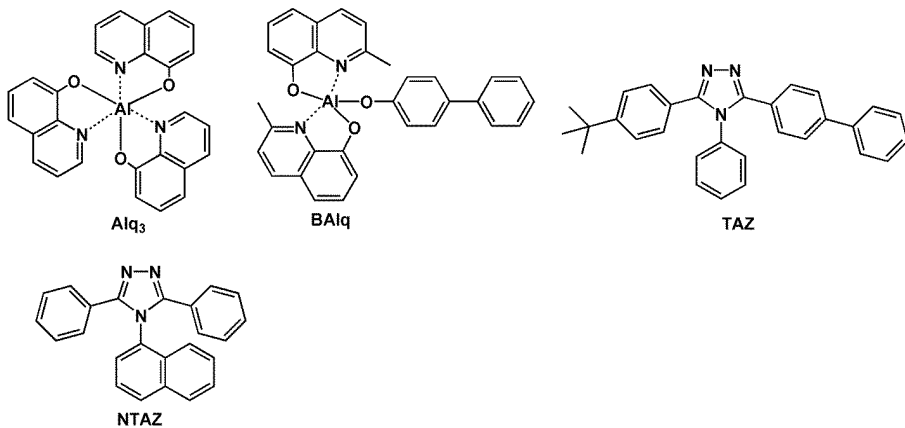
[0494]



[0495]

[0496]

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



[0497]

[0498]

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

[0499]

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.

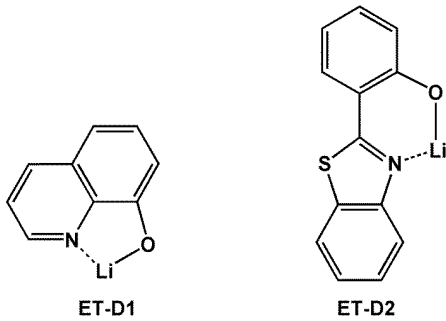
[0500]

상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-합

유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0501] 상기 금속-함유 물질은 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체의 금속 이온은, Li 이온, Na 이온, K 이온, Rb 이온 및 Cs 이온 중에서 선택될 수 있고, 상기 알칼리 토금속 착체의 금속 이온은 Be 이온, Mg 이온, Ca 이온, Sr 이온 및 Ba 이온 중에서 선택될 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0502] 예를 들면, 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다.



[0503] 상기 전자 수송 영역은, 제2전극(190)으로부터의 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층은 상기 제2전극(190)과 직접(directly) 접촉할 수 있다.

[0505] 상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0506] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0507] 상기 알칼리 금속은, Li, Na, K, Rb 및 Cs 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li, Na 또는 Cs일 수 있다. 다른 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li 또는 Cs일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0508] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.

[0509] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.

[0510] 상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.

[0511] 상기 알칼리 금속 화합물은,  $Li_2O$ ,  $Cs_2O$ ,  $K_2O$  등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속 화합물은, LiF,  $Li_2O$ , NaF, LiI, NaI, CsI, KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0512] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO,  $Ba_xSr_{1-x}O(0 < x < 1)$ ,  $Ba_xCa_{1-x}O(0 < x < 1)$  등과 같은 알칼리 토금속 화합물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

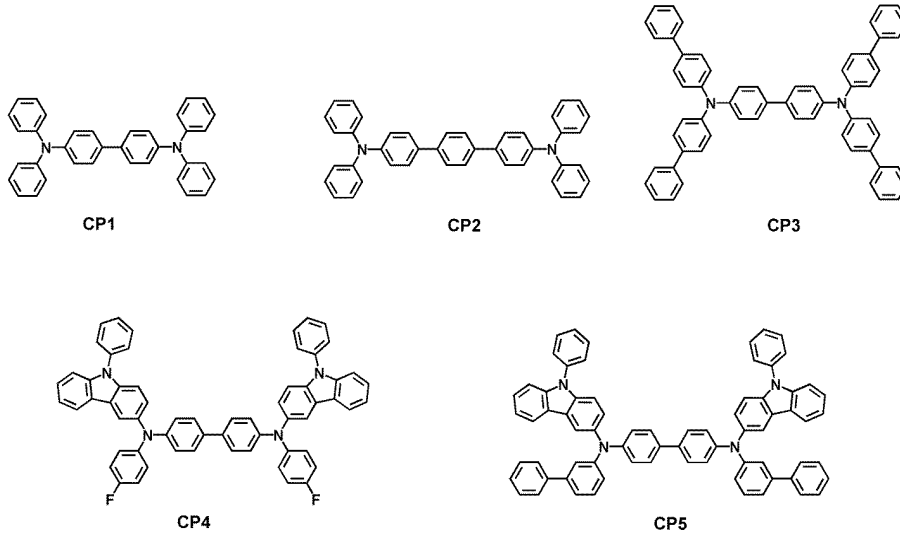
[0513] 상기 희토류 금속 화합물은,  $YbF_3$ ,  $ScF_3$ ,  $ScO_3$ ,  $Y_2O_3$ ,  $Ce_2O_3$ ,  $GdF_3$ , 및  $TbF_3$  중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은  $YbF_3$ ,  $ScF_3$ ,  $TbF_3$ ,  $YbI_3$ ,  $ScI_3$ ,  $TbI_3$  중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되

는 것은 아니다.

- [0514] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0515] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합만으로 이루어져 있거나, 상기 유기물을 더 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층이 유기물을 더 포함할 경우, 상기 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합은 상기 유기물로 이루어진 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.
- [0516] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0517] [제2전극(190)]
- [0518] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극인 캐소드(cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(190)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합(combination)을 사용할 수 있다.
- [0519] 상기 제2전극(190)은, 리튬(Li), 은(Ag), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), ITO 및 IZO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 제2전극(190)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다.
- [0520] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0521] [도 2 내지 4에 대한 설명]
- [0522] 한편, 도 2의 유기 발광 소자(20)는 제1캐핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 3의 유기 발광 소자(30)는 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 4의 유기 발광 소자(40)는 제1캐핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.
- [0523] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.
- [0524] 유기 발광 소자(20, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제1전극(110) 및 제1캐핑층(210)을 지나 외부로 추출될 수 있고, 유기 발광 소자(30, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)을 지나 외부로 추출될 수 있다.
- [0525] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.
- [0526] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 서로 독립적으로, 유기물로 이루어진 유기 캐핑층, 무기물로 이루어진 무기 캐핑층, 또는 유기물 및 무기물을 포함한 복합 캐핑층일 수 있다.
- [0527] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물, 아민계 화합물, 포르핀 유도체 (porphine derivatives), 프탈로시아닌 유도체 (phthalocyanine derivatives), 나프탈로시아닌 유도체 (naphthalocyanine derivatives), 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나의 물질을 포함할 수 있다. 상기 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물 및 아민계 화합물은, 선택적으로, O, N, S, Se, Si, F, Cl, Br 및 I 중에서 선택된 적어도 하나의 원소를 포함한 치환기로 치환될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민계 화합물을 포함할 수 있다.

[0528] 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 또는 상기 화학식 202로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0529] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화합물 HT28 내지 HT33 및 하기 화합물 CP1 내지 CP5 중에서 선택된 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0530]

[0532] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1 내지 4를 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0533] 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층은 각각, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 소정 영역에 형성될 수 있다.

[0534] 진공 증착법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 증착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500°C의 증착 온도, 약  $10^{-8}$  내지 약  $10^{-3}$  torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

[0535] 스핀 코팅법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 코팅 조건은, 예를 들면, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도 및 약 80°C 내지 200°C의 열처리 온도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

[0536] [치환기의 일반적인 정의]

[0537] 본 명세서 중  $C_1-C_{60}$ 알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monivalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_1-C_{60}$ 알킬렌기는 상기  $C_1-C_{60}$ 알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

[0538] 본 명세서 중  $C_2-C_{60}$ 알케닐기는, 상기  $C_2-C_{60}$ 알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_2-C_{60}$ 알케닐렌기는 상기  $C_2-C_{60}$ 알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0539] 본 명세서 중  $C_2-C_{60}$ 알키닐기는, 상기  $C_2-C_{60}$ 알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기, 프로피닐기, 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_2-C_{60}$ 알키닐렌기는 상기  $C_2-C_{60}$ 알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0540] 본 명세서 중  $C_1-C_{60}$ 알킬시기는,  $-OA_{101}$ (여기서,  $A_{101}$ 은 상기  $C_1-C_{60}$ 알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0541] 본 명세서 중  $C_3-C_{10}$ 시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_3-C_{10}$ 시클로알킬렌기는 상기  $C_3-C_{10}$ 시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0542] 본 명세서 중  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알킬기는, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리아졸리딘닐기(1,2,3,4-oxatriazolidiny), 테트라히드로푸라닐기(tetrahydrofuranly), 테트라히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알킬렌기는 상기  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0543] 본 명세서 중  $C_3-C_{10}$ 시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_3-C_{10}$ 시클로알케닐렌기는 상기  $C_3-C_{10}$ 시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0544] 본 명세서 중  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸닐기, 2,3-디히드로푸라닐기, 2,3-디히드로티오펜닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐렌기는 상기  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0545] 본 명세서 중  $C_6-C_{60}$ 아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며,  $C_6-C_{60}$ 아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴기 및  $C_6-C_{60}$ 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0546] 본 명세서 중  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고,  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴렌기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함된다. 상기  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기 및  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0547] 본 명세서 중  $C_6-C_{60}$ 아릴옥시기는  $-OA_{102}$ (여기서,  $A_{102}$ 는 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴기임)를 가리키고, 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴티오기(arylthio)는  $-SA_{103}$ (여기서,  $A_{103}$ 은 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴기임)를 가리킨다.
- [0548] 본 명세서 중  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴옥시기(heteroarylloxy)는  $-OA_{104}$ (여기서,  $A_{104}$ 는 상기  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기임)를 가리키고, 상기  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴티오기(heteroarylthio)는  $-SA_{105}$ (여기서,  $A_{105}$ 는 상기  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기임)를 가리킨다.
- [0549] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 8 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예에는, 플루오레닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0550] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 구체예에는, 카바졸일기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0551] 본 명세서 중 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 5 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.
- [0552] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹이란, 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹과 동일한 구조를 갖되, 고리-형성 원자로서, 탄소(탄소수는 1 내지 60일 수 있음) 외에, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 그룹을 의미한다.
- [0553] 본 명세서 중, 상기 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알록시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴옥시기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0554] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알록시기;
- [0555] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알록시기;
- [0556] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0557] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알록시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환

그룹; 및

[0558]  $-\text{Si}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})(\text{Q}_{33})$ ,  $-\text{N}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$ ,  $-\text{B}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$ ,  $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{31})$ ,  $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{31})$  및  $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$ ;

[0559] 중에서 선택되고,

[0560] 상기  $\text{Q}_{11}$  내지  $\text{Q}_{13}$ ,  $\text{Q}_{21}$  내지  $\text{Q}_{23}$  및  $\text{Q}_{31}$  내지  $\text{Q}_{33}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소,  $-\text{F}$ ,  $-\text{Cl}$ ,  $-\text{Br}$ ,  $-\text{I}$ , 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{60}$ 알킬기,  $\text{C}_2$ - $\text{C}_{60}$ 알케닐기,  $\text{C}_2$ - $\text{C}_{60}$ 알키닐기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{60}$ 알콕시기,  $\text{C}_3$ - $\text{C}_{10}$ 시클로알킬기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기,  $\text{C}_3$ - $\text{C}_{10}$ 시클로알케닐기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기,  $\text{C}_6$ - $\text{C}_{60}$ 아릴기,  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0561] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 " $\text{Bu}^t$ "은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"는 메톡시기를 의미한다.

[0562] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 " $\text{C}_6$ - $\text{C}_{60}$ 아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0563] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 " $\text{C}_6$ - $\text{C}_{60}$ 아릴기"로 치환된  $\text{C}_6$ - $\text{C}_{60}$ 아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0564] 본 명세서 중 \* 및 \*'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

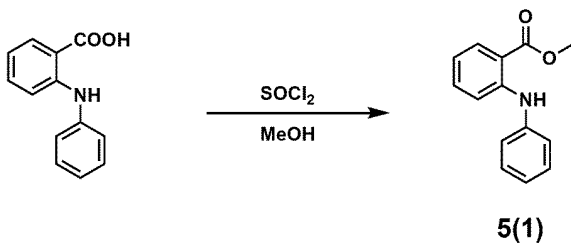
[0565] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성에 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.

[0566] [실시예]

[0567] [합성에]

[0568] **합성에 1: 화합물 5의 합성**

[0569] (1) 중간체 5(1)의 합성

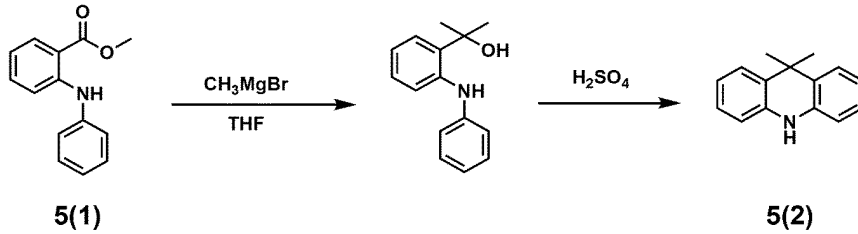


[0570]

[0571] 반응용기에 2-(phenylamino)benzoic acid 10 g (1.0 eq 47 mmol)을 넣은 후, 진공 건조한 이후 질소가스를 채웠다. 메탄올 60 mL를 넣고 60 °C의 온도에서 환류하며 교반하였다. 이 온도를 유지하며  $\text{SOCl}_2$  6.1 mL (2.0 eq, 94 mmol)을 천천히 적가하였다. 60 °C의 온도에서 12시간 동안 환류하며 교반시켰다. 이후 상온으로 식힌 뒤,  $\text{NaHCO}_3$  포화용액을 넣어 반응을 종료하였다. 반응이 종료된 혼합물은 에틸아세테이트 및 증류수를 이용하여 유기층을 추출하고 무수 황산나트륨을 이용하여 건조시켜 셀라이트(Celite)를 통한 여과 후 용매를 증발 시켰다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 5(1)인 methyl 2-(phenylamino)benzoate 8.5 g (수율 80%)을 얻었다.

[0572]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  9.52 (s, 1H), 7.91 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.26 (t, J = 7.8 Hz, 2H), 7.23 - 7.19 (m, 3H), 7.18 (s, 1H), 7.01 (t, J = 7.3 Hz, 1H), 6.70 - 6.58 (m, 1H), 3.78 (s, 3H).

[0573] (2) 중간체 5(2)의 합성

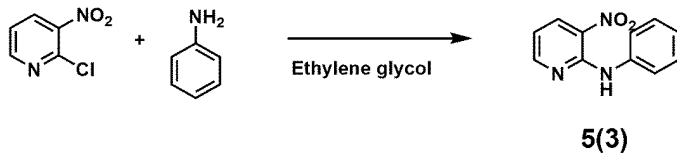


[0574]

[0575] Methyl 2-(phenylamino)benzoate 8.5 g (1.0 eq, 37 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 테트라하이드로퓨란 400 mL를 넣고 3.0 M Methylmagnesium bromide 50 mL (4.0 eq, 150 mmol)을 천천히 적 가한 후 3시간 동안 교반시켰다. 염화암모늄 수용액을 이용하여 반응종료 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기 층을 추출하여 건조시켰다. 건조시킨 반응물을 플라스크에 넣고 황산을 넣어준 후 상온에서 30분 동안 교반시켰다. 반응 종료 후 수산화나트륨 수용액으로 중성을 맞춘 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발 시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 5(2)인 9,10-dihydro-9,9-dimethylacridine 4.9 g (수율 63%)을 얻었다.

[0576]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  7.38 (d,  $J = 7.7$  Hz, 2H), 7.10 (t,  $J = 7.2$  Hz, 2H), 6.92 (d,  $J = 6.8$  Hz, 2H), 6.69 (d,  $J = 7.5$  Hz, 2H), 6.13 (s, 1H), 1.58 (s, 3H).

[0577] (3) 중간체 5(3)의 합성

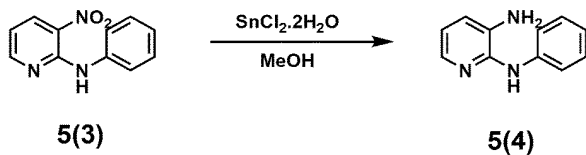


[0578]

[0579] 반응용기에 2-chloro-3-nitropyridine 10 g (1.0 eq, 63 mmol)을 넣고 진공건조한 이후 질소가스를 채웠다. 이 후 아닐린 5.76 mL (1.0 eq, 63 mmol)과 에틸렌글리콜 100 mL를 넣고 140 °C에서 8시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응종료 후 반응용기를 상온으로 식혀준 후, 증류수와 에틸아세테이트를 이용하여 유기층을 추출하고, 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 5(3)인 3-nitro-*N*-phenylpyridin-2-amine 12 g (수율 87%)를 얻었다.

[0580]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  10.12 (s, 1H), 8.53 (dd,  $J = 8.3, 1.8$  Hz, 1H), 8.49 (dd,  $J = 4.5, 1.8$  Hz, 1H), 7.65 (dt,  $J = 8.7, 1.6$  Hz, 2H), 7.42 - 7.38 (m, 2H), 7.21 - 7.17 (m, 1H), 6.83 (dd,  $J = 8.3, 4.5$  Hz, 1H).

[0581] (4) 중간체 5(4)의 합성



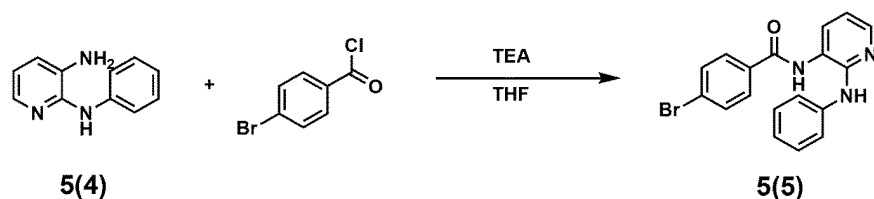
[0582]

[0583] 3-nitro-*N*-phenylpyridin-2-amine 12 g (1.0 eq, 55 mmol)과  $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  37 g (3.0 eq, 160 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 메탄올 300 mL를 넣고 60 °C에서 2시간동안 환류하며 교반시켰다.  $\text{NaHCO}_3$  수용액을 넣어 중성을 맞춰 반응을 종료한 후 증류수 및 에틸아세테이트를 이용하여 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 다이클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 중간체 5(4)인 *N*-phenylpyridine-2,3-diamine 8.2 g (수율 81%)를 얻었다.

[0584]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  7.84 (dd,  $J = 4.9, 1.5$  Hz, 1H), 7.31 - 7.24 (m, 4H), 7.02 (dd,  $J = 7.6, 1.6$

Hz, 1H), 6.96 (tt, J = 7.1, 1.6 Hz, 1H), 6.78 (dd, J = 7.6, 4.9 Hz, 1H), 6.19 (s, 1H), 3.41 (s, 2H).

[0585] (5) 중간체 5(5)의 합성

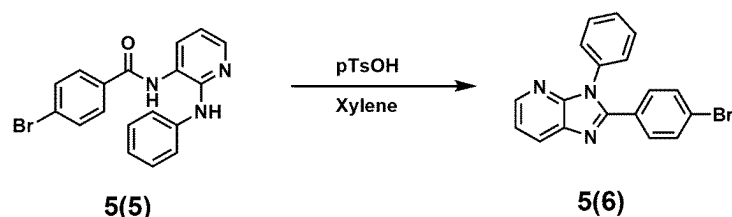


[0586]

[0587] *N*<sup>2</sup>-phenylpyridine-2,3-diamine 0.5 g (1.0 eq, 2.7 mmol)과 4-bromobenzoyl chloride 0.59 g (1.0 eq, 2.7 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 테트라하이드로퓨란 10 mL를 넣고 교반시키며 온도를 0 °C로 낮춰준다. 이 온도를 유지하며 트리에틸아민 0.4 mL을 천천히 적가한 이후 상온에서 4시간 동안 교반하였다. 반응을 종료한 후 증류수 및 에틸아세테이트를 이용하여 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 다이클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 중간체 5(5)인 4-bromo-N-(2-(phenylamino)pyridin-3-yl)benzamide 0.6 g (수율 61%)를 얻었다.

[0588] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 8.24 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 8.19 (dd, J = 4.8, 1.6 Hz, 1H), 7.69 (s, 1H), 7.58 - 7.49 (m, 2H), 7.44 - 7.37 (m, 2H), 7.33 - 7.27 (m, 2H), 7.11 (d, J = 7.8 Hz, 2H), 7.07 - 6.98 (m, 2H), 6.53 (s, 1H).

[0589] (6) 중간체 5(6)의 합성

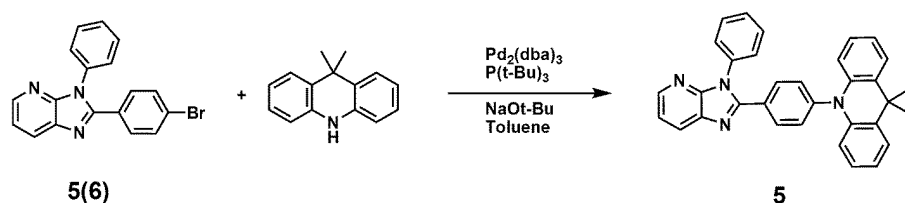


[0590]

[0591] 4-bromo-N-(2-(phenylamino)pyridin-3-yl)benzamide 0.60 g (1.0 eq, 1.6 mmol)과 p-톨루엔설폰산 0.10 g (0.33 eq, 0.54 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 자일렌 8 mL를 넣은 후 140°C에서 5시간동안 환류하며 교반시켰다. 반응종료 후 반응용기를 상온으로 식혀준 후 헥산을 넣어 고체결정을 얻었다. 얻은 고체를 클로로폼으로 녹여 에탄올을 이용한 재결정을 통하여 중간체 5(6)인 2-(4-bromophenyl)-3-phenyl-3H-imidazo[4,5-b]pyridine 0.5 g (수율 = 87.7%)를 얻었다.

[0592] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 8.49 (dd, J = 4.7, 1.3 Hz, 1H), 7.83 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.62 - 7.54 (m, 3H), 7.51 (s, 3H), 7.43 (dd, J = 8.1, 4.8 Hz, 1H), 7.41 - 7.37 (m, 2H), 7.19 (d, J = 8.0 Hz, 1H).

[0593] (7) 화합물 5의 합성



[0594]

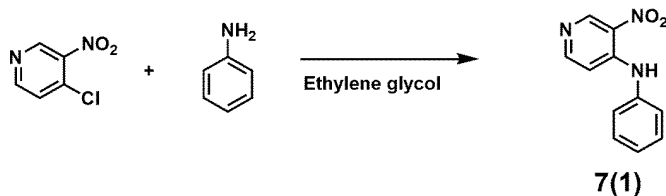
[0595] 2-(4-bromophenyl)-3-phenyl-3H-imidazo[4,5-b]pyridine 0.50 g (1.0 eq, 1.4 mmol)과 9,10-dihydro-9,9-dimethylacridine 0.33 g (1.1 eq, 1.6 mmol)과 트리스(디벤질리테리아세톤)디팔라듐(0) 0.13 g (0.10 eq, 0.14 mmol)과 Tri-tert-butylphosphine 0.060 g (0.20 eq, 0.29 mmol)과 Sodium tert-butoxide 0.52 g (4.0 eq, 5.7 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 톨루엔 8.5 mL를 위 반응용기에 넣어 화합물들을 녹인 후 110 °C에서 3시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발 시켰다. 컬럼 크로마토그래피 후 디클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 최종 화합물 5 (9,10-dihydro-9,9-dimethyl-10-(4-(3-

phenyl-3H-imidazo[4,5-b]pyridin-2-yl)phenyl)acridine) 0.54 g (수율 79%)을 얻었다.

[0596]  $^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  8.44 (dd,  $J = 4.8, 1.4$  Hz, 1H), 8.19 (dd,  $J = 8.0, 1.4$  Hz, 1H), 7.91 - 7.80 (m, 2H), 7.63 - 7.55 (m, 2H), 7.54 - 7.43 (m, 5H), 7.37 - 7.31 (m, 3H), 6.95 (dtd,  $J = 19.7, 7.3, 1.5$  Hz, 4H), 6.26 (dd,  $J = 8.0, 1.3$  Hz, 2H), 1.66 (s, 6H).APCI-MS ( $m/z$ ): 479 [M<sup>+</sup>].

[0597] **합성예 2: 화합물 7의 합성**

[0598] (1) 중간체 7(1)의 합성

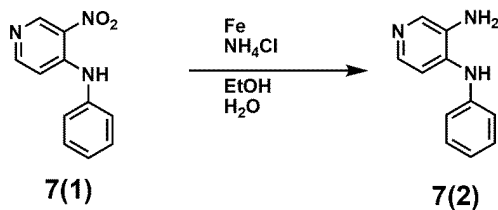


[0599]

[0600] 4-chloro-3-nitropyridine 0.50 g (1.0 eq, 3.2 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 에틸렌글리콜 10 mL를 위 플라스크에 넣고 교반시키며 화합물들을 녹인 후, Aniline 0.58 ml (2.0 eq, 6.3 mmol)을 넣고 140 °C에서 8시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수로 씻어내고 ethyl acetate로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후, 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 7(1)인 3-nitro-*N*-phenylpyridin-4-amine 0.57 g (수율 83%)을 얻었다.

[0601]  $^1\text{H NMR}$  : 9.78 - 9.49 (s, 1H), 9.29 (s, 1H), 8.25 (dd,  $J = 6.1, 0.5$  Hz, 1H), 7.58 - 7.42 (m, 2H), 7.36 (dd,  $J = 10.8, 4.2$  Hz, 1H), 7.32 - 7.27 (m, 2H), 6.95 (d,  $J = 6.2$  Hz, 1H).

[0602] (2) 중간체 7(2)의 합성

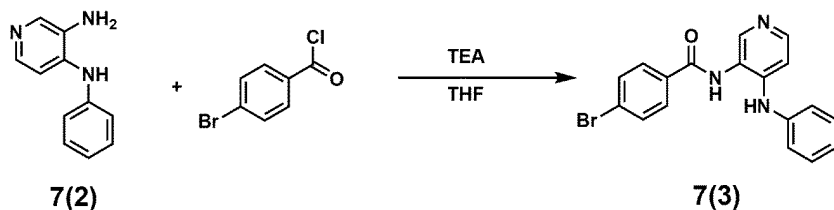


[0603]

[0604] 3-nitro-*N*-phenylpyridin-4-amine 0.57 g (1.0 eq, 2.6 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 에탄올 38 mL를 위 플라스크에 넣고 교반시키며 화합물들을 녹이고 환류시키며 교반시켰다. Iron 1.5 g (10 eq, 26 mmol)을 넣고 용액에 잘 퍼지도록 교반시킨 후, ammonium chloride 1.4 g (10 eq, 26 mmol)을 증류수 11 mL에 녹여 첨가한 후, 2시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 셀라이트를 통해 filtration 후, 증류수로 씻어내고 Ethyl acetate로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후, 디클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 중간체 7(2)인 *N*-phenylpyridine-3,4-diamine 0.39 g (수율 80%)을 얻었다.

[0605]  $^1\text{H NMR}$  : 8.01 (d,  $J = 58.6$  Hz, 2H), 7.34 (t,  $J = 7.8$  Hz, 2H), 7.17 - 7.05 (m, 3H), 7.01 (s, 1H), 5.97 (s, 1H), 3.39 (s, 2H).

[0606] (3) 중간체 7(3)의 합성



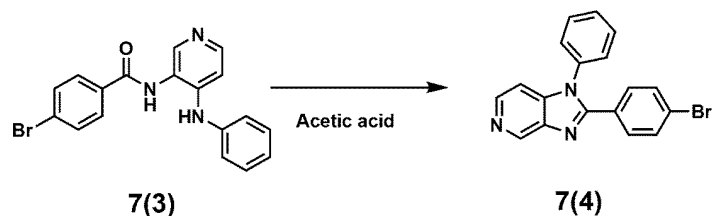
[0607]

[0608] *N*-phenylpyridine-3,4-diamine 0.39 g (1.0 eq, 1.8 mmol)과 4-bromobenzoyl chloride 0.40 g (1.0 eq, 1.8 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. THF 8 mL를 위 플라스크에 넣어 화합물들을 녹인

후, Triethylamine 0.3 mL를 천천히 적가하여 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수로 washing하여 생성되는 침전물을 여과하여 중간체 7(3)인 4-bromo-*N*-(4-(phenylamino)pyridin-3-yl)benzamide 0.54 g (수율 82%)을 얻었다.

[0609]  $^1\text{H NMR}$  : 9.34 (s, 1H), 8.75 (d,  $J = 6.4$  Hz, 1H), 7.94 (d,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 7.88 (d,  $J = 7.7$  Hz, 1H), 7.69 - 7.62 (m, 2H), 7.58 - 7.49 (m, 2H), 7.51 - 7.43 (m, 2H), 7.39 - 7.32 (m, 2H), 7.20 (d,  $J = 7.8$  Hz, 2H).

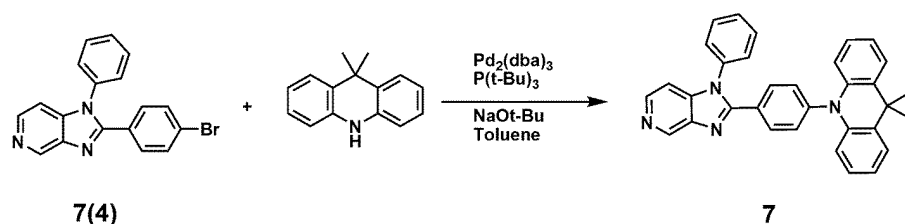
[0610] (4) 중간체 7(4)의 합성



[0611] 4-bromo-*N*-(4-(phenylamino)pyridin-3-yl)benzamide 0.50 g (1.0 eq, 1.4 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. Acetic acid 10 mL를 위 플라스크에 넣어 화합물들을 녹인 후, 120 °C에서 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 sodium carbonate 수용액으로 중성으로 맞춘 뒤, 증류수로 씻어내고 ethyl acetate로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후, 디클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 중간체 7(4)인 2-(4-bromophenyl)-1-phenyl-1*H*-imidazo[4,5-*c*]pyridine 0.28 g (수율 67%)을 얻었다.

[0613]  $^1\text{H NMR}$  : 9.21 (s, 1H), 8.45 (d,  $J = 4.9$  Hz, 1H), 7.63 - 7.51 (m, 3H), 7.51 - 7.40 (m, 4H), 7.35 - 7.27 (m, 2H), 7.20 (d,  $J = 5.5$  Hz, 1H).

[0614] (4) 화합물 7의 합성

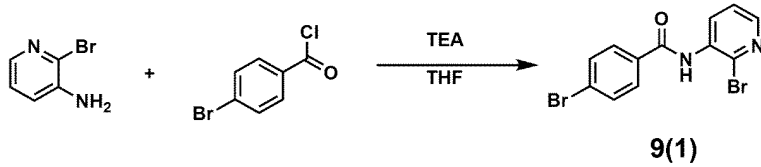


[0615] 2-(4-bromophenyl)-1-phenyl-1*H*-imidazo[4,5-*c*]pyridine 0.50 g (1.0 eq, 1.4 mmol)과 9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine 0.33 g (1.1 eq, 1.6 mmol), Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0) 0.13 g (0.10 eq, 0.14 mmol), Sodium tert-butoxide 0.52 g (4.0 eq, 5.7 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. Toluene 9 mL를 위 플라스크에 넣어 화합물들을 녹인 뒤 Tri-tert-butylphosphine 0.060 g (0.20 eq, 0.28 mmol)를 첨가하고 110 °C에서 2시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수로 씻어내고 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피 후 에틸아세테이트 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 최종 화합물 7 (9,9-dimethyl-10-(4-(1-phenyl-1*H*-imidazo[4,5-*c*]pyridin-2-yl)phenyl)-9,10-dihydroacridine) 0.35 g (수율 52%)을 얻었다.

[0617]  $^1\text{H NMR}$  : 9.24 (s, 1H), 8.47 (d,  $J = 5.1$  Hz, 1H), 7.97 - 7.71 (m, 2H), 7.67 - 7.49 (m, 3H), 7.48 - 7.42 (m, 2H), 7.43 - 7.37 (m, 2H), 7.35 - 7.29 (m, 2H), 7.23 (t,  $J = 6.7$  Hz, 1H), 7.03 - 6.86 (m, 4H), 6.25 (dd,  $J = 8.0, 1.4$  Hz, 2H), 1.66 (s, 6H). APCI-MS ( $m/z$ ) : 479[M<sup>+</sup>].

[0618] 합성예 3: 화합물 9의 합성

[0619] (1) 중간체 9(1)의 합성

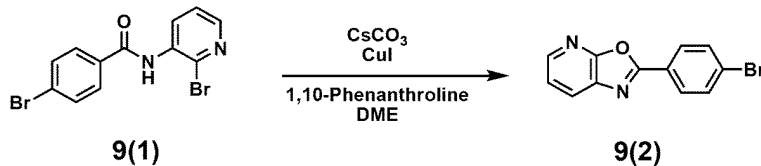


[0620]

[0621] 2-브로모피리딘-3-아민 4.5 g (1.0 eq, 26 mmol)과 4-bromobenzoyl chloride 8.6 g (1.5 eq, 39 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 테트라하이드로퓨란 72 mL를 넣고 교반시키며 온도를 0 °C로 낮춰준다. 이 온도를 유지하며 트리에틸아민 6.0 mL을 천천히 적가한 이후 상온에서 4시간 동안 교반하였다. 반응을 종료한 후 증류수 및 에틸아세테이트를 이용하여 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피 및 다이클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 중간체 9(1)인 4-bromo-N-(2-bromopyridin-3-yl)benzamide 9.2 g (수율 97%)를 얻었다.

[0622] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 8.83 (dd, J = 8.1, 1.8 Hz, 1H), 8.43 (s, 1H), 8.15 (dd, J = 4.6, 1.8 Hz, 1H), 7.82 - 7.77 (m, 2H), 7.72 - 7.67 (m, 2H), 7.34 (dd, J = 8.1, 4.6 Hz, 1H).

[0623] (2) 중간체 9(2)의 합성

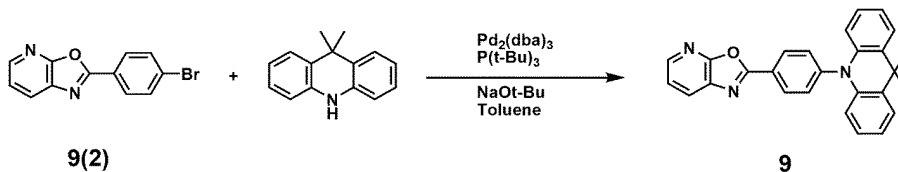


[0624]

[0625] 4-bromo-N-(2-bromopyridin-3-yl)benzamide 9.4 g (1 eq, 26 mmol), 탄산 세슘 13 g (1.5 eq, 40 mmol), 요오드화 구리(I) 0.50 g (0.10 eq, 2.6 mmol), 1,10-phenanthroline 0.96 g (0.20 eq, 5.3 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 디메톡시에탄 210 mL를 넣고 80 °C에서 24시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응종료 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 추출한 유기층은 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후 셀라이트를 통해 여과한 뒤 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통해 중간체 9(2)인 2-(4-bromophenyl)oxazolo[5,4-b]pyridine 5.2 g (수율 72%)을 얻었다.

[0626] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 8.37 (dd, J = 4.9, 1.5 Hz, 1H), 8.20 - 8.14 (m, 2H), 8.08 (dd, J = 7.8, 1.6 Hz, 1H), 7.73 - 7.68 (m, 2H), 7.37 (dd, J = 7.8, 4.9 Hz, 1H).

[0627] (3) 화합물 9의 합성



[0628]

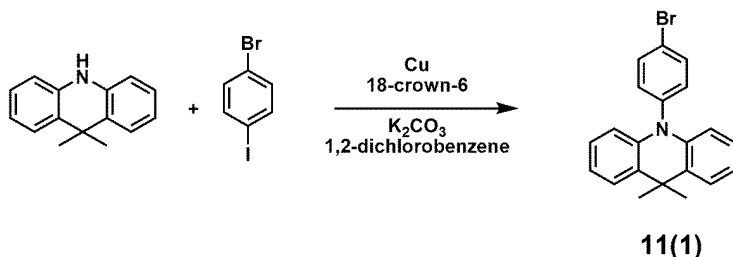
[0629] 2-(4-bromophenyl)oxazolo[5,4-b]pyridine 3.0 g (1.0 eq, 11 mmol)과 9,10-dihydro-9,9-dimethylacridine 2.5 g (1.1 eq, 12 mmol)과 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 1.0 g (0.050 eq, 1.1 mmol)과 Tri-tert-butylphosphine 0.22 g (0.10 eq, 1.1 mmol)과 Sodium tert-butoxide 4.0 g (4.0 eq, 44 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 톨루엔 50 mL를 위 반응용기에 넣어 화합물들을 녹인 후 30 °C에서 1시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발 시켰다. 컬럼 크로마토그래피 후 디클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 최종 화합물 9 (9,10-dihydro-9,9-dimethyl-10-(4-(oxazolo[5,4-b]pyridin-2-yl)phenyl)acridine) 2.7 g (수율 61%)을 얻었다.

[0630] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 8.55 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 8.40 (dd, J = 5.0, 1.5 Hz, 1H), 8.12 (dd, J = 7.8, 1.5 Hz, 1H), 7.56 (d, J = 8.5 Hz, 2H), 7.48 (dd, J = 7.5, 1.6 Hz, 2H), 7.40 (dd, J = 7.8, 5.0 Hz, 1H),

6.98 (dtd, J = 18.2, 7.3, 1.4 Hz, 4H), 6.34 (dt, J = 12.9, 6.5 Hz, 2H), 1.71 (s, 6H), APCI-MS (m/z) : 403 [M+].

[0631] **합성예 4: 화합물 11의 합성**

[0632] (1) 중간체 11(1)의 합성

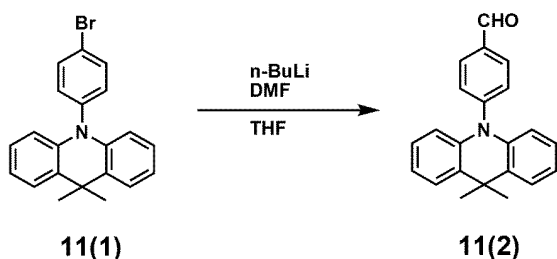


[0633]

[0634] 9,10-dihydro-9,9-dimethylacridine 3.0 g (1.0 eq, 14 mmol), 4-브로모아이오도벤젠 5.3 g (1.3 eq, 19 mmol), 18-crown-6 0.30 g (0.080 eq, 1.2 mmol), 구리(파우더) 0.47 g (0.52 eq, 7.5 mmol), 탄산칼륨 7.9 g (4.0 eq, 57 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 1,2-다이클로로벤젠 20 mL를 위 반응용기에 넣고 190 °C에서 2시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 11(1)인 10-(4-bromophenyl)-9,10-dihydro-9,9-dimethylacridine 3.8g (수율 72%)을 얻었다.

[0635] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 7.78 - 7.73 (m, 2H), 7.45 (dd, J = 7.6, 1.6 Hz, 2H), 7.24 - 7.20 (m, 2H), 7.00 - 6.91 (m, 4H), 6.25 (dd, J = 8.1, 1.4 Hz, 2H), 1.70 - 1.66 (s, 6H).

[0636] (2) 중간체 11(2)의 합성

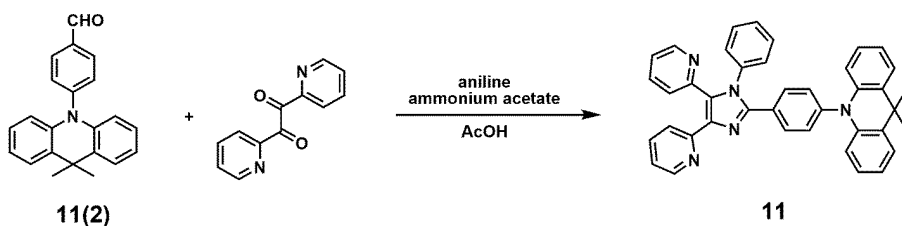


[0637]

[0638] 10-(4-bromophenyl)-9,10-dihydro-9,9-dimethylacridine 3.8 g (1.0 eq, 5.2 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 테트라하이드로퓨란 8 mL를 넣고 화합물을 녹인 후 드라이아이스를 이용하여 온도를 -78 °C로 맞춰준다. 이 온도를 유지하며 1.6 M n-부틸리튬 6.2 mL (1.5 eq, 7.7 mmol)를 천천히 반응용기에 적가 한 후 90분 동안 교반하였다. 디메틸포름아마이드 1.2 mL (1.5 eq, 7.7 mmol)을 위 반응용기에 첨가 한 후 상온에서 3시간동안 교반하였다. 반응 종료 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 11(2)인 4-(9,9-dimethylacridin-10(9H)-yl)benzaldehyde 2.4 g (수율 74%)을 얻었다.

[0639] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 10.12 (s, 1H), 8.17 - 8.10 (m, 2H), 7.56 - 7.52 (m, 2H), 7.51 - 7.47 (m, 2H), 7.02 - 6.96 (m, 4H), 6.36 - 6.30 (m, 2H), 1.69 (s, 6H).

[0640] (3) 화합물 11의 합성



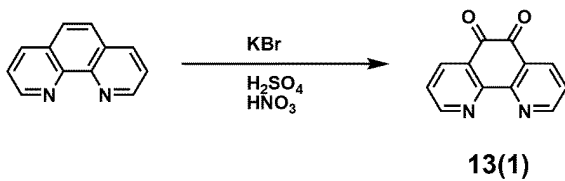
[0641]

[0642] 4-(9,9-dimethylacridin-10(9H)-yl)benzaldehyde 0.74 g (1 eq, 2.4 mmol), 2,2'-피리딜(2,2'-pyridil) 0.50 g (1.0 eq, 2.4 mmol), 아닐린 1.1 ml (5.0 eq, 12 mmol), 암모늄 아세테이트 2.3 g (12 eq, 29 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 아세트산 15 mL를 넣은 후 120 °C에서 4시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 수산화 나트륨 수용액을 이용해 중성을 맞춰준 후 증류수로 씻어주고 클로로폼으로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시키고 셀라이트를 통해 여과한 뒤 용매를 증발시켰다. 컬럼 크로마토그래피 및 디클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정 후 최종 화합물 **11** (9,10-dihydro-9,9-dimethyl-10-(4-(1-phenyl-4,5-di(pyridin-2-yl)-1H-imidazol-2-yl)phenyl)acridine) 0.61 g(수율 45%)을 얻었다.

[0643] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 8.49 (d, J = 25.3 Hz, 2H), 7.87 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.74 - 7.69 (m, 2H), 7.65 (t, J = 6.9 Hz, 1H), 7.62 - 7.55 (m, 1H), 7.45 - 7.37 (m, 3H), 7.33 - 7.28 (m, 3H), 7.25 - 7.19 (m, 4H), 7.16 - 7.09 (m, 2H), 6.94 (dtd, J = 23.4, 7.3, 1.5 Hz, 4H), 6.24 (dd, J = 8.1, 1.3 Hz, 2H), 1.66 (s, 6H), APCI-MS (m/z) : 582 [M<sup>+</sup>].

[0644] **합성예 5: 화합물 13의 합성**

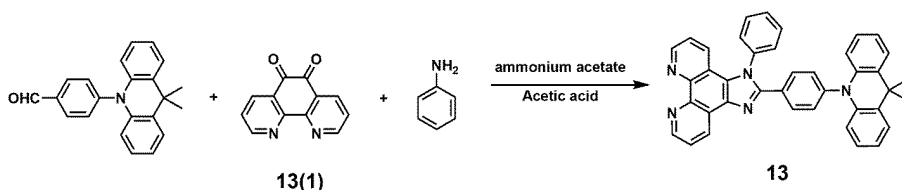
[0645] (1) 중간체 13(1)의 합성



[0646] 1,10-phenanthroline 2.0 g (1.0 eq, 11 mmol)과 Potassium bromide 2.1 g (1.6 eq, 17 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 반응용기를 0 °C로 냉각시킨 후, 황산 20 mL 및 질산 20 mL가 혼합된 용액 40 mL를 위 플라스크에 천천히 적가하여 넣고 교반시키며 화합물들을 녹인 후 100 °C에서 3시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 Sodium carbonate로 중성으로 맞춘 뒤, 증류수로 씻어내고 디클로로메탄으로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후, 디클로로메탄 및 에탄올을 이용한 재결정을 통하여 중간체 13(1)인 1,10-phenanthroline-5,6-dione 1.3 g (수율 54%)을 얻었다.

[0648] <sup>1</sup>H NMR : 9.13 (dd, J = 4.7, 1.8 Hz, 2H), 8.52 (dd, J = 7.9, 1.8 Hz, 2H), 7.60 (dd, J = 7.9, 4.7 Hz, 2H).

[0649] (2) 화합물 13의 합성



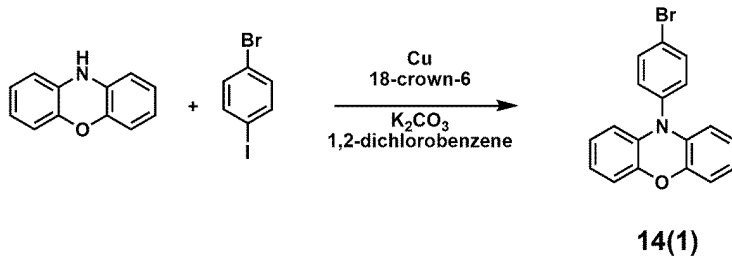
[0650] 1,10-phenanthroline-5,6-dione 0.50 g (1.0 eq, 2.4 mmol)과 4-(9,9-dimethylacridin-10(9H)-yl)benzaldehyde 0.74 g (1.0 eq, 2.4 mmol), Aniline 1.1 ml (5.0 eq, 12 mmol), ammonium acetate 2.1 g (12 eq, 29 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. Acetic acid 15 mL를 위 플라스크에 넣어 화합물들을 녹인 뒤 130 °C에서 16시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 sodium carbonate로 중성으로 맞춘 뒤, 증류수로 씻어내고 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피 후 에탄올을 이용한 재결정을 통하여 최종 화합물 **13** (2-(4-(9,9-dimethylacridin-10(9H)-yl)phenyl)-1-phenyl-1H-imidazo[4,5-f][1,10]phenanthroline) 0.50 g (수율 37%)을 얻었다.

[0652] <sup>1</sup>H NMR : 9.21 (ddd, J = 9.8, 6.2, 1.8 Hz, 2H), 9.07 (dt, J = 23.2, 11.6 Hz, 1H), 7.91 - 7.83 (m, 2H), 7.79 (dd, J = 8.1, 4.4 Hz, 1H), 7.74 - 7.68 (m, 3H), 7.67 - 7.60 (m, 2H), 7.51 (dd, J = 8.4, 1.6 Hz, 1H), 7.48 - 7.43 (m, 2H), 7.32 (ddd, J = 8.5, 7.5, 3.1 Hz, 3H), 7.01 - 6.87 (m, 4H), 6.29 - 6.17 (m,

2H), 1.36 (dd, J = 17.1, 5.7 Hz, 6H). APCI-MS (m/z) : 580[M+].

[0653] **합성에 6: 화합물 14의 합성**

[0654] (1) 중간체 14(1)의 합성

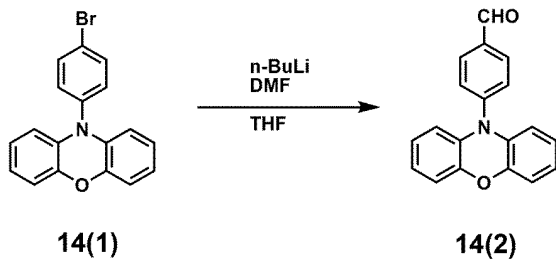


[0655]

[0656] 10H-phenoxazine 0.80 g (1.0 eq, 4.4 mmol), 4-bromiodobenzene 1.6 g (1.3 eq, 5.7 mmol), 18-Crown-6 0.090 g (0.080 eq, 0.35 mmol), 구리(파우더) 0.14 g (0.52 eq, 2.3 mmol), 탄산칼륨 2.4 g (4.0 eq, 17 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 1,2-다이클로로벤젠 11 mL를 위 반응용기에 넣고 190 °C에서 2시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통해 중간체 14(1)인 10-(4-bromophenyl)-10H-phenoxazine 1.1 g (수율 72%)을 얻었다.

[0657] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 7.75 - 7.70 (m, 2H), 7.25 - 7.22 (m, 2H), 6.67 (dtd, J = 9.2, 7.8, 1.6 Hz, 4H), 6.60 (td, J = 7.6, 1.7 Hz, 2H), 5.94 - 5.88 (m, 2H).

[0658] (2) 중간체 14(2)의 합성

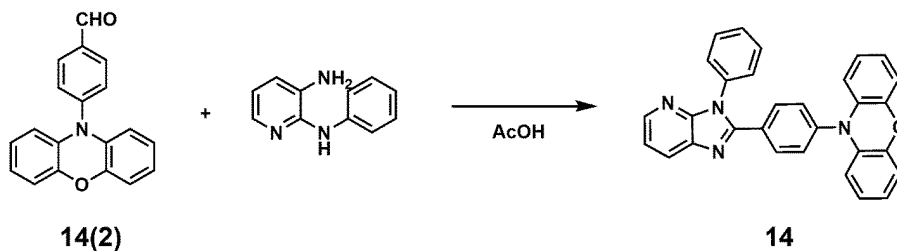


[0659]

[0660] 10-(4-bromophenyl)-10H-phenoxazine 0.80 g (1.0 eq, 2.4 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 테트라하이드로퓨란 8 mL를 넣고 화합물을 녹인 후 트라이아이스를 이용하여 온도를 -78 °C로 맞춰준다. 이 온도를 유지하며 1.6 M n-부틸리튬 2.2 mL (1.5 eq, 3.5 mmol)를 천천히 반응용기에 적가 한 후 90분 동안 교반하였다. 디메틸포름아마이드 0.27 mL (1.5 eq, 3.5 mmol)을 위 반응용기에 첨가 한 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 14(2)인 4-(10H-phenoxazin-10-yl)benzaldehyde 0.40 g (수율 59%)을 얻었다.

[0661] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 10.11 (s, 1H), 8.16 - 8.08 (m, 2H), 7.62 - 7.51 (m, 2H), 6.71 (dtd, J = 9.3, 7.9, 1.6 Hz, 4H), 6.61 (ddd, J = 17.8, 10.1, 6.1 Hz, 2H), 5.96 (dd, J = 8.0, 1.4 Hz, 2H).

[0662] (3) 화합물 14의 합성



[0663]

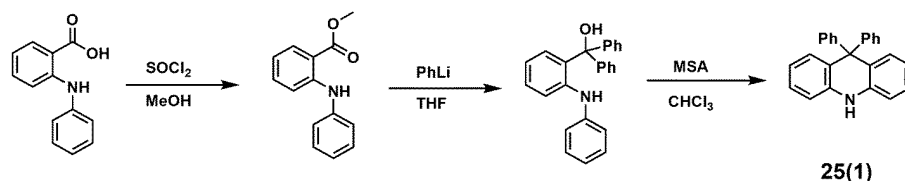
[0664] 4-(10H-phenoxazin-10-yl)benzaldehyde 0.28 g (1.2 eq, 0.97 mmol)과 N2-phenylpyridine-2,3-diamine 0.15 g

(1.0 eq, 0.81 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 아세트산 5 mL를 넣어준 후 120 °C에서 3시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응 종료 후 탄산나트륨으로 중성을 맞춰준 후 증류수 및 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이후 컬럼 크로마토그래피 후 디클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 최종 화합물 14 (10-(4-(3-phenyl-3H-imidazo[4,5-b]pyridin-2-yl)phenyl)-10H-phenoxazine) 0.25 g (수율 69%)을 얻었다.

[0665] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 8.42 (dd, J = 4.8, 1.5 Hz, 1H), 8.17 (dd, J = 8.0, 1.5 Hz, 1H), 7.85 - 7.81 (m, 2H), 7.59 - 7.52 (m, 2H), 7.52 - 7.48 (m, 1H), 7.44 (dt, J = 8.7, 2.7 Hz, 2H), 7.35 - 7.30 (m, 2H), 7.27 - 7.23 (m, 1H), 6.69 - 6.61 (m, 4H), 6.58 (td, J = 7.6, 1.7 Hz, 2H), 5.92 (dd, J = 7.9, 1.4 Hz, 2H).APCI-MS (m/z): 453 [M+].

[0666] **합성예 7: 화합물 25의 합성**

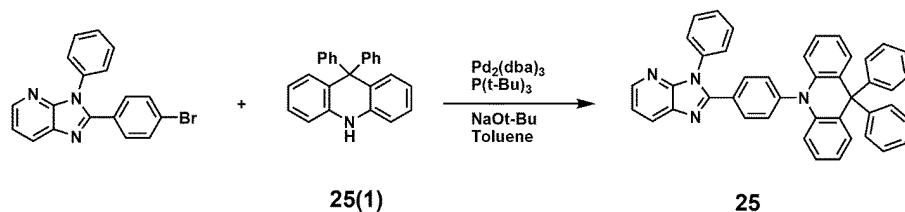
[0667] (1) 중간체 25(1)의 합성



[0668] [0669] Methyl 2-(phenylamino)benzoate 1.0 g (1.0 eq, 4.4 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. THF 17 mL를 위 플라스크에 넣고 교반시키며 화합물들을 녹인 후 -78 °C로 냉각시켰다. 1.9 M Phenyllithium (3.0 eq, 7.0 ml)을 천천히 적가하고 1시간 동안 -78 °C에서 교반시켰다. 반응용액을 0 °C에서 2시간 동안 교반시킨 뒤, 상온에서 4시간 동안 추가적으로 더 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수로 씻어내고 chloroform으로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 건조시킨 반응물을 플라스크에 옮기고 Chloroform 20 mL를 넣어 화합물을 녹인 후 Methanesulfonic acid 1 mL를 넣어준 후 1시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 sodium bicarbonate 수용액으로 중성을 맞춘 후 증류수 및 chloroform으로 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 컬럼 크로마토그래피 후 Chloroform 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 중간체 25(1)인 9,9-diphenyl-9,10-dihydroacridine 1.1 g (수율 73%)을 얻었다.

[0670] <sup>1</sup>H NMR : 7.26 - 7.15 (m, 8H), 6.96 - 6.94 (m, 4H), 6.89 (td, J = 7.5 Hz, 1.2 Hz, 2H), 6.83 (dd, J = 7.8 Hz, 1.5 Hz, 2H), 6.80 (dd, J = 7.9 Hz, 1.1 Hz, 2H), 6.28 (s, 1H).

[0671] (2) 화합물 25의 합성



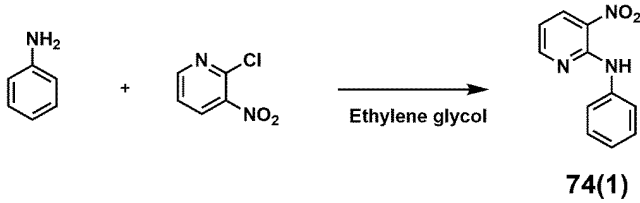
[0672] [0673] 2-(4-bromophenyl)-3-phenyl-3H-imidazo[4,5-b]pyridine 0.50 g (1.0 eq, 1.4 mmol)과 9,9-diphenyl-9,10-dihydroacridine 0.52 g (1.1 eq, 1.6 mmol), tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0) 0.13 g (0.10 eq, 0.14 mmol), Sodium tert-butoxide 0.52 g (4.0 eq, 5.7 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. Toluene 9 mL를 위 플라스크에 넣어 화합물들을 녹인 뒤 Tri-tert-butylphosphine 0.060 g (0.20 eq, 0.28 mmol)를 첨가하고 110 °C에서 2시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수로 씻어내고 에틸아세테이트로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이후 컬럼 크로마토그래피 후 디클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 최종 화합물 25 (9,9-diphenyl-10-(4-(3-phenyl-3H-imidazo[4,5-b]pyridin-2-yl)phenyl)-9,10-dihydroacridine) 0.57 g (수율 66%)을 얻었다.

[0674] <sup>1</sup>H NMR : 8.46 - 8.38 (m, 1H), 8.17 (dt, J = 10.5, 5.3 Hz, 1H), 7.81 - 7.72 (m, 2H), 7.60 - 7.53 (m,

2H), 7.53 - 7.47 (m, 1H), 7.47 - 7.41 (m, 2H), 7.34 (dd,  $J = 8.0, 4.8$  Hz, 1H), 7.25 - 7.20 (m, 6H), 7.11 - 7.06 (m, 2H), 7.06 - 7.01 (m, 2H), 7.00 - 6.94 (m, 4H), 6.92 - 6.86 (m, 4H), 6.39 (d,  $J = 8.2$  Hz, 2H). APCI-MS ( $m/z$ ) : 603[M<sup>+</sup>]

[0675] **합성예 8: 화합물 74의 합성**

[0676] (1) 중간체 74(1)의 합성

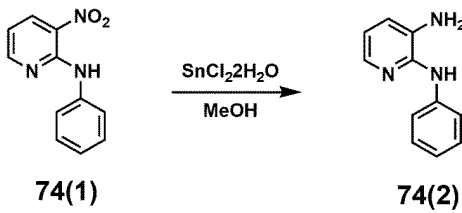


[0677]

[0678] 반응용기에 2-chloro-3-nitropyridine 10 g (1.0 eq, 63 mmol)을 넣고 진공건조한 이후 질소가스를 채웠다. 이후 아닐린 5.8 mL (1.0 eq, 63 mmol)과 에틸렌글리콜 100 mL를 넣고 140 °C에서 8시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응종료 후 반응용기를 상온으로 식혀준 후, 증류수와 에틸아세테이트를 이용하여 유기층을 추출하고, 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 74(1)인 3-nitro-*N*-phenylpyridin-2-amine 12 g (수율 87%)를 얻었다.

[0679] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 10.12 (s, 1H), 8.53 (dd,  $J = 8.3, 1.8$  Hz, 1H), 8.49 (dd,  $J = 4.5, 1.8$  Hz, 1H), 7.65 (dt,  $J = 8.7, 1.6$  Hz, 2H), 7.42 - 7.38 (m, 2H), 7.21 - 7.17 (m, 1H), 6.83 (dd,  $J = 8.3, 4.5$  Hz, 1H).

[0680] (2) 중간체 74(2)의 합성

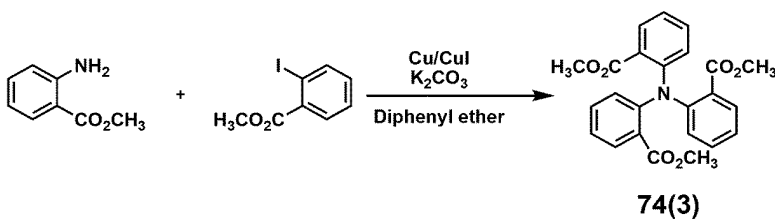


[0681]

[0682] 3-nitro-*N*-phenylpyridin-2-amine 12 g (1.0 eq, 55 mmol)과 SnCl<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O 37 g (3.0 eq, 160 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 메탄올 300 mL를 넣고 60 °C에서 2시간동안 환류하며 교반시켰다. NaHCO<sub>3</sub> 수용액을 넣어 중성을 맞춰 반응을 종료한 후 증류수 및 에틸아세테이트를 이용하여 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 다이클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 중간체 74(2)인 *N*-phenylpyridine-2,3-diamine 8.2 g (수율 81%)를 얻었다.

[0683] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 7.84 (dd,  $J = 4.9, 1.5$  Hz, 1H), 7.31 - 7.24 (m, 4H), 7.02 (dd,  $J = 7.6, 1.6$  Hz, 1H), 6.96 (tt,  $J = 7.1, 1.6$  Hz, 1H), 6.78 (dd,  $J = 7.6, 4.9$  Hz, 1H), 6.19 (s, 1H), 3.41 (s, 2H).

[0684] (3) 중간체 74(3)의 합성



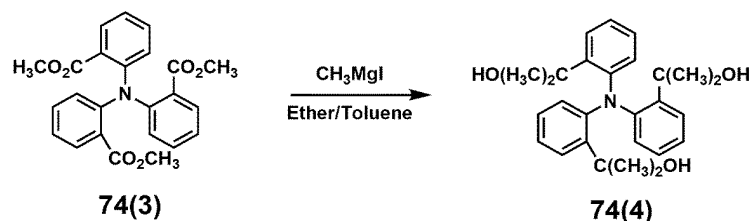
[0685]

[0686] Methyl anthranilate (9.0 mL, 0.070 mol), methyl 2-iodobenzoate (30 mL, 0.20 mol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (22 g, 0.16 mol), Cu (0.90 g, 14 mmol) 그리고 CuI (1.3 g, 6.8 mmol) 를 반응 용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를

채웠다. 이후 diphenylether (80 mL)를 넣고 190 °C에서 6일 동안 환류시키며 교반시켰다. 용매를 감압하여 제거한 후 걸러진 고체를 EA와 메탄올을 이용하여 녹인 후 컬럼 크로마토그래프를 통해 중간체 74(3)인 노란색 고체 triester tertiary amine(22 g, 수율 75%)을 얻었다

[0687] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) d 7.58 (d, J 7.7 Hz, 3H), 7.35 (t, J 7.6 Hz, 3H), 7.0 - 7.14 (m, 6H), 3.37 (s, 9H).

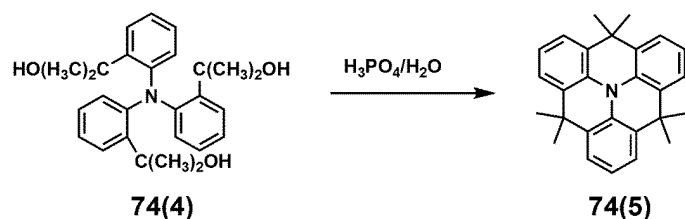
[0688] (4) 중간체 74(4)의 합성



[0689]

[0690] Methyl magnesium iodide (2M) 45 mL (15 eq, 89 mmol)를 진공건조 후 질소를 채운 반응용기에 넣은 후 교반하였다. 중간체 74(3) triester amine 2.5g (1.0 eq, 2.0 mmol)을 톨루엔 70ml에 녹인 후 천천히 반응 용기에 넣어준다. 110 °C에서 15시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 상온으로 식힌 후 황산을 통해 천천히 반응을 종결 시킨 후 증류수로 씻어내고 MC로 유기층을 추출하였다. magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 컬럼 크로마토그래피 (EA:Hexane = 1:5)를 이용한 방법을 통해 중간체 74(4)인 하얀색 고체 triol amine 0.90 g (수율 36%)을 얻었다. <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) d 7.32 (d, J 9.0 Hz, 3H), 7.0 - 7.15 (m, 6H), 6.68 (d, J 7.3 Hz, 3H), 5.37 (s, 3H), 1.67 (s, 9H), 0.84 (s, 9H).

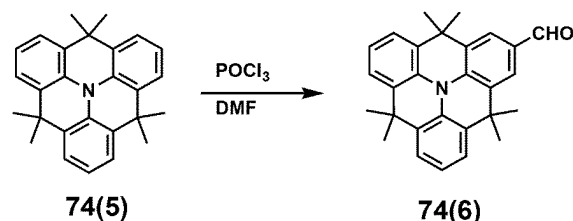
[0691] (5) 중간체 74(5)의 합성



[0692]

[0693] 중간체 74(4) Triol amine(0.90 g, 2.2 mmol)을 반응 용기에 넣은 후 85% 인산 수용액(10 mL) 를 넣은 후 2시간 동안 상온에서 교반하였다. 반응 종료 후 NaOH를 통해 반응을 종결 시킨 후 증류수로 씻어내고 MC로 유기층을 추출하였다. 이 후 핵산을 이용하여 컬럼 크로마토그래피를 진행하여 중간체 74(5)인 하얀색 고체 triaryl amine 0.46 g (수율 59%)을 얻었다. <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) d 7.37 (d, J 7.7Hz, 6H), 7.12 (t, J 7.8Hz, 3H), 1.63 (s, 18H).

[0694] (6) 중간체 74(6)의 합성



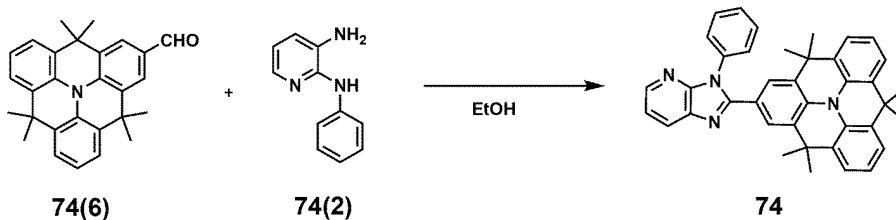
[0695]

[0696] 중간체 74(5) Triaryl amine 0.40 g(1.0 eq, 1.1 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. DMF 40 mL를 넣고 얼음을 이용하여 0 °C로 반응용기를 냉각하였다 다른 반응용기에 POCl<sub>3</sub> 1.7 mL와 DMF 5mL를 섞은 후 0 °C로 반응용기를 냉각한 후 천천히 적가하고 상온에서 갈색이 될 때까지 교반하였다. 이 후 80 °C로 온도를 올린 후 가열시키며 15시간 교반하였다. 반응 종료 후, sodium acetate를 통해 반응을 종결 시킨 후 반응 용액을 MC로 추출하였다. Magnesium sulfate로 물을 건조시키고 셀라이트를 통한 여과 후 컬럼 크로마토그래피를 통해 중간체 74(6)인 노란색 고체 4,4,8,8,12,12-hexamethyl-8,12-dihydro-4H-

benzo[9,1]quinolizinoacridine-2-carbaldehyde 0.29 g (수율 67%)를 얻었다.

[0697]  $^1\text{H}$  NMR (300 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  9.93 (s, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.42 (dd,  $J$  7.6, 2.3 Hz, 4H), 7.20 (t,  $J$  7.6 Hz, 2H), 1.67 (s, 6H), 1.65 (s, 12H).

[0698] (9) 화합물 74의 합성



[0699]  $N^2$ -phenylpyridine-2,3-diamine 0.14 g (1.0 eq, 7.6 mmol)과 4,4,8,8,12,12-hexamethyl-8,12-dihydro-4H-benzo[9,1]quinolizinoacridine-2-carbaldehyde 0.33 g (1.1 eq, 0.83 mmol) 반응 용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 이 후 Ethanol 10 mL를 첨가 한 후 80 °C에서 3일동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수로 씻어내고 EA를 통해 유기물을 추출하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피 (EA:Hexane 1:4)를 한 후 MC와 Hexane 을 이용하여 재결정하여 노란색 고체 최종 화합물 74 0.11 g (수율 26%)를 얻었다.

[0701]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  8.36 (dd,  $J$  = 4.8, 1.3 Hz, 1H), 8.17 (dd,  $J$  = 8.0, 1.3 Hz, 1H), 7.65 (s, 2H), 7.55 (t,  $J$  = 7.6 Hz, 2H), 7.48 (d,  $J$  = 7.4 Hz, 1H), 7.44 (dd,  $J$  = 6.8, 5.5 Hz, 2H), 7.38 (dd,  $J$  = 7.7, 1.4 Hz, 2H), 7.33 (dd,  $J$  = 7.7, 1.4 Hz, 2H), 7.29 (dd,  $J$  = 8.0, 4.8 Hz, 1H), 7.13 (t,  $J$  = 7.7 Hz, 2H), 1.63 (d,  $J$  = 7.4 Hz, 6H), 1.45 (s, 12H). )

[0702] **합성예 9: 화합물 83의 합성**

[0703] (1) 중간체 83(1)의 합성

[0704] 반응용기에 2-chloro-3-nitropyridine 10 g (1.0 eq, 63 mmol)을 넣고 진공건조한 이후 질소가스를 채웠다. 이 후 아닐린 5.8 ml (1.0 eq, 63 mmol)과 에틸렌글리콜 100 mL를 넣고 140 °C에서 8시간 동안 환류하며 교반시켰다. 반응종류 후 반응용기를 상온으로 식혀준 후, 증류수와 에틸아세테이트를 이용하여 유기층을 추출하고, 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 83(1)인 3-nitro-N-phenylpyridin-2-amine 12 g (수율 87%)를 얻었다.

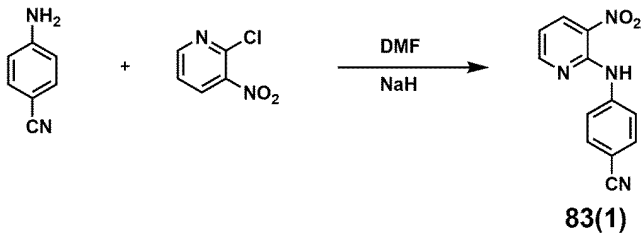
[0705]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  10.12 (s, 1H), 8.53 (dd,  $J$  = 8.3, 1.8 Hz, 1H), 8.49 (dd,  $J$  = 4.5, 1.8 Hz, 1H), 7.65 (dt,  $J$  = 8.7, 1.6 Hz, 2H), 7.42 - 7.38 (m, 2H), 7.21 - 7.17 (m, 1H), 6.83 (dd,  $J$  = 8.3, 4.5 Hz, 1H).

[0706] (2) 중간체 83(2)의 합성

[0707] 3-nitro-N-phenylpyridin-2-amine 12 g (1.0 eq, 55 mmol)과  $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  37 g (3.0 eq, 160 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 메탄올 300 mL를 넣고 60 °C에서 2시간동안 환류하며 교반시켰다.  $\text{NaHCO}_3$  수용액을 넣어 중성을 맞춰 반응을 종료한 후 증류수 및 에틸아세테이트를 이용하여 유기층을 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이 후 다이클로로메탄 및 헥산을 이용한 재결정을 통하여 중간체 83(2)인  $N^2$ -phenylpyridine-2,3-diamine 8.2 g (수율 81%)를 얻었다.

[0708]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  7.84 (dd,  $J$  = 4.9, 1.5 Hz, 1H), 7.31 - 7.24 (m, 4H), 7.02 (dd,  $J$  = 7.6, 1.6 Hz, 1H), 6.96 (tt,  $J$  = 7.1, 1.6 Hz, 1H), 6.78 (dd,  $J$  = 7.6, 4.9 Hz, 1H), 6.19 (s, 1H), 3.41 (s, 2H).

[0709] (3) 중간체 83(3)의 합성

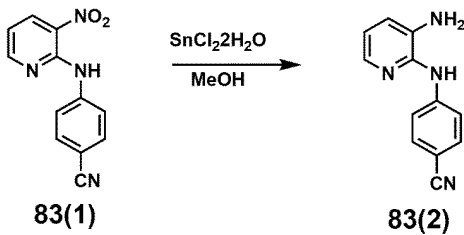


[0710]

[0711] 4-aminobenzonitrile을 2.0g (1.0 eq, 17 mmol)과 Sodium hydride 0.81g (2.0 eq, 34 mmol)를 반응 용기에 넣고 진공건조 한 후 질소를 채웠다. DMF를 넣고 30분 정도 교반한 후 2-chloro-3-nitropyridine를 넣고 온도를 100 °C에서 9시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 증류수로 반응을 종결시킨 후 씻어내고 ethyl acetate로 유기층을 추출하였다. magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이후 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 83(1)인 4-(3-nitropyridin-2-ylamino)benzonitrile 0.95g (수율 31%)을 얻었다.

[0712] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 10.36 (s, 1H), 8.85 - 8.29 (m, 2H), 8.08 - 7.76 (m, 2H), 7.81 - 7.50 (m, 2H), 7.02 (ddd, *J* = 19.9, 8.4, 4.6 Hz, 1H).

[0713] (2) 중간체 83(2)의 합성

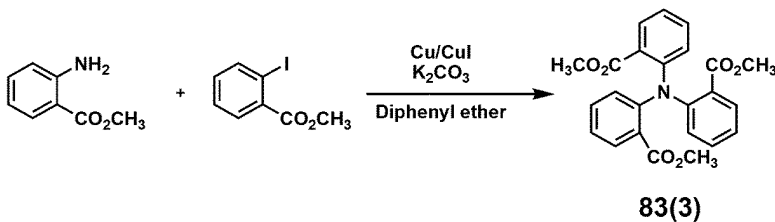


[0714]

[0715] 4-(3-nitropyridin-2-ylamino)benzonitrile 0.50 g (1.0 eq, 2.1 mmol)과 MeOH 15 mL를 반응 용기에 넣고 온도를 서서히 가하면서 Tin(II) chloride dihydrate 1.9 g (4.0 eq, 8.3 mmol)를 조금씩 넣는다. 이후 80 °C에서 1시간 30분 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 sodium bicarbonate로 반응을 종결시킨후 씻어내고 ethyl acetate로 유기층을 추출하였다. magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 용매를 증발시켰다. 이후 컬럼 크로마토그래피를 통하여 중간체 83(2)인 4-(3-aminopyridin-2-ylamino)benzonitrile 0.42 g (수율 96%)을 얻었다.

[0716] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 7.94 - 7.81 (m, 1H), 7.61 - 7.52 (m, 2H), 7.41 - 7.34 (m, 2H), 7.13 - 7.04 (m, 1H), 6.92 - 6.82 (m, 1H), 6.52 (s, 1H), 3.45 (s, 2H).

[0717] (3) 중간체 83(3)의 합성

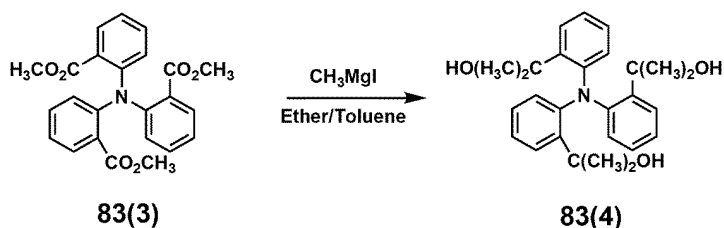


[0718]

[0719] Methyl anthranilate (9.0 mL, 0.070 mol), methyl 2-iodobenzoate (30 mL, 0.20 mol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (22 g, 0.16 mol), Cu (0.90 g, 14 mmol) 그리고 CuI (1.3 g, 6.8 mmol) 를 반응 용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 이후 diphenylether (80 mL)를 넣고 190 °C에서 6일 동안 환류시키며 교반시켰다. 용매를 감압하여 제거한 후 걸러진 고체를 EA와 메탄올을 이용하여 녹인 후 컬럼 크로마토그래피를 통해 중간체 83(3)인 노란색 고체 triester tertiary amine을 얻었다 22 g (수율 75%)

[0720]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) d 7.58 (d, J 7.7 Hz, 3H), 7.35 (t, J 7.6 Hz, 3H), 7.0 - 7.14 (m, 6H), 3.37 (s, 9H).

[0721] (4) 중간체 83(4)의 합성

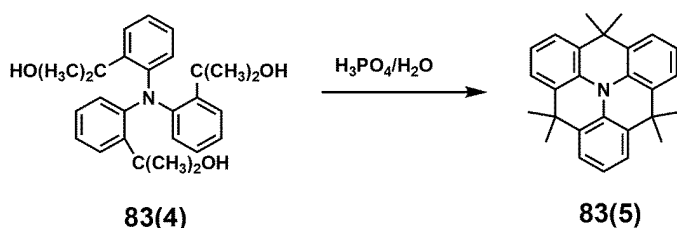


[0722]

[0723] Methyl magnesium iodide (2M) 45 mL (15 eq, 89 mmol)를 진공건조 후 질소를 채운 반응용기에 넣은 후 교반하였다. 중간체 83(3) triester amine 2.5g (1.0 eq, 2.0 mmol)을 톨루엔 70ml에 녹인 후 천천히 반응 용기에 넣어준다. 110 °C에서 15시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 상온으로 식힌 후 황산을 통해 천천히 반응을 종결 시킨 후 증류수로 씻어내고 MC로 유기층을 추출하였다. magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 컬럼 크로마토그래피 (EA:Hexane = 1:5)를 이용한 방법을 통해 하얀색 고체 triol amine 0.90 g (수율 36%)을 얻었다.

[0724]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) d 7.32 (d, J 9.0 Hz, 3H), 7.0 - 7.15 (m, 6H), 6.68 (d, J 7.3 Hz, 3H), 5.37 (s, 3H), 1.67 (s, 9H), 0.84 (s, 9H).

[0725] (5) 중간체 83(5)의 합성

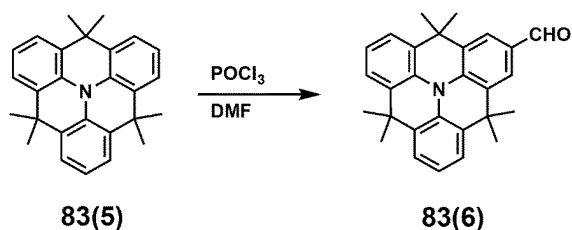


[0726]

[0727] 중간체 83(4) triol amine(0.90 g, 2.2 mmol)을 반응 용기에 넣은 후 85% 인산 수용액(10 mL) 를 넣은 후 2시간 동안 상온에서 교반하였다. 반응 종료 후 NaOH를 통해 반응을 종결 시킨 후 증류수로 씻어내고 MC로 유기층을 추출하였다. 이 후 hex산을 이용하여 컬럼 크로마토그래피를 진행하여 중간체 83(5)인 하얀색 고체 triaryl amine 0.46 g (수율 59%)을 얻었다.

[0728]  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) d 7.37 (d, J 7.7Hz, 6H), 7.12 (t, J 7.8Hz, 3H), 1.63 (s, 18H).

[0729] (6) 중간체 83(6)의 합성

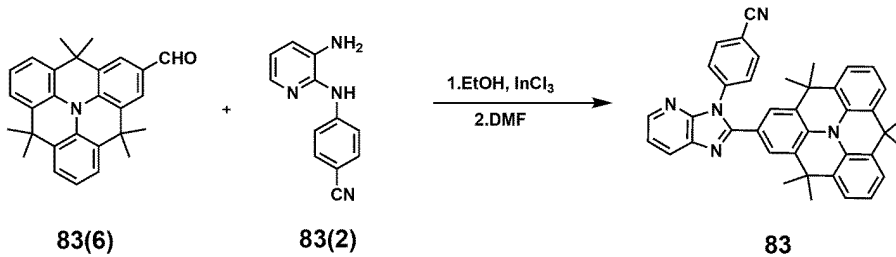


[0730]

[0731] 중간체 83(5) Triaryl amine 0.40 g(1.0 eq, 1.1 mmol)을 반응용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. DMF 40 mL를 넣고 얼음을 이용하여 0 °C로 반응용기를 냉각하였다 다른 반응용기에  $\text{POCl}_3$  1.7 mL와 DMF 5mL를 섞은 후 0 °C로 반응용기를 냉각한 후 천천히 적가하고 상온에서 갈색이 될 때까지 교반하였다. 이 후 80 °C로 온도를 올린 후 가열시키며 15시간 교반하였다. 반응 종료 후, sodium acetate를 통해 반응을 종결 시킨 후 반응 용액을 MC로 추출하였다. Magnesium sulfate로 물을 건조시키고 셀라이트를 통한 여과 후 컬럼 크로마토그래피를 통해 중간체 83(6)인 노란색 고체 4,4,8,8,12,12-hexamethyl-8,12-dihydro-4H-

benzo[9,1]quinolizinoacridine-2-carbaldehyde 0.29 g (수율 67%)를 얻었다. <sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 9.93 (s, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.42 (dd, J 7.6, 2.3 Hz, 4H), 7.20 (t, J 7.6 Hz, 2H), 1.67 (s, 6H), 1.65 (s, 12H).

[0732] (9) 화합물 83의 합성



[0733]

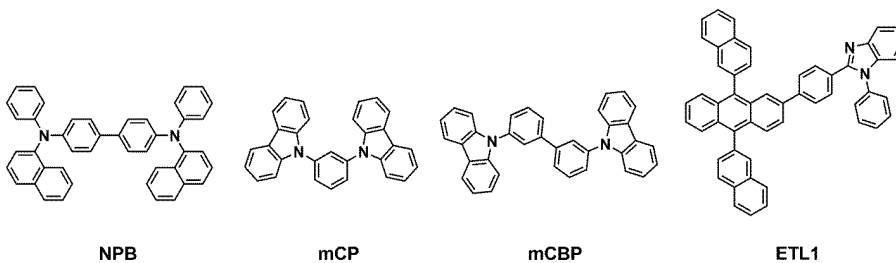
[0734] 4-(3-aminopyridin-2-ylamino)benzonitrile 0.16g (1.1 eq, 7.6 mmol)과 4,4,8,8,12,12-hexamethyl-8,12-dihydro-4H-benzo[9,1]quinolizinoacridine-2-carbaldehyde 0.28 g (1.0 eq, 0.71 mmol)과 Indium chloride 0.020 g (0.10 eq, 0.070 mmol)을 반응 용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 이 후 Ethanol 10 mL를 첨가한 후 80 °C에서 시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 감압하여 용매를 제거하고 얻은 고체를 반응 용기에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 반응용기에 DMF 10 mL를 넣고 100 °C에서 9시간 동안 환류시키며 교반시켰다. 반응 종료 후 ethyl acetate로 유기층을 추출하였다. Magnesium sulfate로 건조시켜 셀라이트를 통한 여과 후 컬럼크로마토그래피 (EA:Hexane 1:4)를 통하여 최종 화합물 83 0.20 g (수율 49%)을 얻었다.

[0735] <sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 8.36 (dd, J = 4.8, 1.4 Hz, 1H), 8.19 (dd, J = 8.0, 1.4 Hz, 1H), 7.85 - 7.78 (m, 2H), 7.62 - 7.49 (m, 4H), 7.44 - 7.32 (m, 5H), 7.16 (t, J = 7.7 Hz, 2H), 1.66 (s, 6H), 1.46 (s, 12H).

[0736] 상기 화합물 이외의 다른 화합물들도 위의 합성 경로 및 원료 물질을 참조하여 기술 분야에 숙련된 이들이 그 합성 방법을 용이하게 인식할 수 있다.

[0737] **실시예 1**

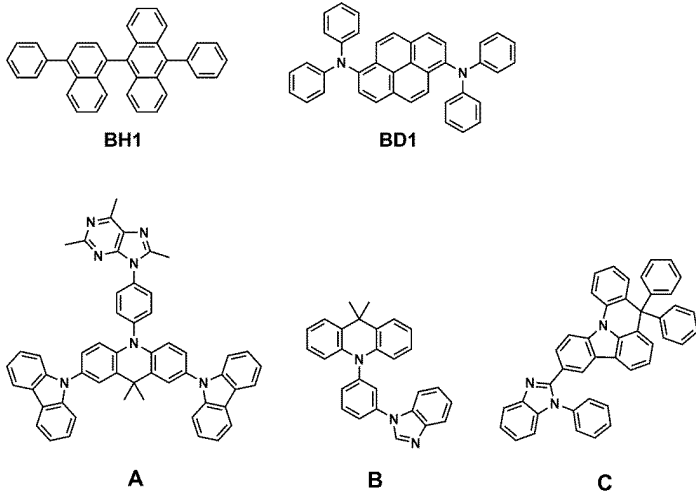
[0738] ITO 유리 기판을 50 mm x 50 mm x 0.5 mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 10분 동안 초음파 세정한 후, 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 이 유리기판을 설치하였다. 기판 상부에 우선 정공주입층으로서 공지된 물질인 NPB를 진공 증착하여 40Å 두께로 형성한 후, 이어서 정공수송층 물질 mCP 10 Å의 두께로 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 화합물 9와 mCBP를 중량비 15 : 85으로 동시 증착하여 200 Å의 두께로 발광층을 형성하였다. 이어서 발광층 상부에 전자수송층으로 ETL1을 300 Å의 두께로 증착한 후, Al를 1200 Å의 두께로 진공 증착하여 Al 전극을 형성함으로써 유기 전계 발광 소자를 제조 하였다.



[0739]

[0740] **실시예 2 내지 7 및 비교예 1 내지 4**

[0741] 발광층 형성시 상기 화합물 9 대신 표 1에 기재된 화합물을 각각 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0742]

[0743] **[평가예]**

[0744] 상기 실시예 1 내지 7 및 비교예 1 내지 4에서 제작한 유기 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm<sup>2</sup>에서의 구동 전압, 전류효율 및 외부 양자 효율을 전류-전압계(Kethley SMU 236) 및 휘도계 PR650을 이용하여 측정하고 그 결과를 표 1에 나타내었다.

**표 1**

[0745]

	발광층 화합물	구동 전압 (V)	전류 효율 (cd/A/y)	외부 양자 효율 (%)
실시예 1	화합물 9 / mCBP	4.3	13.5	5.4
실시예 2	화합물 11 / mCBP	4.2	13.9	5.4
실시예 3	화합물 13 / mCBP	5.6	13.8	3.9
실시예 4	화합물 14 / mCBP	5.4	13.9	4.3
실시예 5	화합물 25 / mCBP	7.5	17.3	6.6
실시예 6	화합물 74 / mCBP	5.5	15.9	5.9
실시예 7	화합물 83 / mCBP	5.2	18.0	5.5
비교예 1	화합물 BD1 / 화합물 BH1	7.5	6.5	3.5
비교예 2	화합물 A / mCBP	5.1	13.5	5.3
비교예 3	화합물 B / mCBP	5.9	10.8	3.6
비교예 4	화합물 C / mCBP	4.8	12.6	4.0

[0746] 표 1에서 보는 바와 같이, 본 발명의 화합물을 발광층에 사용한 실시예 1 내지 7의 유기 발광 소자는, 비교예 1 내지 4의 유기 발광 소자에 비해 구동전압이 동등한 수준이거나 더 낮고, 외부 양자 효율이 동등한 수준이거나 더 높으며, 전류 효율이 향상되는 것을 확인하였다.

[0747] 본 발명에 대해 상기 합성에 및 실시예를 참고하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

**부호의 설명**

[0748]

- 10, 20, 30, 40: 유기 발광 소자
- 110: 제1전극
- 150: 유기층
- 190: 제2전극
- 210: 제1캡핑층

220: 제2캡핑층

**도면**

**도면1**

10

190
150
110

**도면2**

20

190
150
110
210

**도면3**

30

220
190
150
110

**도면4**

40

220
190
150
110
210

专利名称(译)	杂环化合物和包括其的有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020200076818A</a>	公开(公告)日	2020-06-30
申请号	KR1020180165472	申请日	2018-12-19
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司 成均馆大学校产学协力团		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 韩国成均馆大学学术交流		
[标]发明人	박혜정 윤승수 정혜인		
发明人	박혜정 윤승수 정혜인		
IPC分类号	H01L51/00 C07D401/10 C07D401/14 C07D413/10 C07D417/10 C07D471/04 C07D471/16 C07D498/04 C07D513/04 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0071 C07D401/10 C07D401/14 C07D413/10 C07D417/10 C07D471/04 C07D471/16 C07D498/04 C07D513/04 H01L51/0072 H01L51/5012 H01L51/0067 H01L51/0094		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

公开了杂环化合物和包括其的有机发光器件。

**10**

<b>190</b>
<b>150</b>
<b>110</b>