



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0097372
 (43) 공개일자 2018년08월31일

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

(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0087 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-0024279
 (22) 출원일자 2017년02월23일
 심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성전자주식회사
 경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)

(72) 발명자
최종원
 경기도 용인시 수지구 광교마을로 62, 4208동 2301호 (상현동, 광고상록자이아파트)

이금희
 경기도 수원시 장안구 서부로 2067, 208동 604호 (율전동, 삼성아파트)
 (뒷면에 계속)

(74) 대리인
리엔특허법인

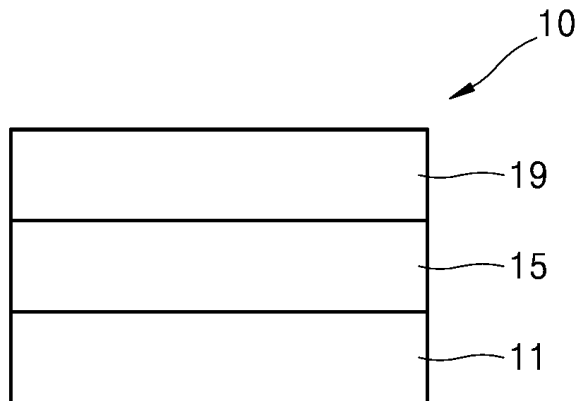
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 **유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 이를 포함한 진단용 조성물**

(57) 요약

유기금속 화합물, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자 및 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물이 개시된다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/5024 (2013.01)

C09K 2211/185 (2013.01)

(72) 발명자

이방린

경기도 수원시 영통구 영통로 498, 151동 801호 (영통동, 황골마을주공1단지아파트)

곽윤현

서울특별시 강남구 도산대로30길 16-2, 401호 (논현동)

권오현

서울특별시 송파구 올림픽로 435, 201동 202호 (신천동, 파크리오)

아라타니 스케카즈

경기도 화성시 동탄중앙로 189, 335동 503호 (반송동, 동탄시범다은마을 월드메르디앙반도유보라)

최병기

경기도 화성시 동탄문화센터로 38, 419동 1401호 (반송동, 솔빛마을서해그랑블아파트)

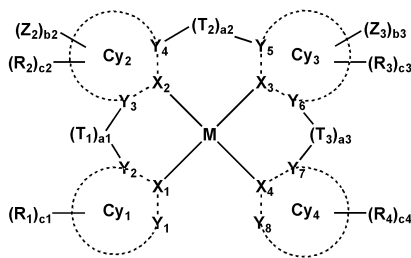
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

M은 백금(Pt) 또는 팔라듐(Pd)이고,

X₁ 내지 X₄는 서로 독립적으로, 탄소 원자(C) 또는 질소 원자(N)이되, X₂ 및 X₃ 중 적어도 하나는 C이고, X₁와 M 사이의 결합, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 2개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 2개의 결합은 배위 결합이고,

Y₁ 및 Y₈은 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

Y₂ 내지 Y₇은 서로 독립적으로, C, N, 산소 원자(O) 또는 황 원자(S)이고,

X₁과 Y₁ 사이의 결합, X₁과 Y₂ 사이의 결합, X₂와 Y₃ 사이의 결합, X₂와 Y₄ 사이의 결합, X₃와 Y₅ 사이의 결합, X₃와 Y₆ 사이의 결합, X₄와 Y₇ 사이의 결합 및 X₄와 Y₈ 사이의 결합은 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 이중 결합이고,

Cy₁ 내지 Cy₄는 서로 독립적으로 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

T₁ 내지 T₃는 서로 독립적으로, *-O-*', *-S-*', *-C(R₅)(R₆)-*', *-C(R₅)=*', *=C(R₅)-*', *-C(R₅)=C(R₆)-*', *-C≡C-*', *-N(R₅)-*', *-Si(R₅)(R₆)-*' 및 *-P(R₅)(R₆)-*' 중에서 선택되고,

R₅ 및 R₆은 선택적으로, 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

a₁ 내지 a₃는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고, a₁가 0일 경우 *(T₁)_{a1}-*'은 단일 결합이 되고, a₂가 0일 경우 *(T₂)_{a2}-*'은 단일 결합이 되고, a₃가 0일 경우 *(T₃)_{a3}-*'은 단일 결합이 되고,

Z₂ 및 Z₃는 서로 독립적으로, -F, -Cl, -Br, -I, -C(=O)(Q₁), -CFH₂, -CF₂H, -CF₃, 시아노기, -S(=O)₂(Q₁), -N⁺(Q₁)(Q₂)(Q₃), 니트로기 및 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리 그룹 중에서 선택되고,

b₂ 및 b₃는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이되, b₂ + b₃는 1 이상이고, 단, X₂가 C이고, X₃가 N이면, b₂는 0이 아니고; 및 X₂가 N이고, X₃가 C이면, b₃는 0이 아니고,

R₁ 내지 R₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치

환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기(aryloxy), 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio), 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group), -Si(Q₄)(Q₅)(Q₆), -N(Q₄)(Q₅), -B(Q₄)(Q₅), -C(=O)(Q₄), -S(=O)₂(Q₄) 및 -P(=O)(Q₄)(Q₅) 중에서 선택되고,

c₁ 내지 c₄는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이고,

c₁개의 R₁ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

c₂개의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

c₃개의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

c₄개의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

R₁ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알킬닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알킬닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알킬닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

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

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

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

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₆, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

X₁ 및 X₄는 N이고, X₂ 및 X₃는 C이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, Y₁ 내지 Y₈은 C이거나;

X₁ 및 X₂는 C이고, X₃ 및 X₄는 N이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₂와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, Y₁ 내지 Y₈은 C이거나; 또는

X₁ 및 X₂는 N이고, X₃ 및 X₄는 C이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₂와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, Y₁ 내지 Y₈은 C인, 유기금속 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

Cy₁ 내지 Cy₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 인텐 그룹, 플루오렌 그룹, 피롤 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹 및 벤조퓨로피리딘(benzofuroopyridine) 그룹 중에서 선택되되,

Cy₂ 및 Cy₃ 중 적어도 하나는 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 인텐 그룹, 플루오렌 그룹, 피롤 그룹, 인돌 그룹, 카바졸

그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹 및 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

a1 및 a3는 0이고, a2는 1이고, T₂가 *-N(R₅)-*'인 경우,

R₅ 중 치환 또는 비치환된 페닐기는 제외되는, 유기금속 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

a1 및 a3는 0이고, a2는 1이고, T₂가 *-N(R₅)-*'이고,

R₅는,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, -SF₅, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알콕시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 나프틸기, 플루오렌틸기, 페난트렌틸기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤릴기, 티오펜틸기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸릴기, 피라졸릴기, 티아졸릴기, 이소티아졸릴기, 옥사졸릴기, 이속사졸릴기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌릴기, 인돌릴기, 인다졸릴기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸릴기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸릴기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸릴기, 벤조옥사졸릴기, 이소벤조옥사졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸릴기, 디벤조카바졸릴기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오렌틸기, 페난트렌틸기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤릴기, 티오펜틸기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸릴기, 피라졸릴기, 티아졸릴기, 이소티아졸릴기, 옥사졸릴기, 이속사졸릴기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌릴기, 인돌릴기, 인다졸릴기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸릴기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸릴기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸

일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜닐기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

$-N(Q_4)(Q_5)$, $-Si(Q_4)(Q_5)(Q_6)$, $-B(Q_4)(Q_5)$ 및 $-P(=O)(Q_4)(Q_5)$;

중에서 선택되고,

Q_4 내지 Q_6 은 서로 독립적으로,

$-CH_3$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CD_3$, $-CH_2CD_2H$, $-CH_2CDH_2$, $-CHDCH_3$, $-CHDCD_2H$, $-CHDCDH_2$, $-CHDCD_3$, $-CD_2CD_3$, $-CD_2CD_2H$ 및 $-CD_2CDH_2$;

n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

중수소, C_1 - C_{10} 알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

Z_2 및 Z_3 는 서로 독립적으로,

$-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-C(=O)(Q_1)$, $-CFH_2$, $-CF_2H$, $-CF_3$, 시아노기, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-N^+(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 및 니트로기;

이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인다졸일기 그룹, 푸리닐기(puriny), 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 아자카바졸일기; 및

중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-CFH_2$, $-CF_2H$, $-CF_3$, 시아노기, $-S(=O)_2(Q_{31})$, $-N^+(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, 니트로기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜닐기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 벤조셀레노페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인다졸일기 그룹, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사

디아졸일기, 트리아지닐기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 아자카바졸일기 중 적어도 하나로 치환된, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인다졸일기 그룹, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 아자카바졸일기;

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

Z₂ 및 Z₃는 서로 독립적으로,

-F, -Cl, -Br, -I, -C(=O)(Q₁), -CFH₂, -CF₂H, -CF₃, 시아노기, -S(=O)₂(Q₁), -N⁺(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 니트로기 중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

R₁ 내지 R₆은 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, -SF₅, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타

닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

$-N(Q_4)(Q_5)$, $-Si(Q_4)(Q_5)(Q_6)$, $-B(Q_4)(Q_5)$ 및 $-P(=O)(Q_4)(Q_5)$;

중에서 선택되고,

Q_4 내지 Q_6 은 서로 독립적으로,

$-CH_3$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CD_3$, $-CH_2CD_2H$, $-CH_2CDH_2$, $-CHDCH_3$, $-CHDCD_2H$, $-CHDCDH_2$, $-CHDCD_3$, $-CD_2CD_3$, $-CD_2CD_2H$ 및 $-CD_2CDH_2$;

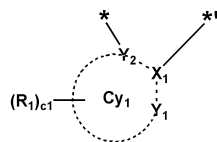
n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

중수소, C_1 - C_{10} 알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

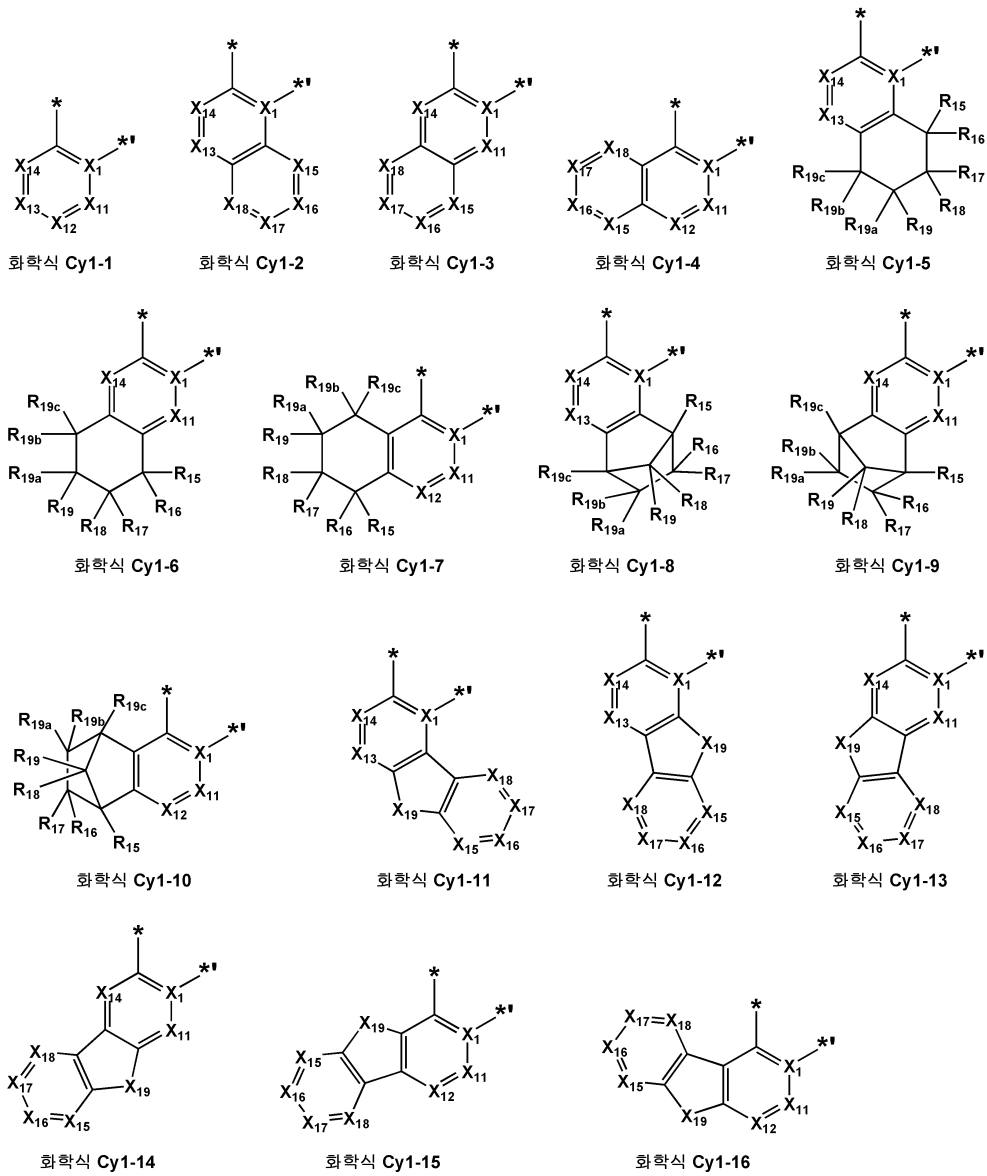
중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,



상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy_1-1 내지 Cy_1-16 으로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



상기 화학식 Cy1-1 내지 Cy1-16 중,

X₁은 N 또는 C이고,

X₁₁은 N 또는 C(R₁₁)이고, X₁₂은 N 또는 C(R₁₂)이고, X₁₃은 N 또는 C(R₁₃)이고, X₁₄는 N 또는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 N 또는 C(R₁₅)이고, X₁₆은 N 또는 C(R₁₆)이고, X₁₇은 N 또는 C(R₁₇)이고, X₁₈은 N 또는 C(R₁₈)이고,

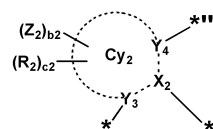
X₁₉는 C(R_{19a})(R_{19b}), N(R₁₉), O, S 또는 Si(R_{19a})(R_{19b})이고,

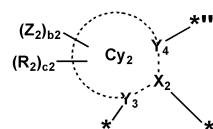
R₁₁ 내지 R₁₉ 및 R_{19a} 내지 R_{19c}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R₁에 대한 설명을 참조하고,

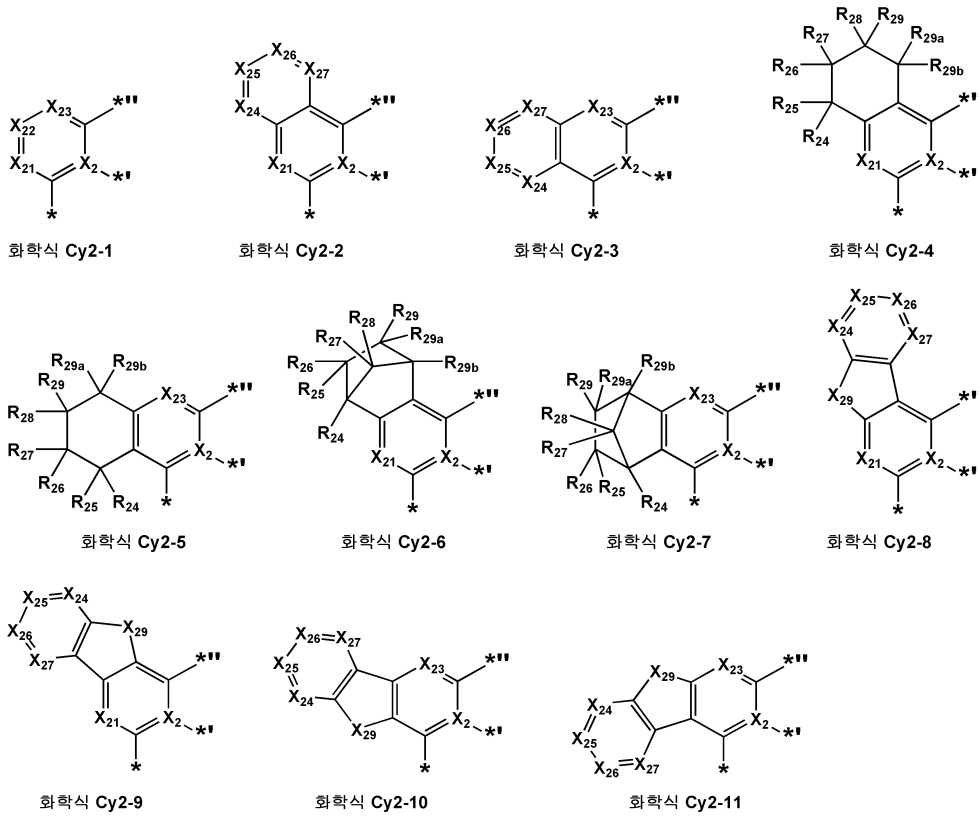
* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 10

제1항에 있어서,



상기 화학식 1 중  로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy2-1 내지 Cy2-11로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



상기 화학식 Cy2-1 내지 Cy2-11 중,

X_2 은 N 또는 C이고,

X_{21} 은 N, C(R_{21}) 또는 C(Z_{21})이고, X_{22} 은 N, C(R_{22}) 또는 C(Z_{22})이고, X_{23} 은 N, C(R_{23}) 또는 C(Z_{23})이고, X_{24} 은 N, C(R_{24}) 또는 C(Z_{24})이고, X_{25} 은 N, C(R_{25}) 또는 C(Z_{25})이고, X_{26} 은 N, C(R_{26}) 또는 C(Z_{26})이고, X_{27} 은 N, C(R_{27}) 또는 C(Z_{27})이고,

X_{29} 은 C(R_{29a})(R_{29b}), N(R_{29}), O, S 또는 Si(R_{29a})(R_{29b})이고,

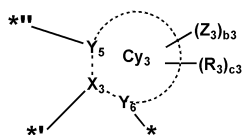
R_{21} 내지 R_{27} , R_{29} , R_{29a} 및 R_{29b} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R_2 에 대한 설명을 참조하고,

Z_{21} 내지 Z_{27} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 Z_2 에 대한 설명을 참조하고,

*, *' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다

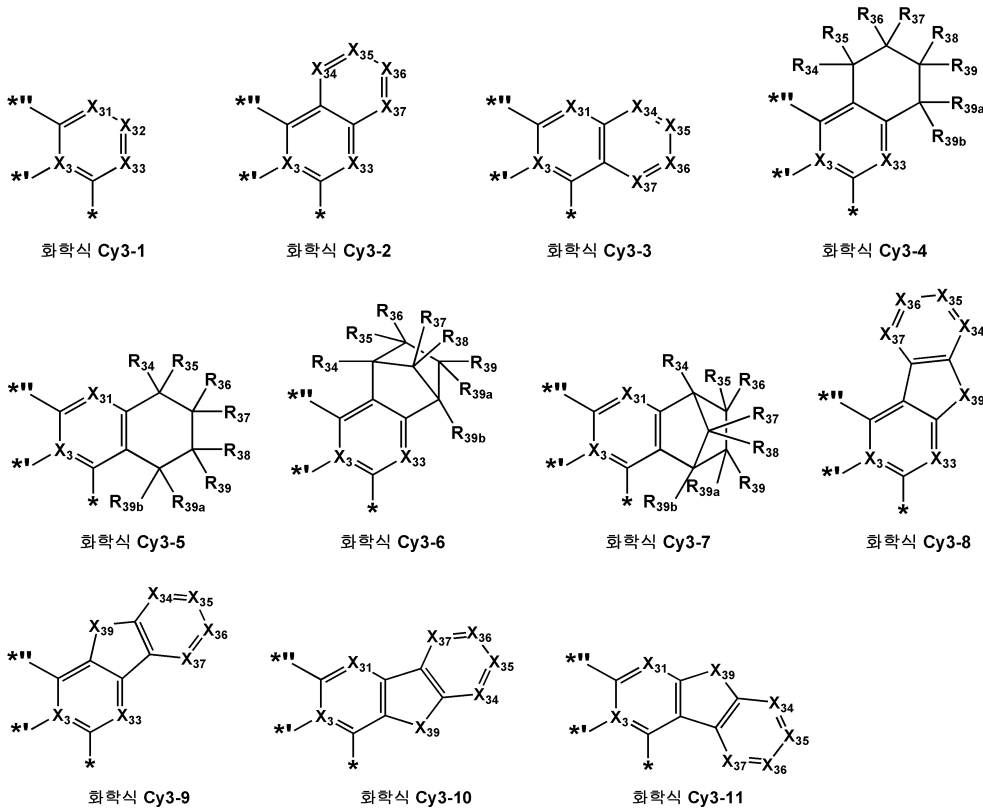
청구항 11

제1항에 있어서,



상기 화학식 1 중
 립 중에서 선택된, 유기금속 화합물:

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy3-1 내지 Cy3-11로 표시되는 그



상기 화학식 Cy3-1 내지 Cy3-11 중,

X_3 은 N 또는 C이고,

X_{31} 은 N, C(R_{31}) 또는 C(Z_{31})이고, X_{32} 는 N, C(R_{32}) 또는 C(Z_{32})이고, X_{33} 은 N, C(R_{33}) 또는 C(Z_{33})이고, X_{34} 는 N, C(R_{34}) 또는 C(Z_{34})이고, X_{35} 는 N, C(R_{35}) 또는 C(Z_{35})이고, X_{36} 는 N, C(R_{36}) 또는 C(Z_{36})이고, X_{37} 는 N, C(R_{37}) 또는 C(Z_{37})이고,

X_{39} 는 C(R_{39a})(R_{39b}), N(R_{39}), O, S 또는 Si(R_{39a})(R_{39b})이고,

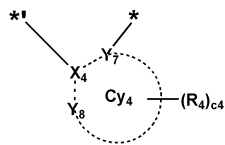
R_{31} 내지 R_{37} , R_{39} , R_{39a} 및 R_{39b} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R_3 에 대한 설명을 참조하고,

Z_{31} 내지 Z_{37} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 Z_3 에 대한 설명을 참조하고,

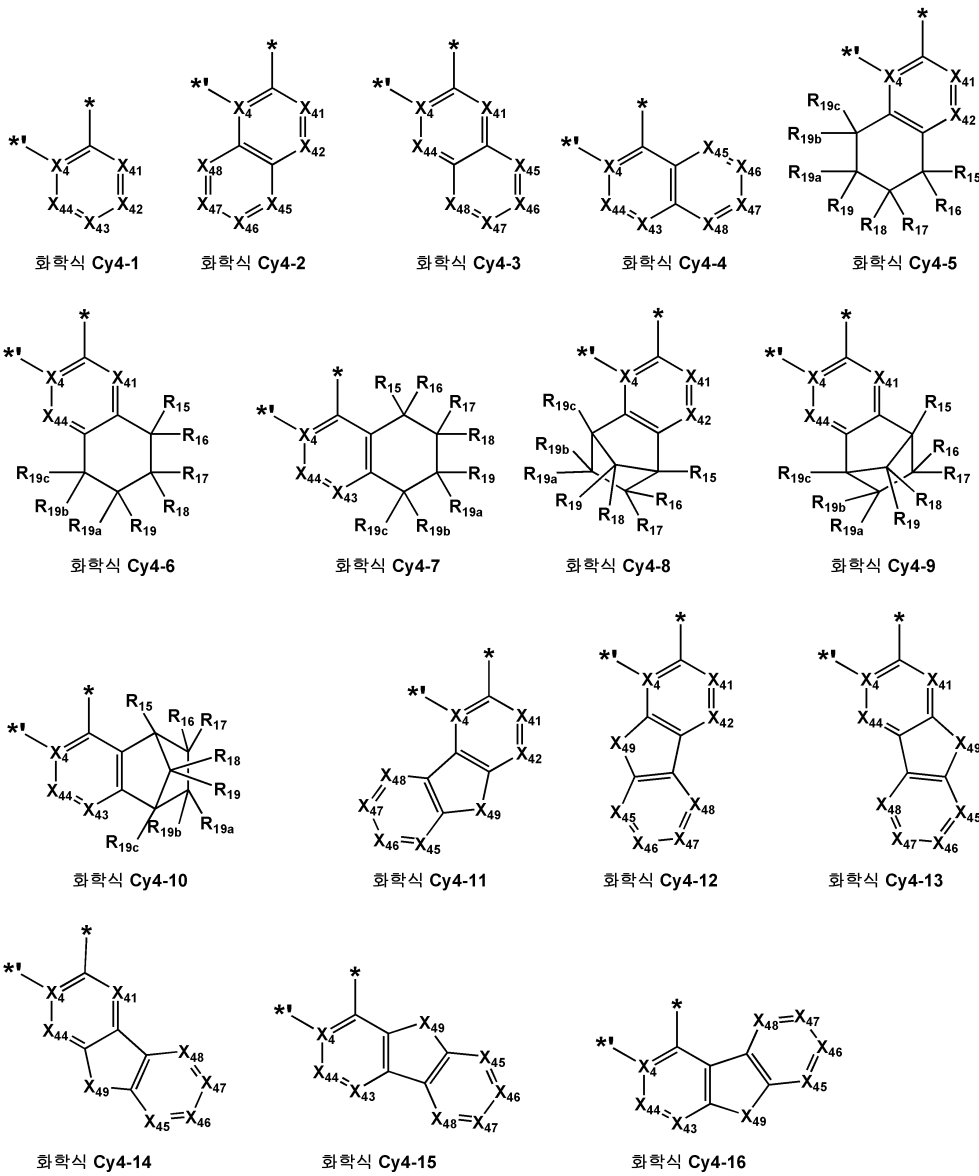
*, *' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 12

제1항에 있어서,



상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy4-1 내지 Cy4-16으로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



상기 화학식 Cy4-1 내지 Cy4-16 중,

X₄₁은 N 또는 C이고,

X₄₁은 N 또는 C(R₄₁)이고, X₄₂은 N 또는 C(R₄₂)이고, X₄₃은 N 또는 C(R₄₃)이고, X₄₄은 N 또는 C(R₄₄)이고, X₄₅는 N 또는 C(R₄₅)이고, X₄₆은 N 또는 C(R₄₆)이고, X₄₇은 N 또는 C(R₄₇)이고, X₄₈은 N 또는 C(R₄₈)이고,

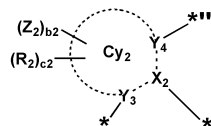
X₄₉는 C(R_{49a})(R_{49b}), N(R₄₉), O, S 또는 Si(R_{49a})(R_{49b})이고,

R₄₁ 내지 R₄₉ 및 R_{49a} 내지 R_{49c}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R₄에 대한 설명을 참조하고,

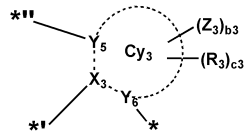
* 및 **은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 13

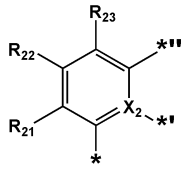
제1항에 있어서,



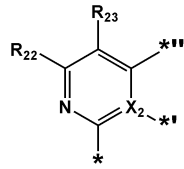
상기 화학식 1 중 그룹 중에서 선택되고, * 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy2-1(1) 내지 Cy2-1(7)로 표시되는



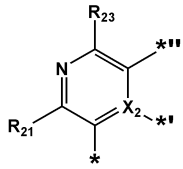
상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy3-1(1) 내지 Cy3-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



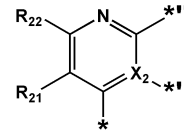
화학식 Cy2-1(1)



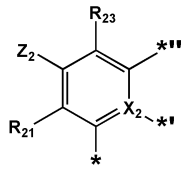
화학식 Cy2-1(2)



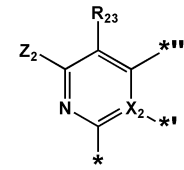
화학식 Cy2-1(3)



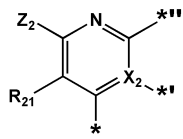
화학식 Cy2-1(4)



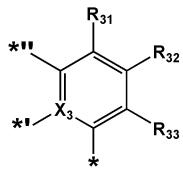
화학식 Cy2-1(5)



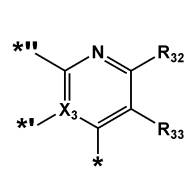
화학식 Cy2-1(6)



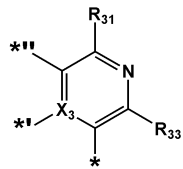
화학식 Cy2-1(7)



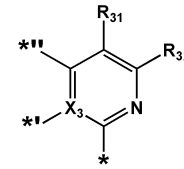
화학식 Cy3-1(1)



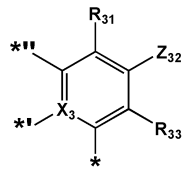
화학식 Cy3-1(2)



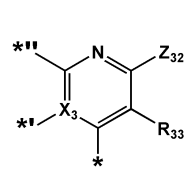
화학식 Cy3-1(3)



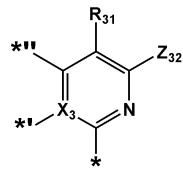
화학식 Cy3-1(4)



화학식 Cy3-1(5)



화학식 Cy3-1(6)



화학식 Cy3-1(7)

상기 화학식 Cy2-1(1) 내지 Cy2-1(7) 및 Cy3-1(1) 내지 Cy3-1(7) 중,

X₂, X₃, Z₂ 및 Z₃에 대한 설명은 제1항에 기재된 바를 참조하고,

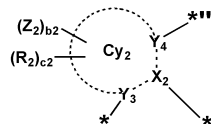
R₂₁ 내지 R₂₃에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R₂에 대한 설명을 참조하고,

R₃₁ 내지 R₃₃에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R₃에 대한 설명을 참조하고,

*, *' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

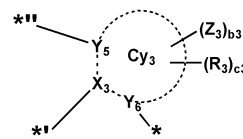
청구항 14

제13항에 있어서,



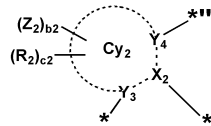
상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(1) 내지 Cy2-1(4)로 표시되는

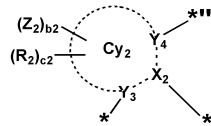
그룹 중에서 선택되고, 상기 X₂는 C 또는 N이고, 상기 화학식 1 중

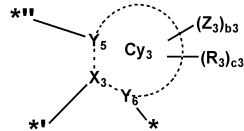


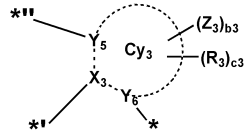
로 표시되는 모이어티

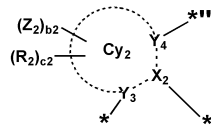
가 상기 화학식 Cy3-1(5) 내지 Cy3-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X₃는 C이거나;

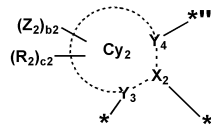


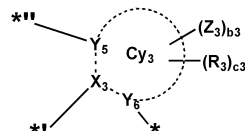
상기 화학식 1 중  로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(5) 내지 Cy2-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X₂는 C이고,

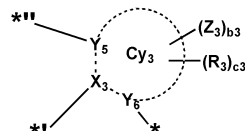


상기 화학식 1 중  로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(1) 내지 Cy3-1(4)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X₃는 C 또는 N이거나; 또는



상기 화학식 1 중  로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(5) 내지 Cy2-1(7)로 표시되는

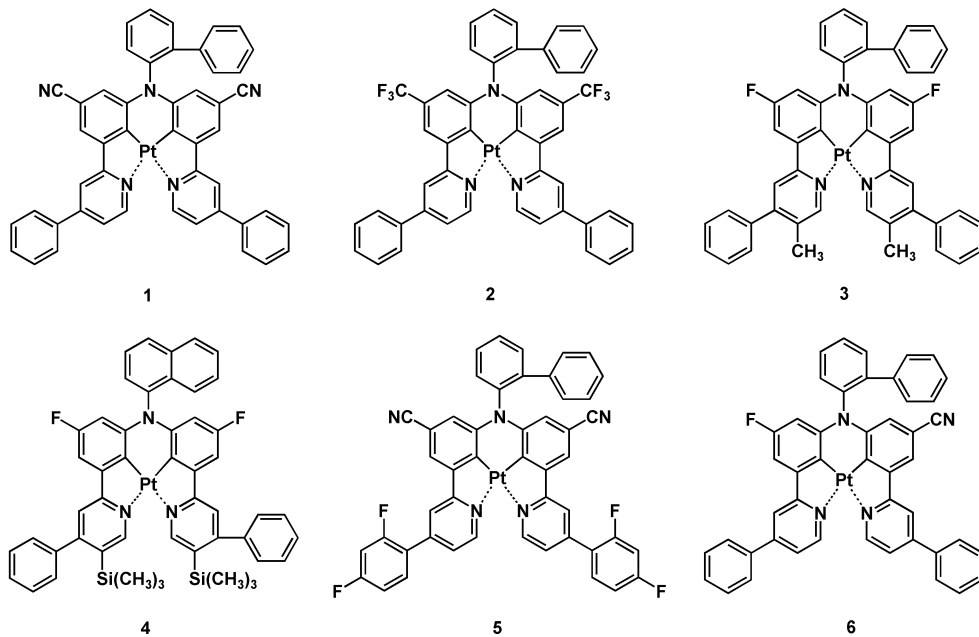


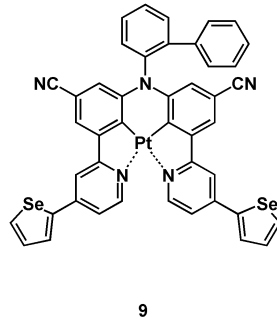
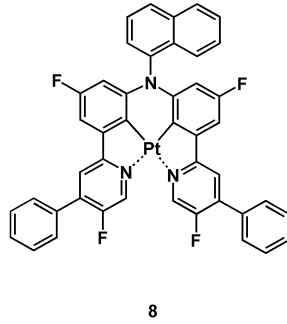
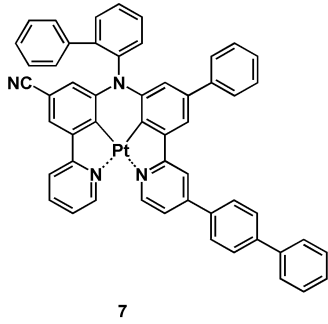
그룹 중에서 선택되고, 상기 화학식 1 중  로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5) 내지 Cy3-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X₂ 및 X₃는 서로 독립적으로 C 또는 N이되, 상기 X₂ 및 X₃ 중 적어도 하나는 C인, 유기금속 화합물.

청구항 15

제1항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 9 중에서 선택된, 유기금속 화합물:





청구항 16

제1전극;

제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제15항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 제1전극은 애노드이고,

상기 제2전극은 캐소드이고,

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

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

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

청구항 18

제16항에 있어서,

상기 유기금속 화합물이 상기 발광층에 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 19

제18항에 있어서,

상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 호스트의 함량이 상기 유기금속 화합물의 함량보다 큰, 유기 발광 소자.

청구항 20

제1항 내지 제15항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물.

발명의 설명

기술분야

유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 이를 포함한 진단용 조성물이 제시된다.

배경기술

[0001]

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서, 시야각, 응답 시간, 휘도, 구동전압 및 응답 속도 등이 우수하고, 다색화가 가능하다.

[0003] 일예에 따르면, 유기 발광 소자는, 애노드, 캐소드 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층 포함할 수 있다. 상기 애노드와 발광층 사이에는 정공 수송 영역이 구비될 수 있고, 상기 발광층과 캐소드 사이에는 전자 수송 영역이 구비될 수 있다. 상기 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자는 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

[0004] 한편, 각종 세포, 단백질 등과 같은 생물학적 물질의 모니터링, 센싱, 검출 등에도 발광 화합물, 예를 들면, 인광 발광 화합물이 사용될 수 있다.

발명의 내용

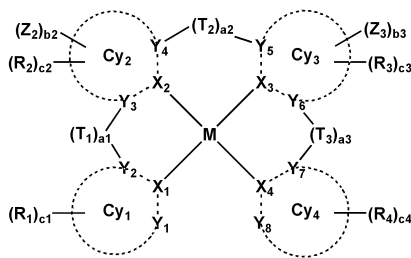
해결하려는 과제

[0005] 신규 유기금속 화합물, 이를 채용한 유기 발광 소자 및 이를 채용한 진단용 조성물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0006] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물이 제공된다:

[0007] <화학식 1>



[0008] 상기 화학식 1 중,
 [0009] M은 백금(Pt) 또는 팔라듐(Pd)이고,

[0010] X1 내지 X4는 서로 독립적으로, 탄소 원자(C) 또는 질소 원자(N)이되, X2 및 X3 중 적어도 하나는 C이고, X1와 M 사이의 결합, X2와 M 사이의 결합, X3와 M 사이의 결합 및 X4와 M 사이의 결합 중 2개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 2개의 결합은 배위 결합이고,

[0011] Y1 및 Y8은 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

[0012] Y2 내지 Y7은 서로 독립적으로, C, N, 산소 원자(O) 또는 황 원자(S)이고,

[0013] X1과 Y1 사이의 결합, X1과 Y2 사이의 결합, X2와 Y3 사이의 결합, X2와 Y4 사이의 결합, X3와 Y5 사이의 결합, X3와 Y6 사이의 결합, X4와 Y7 사이의 결합 및 X4와 Y8 사이의 결합은 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 이중 결합이고,

[0014] Cy1 내지 Cy4는 서로 독립적으로 C5-C30카보시클릭 그룹 및 C1-C30헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0015] T1 내지 T3는 서로 독립적으로, *-O-*', *-S-*', *-C(R5)(R6)-*', *-C(R5)=*', *=C(R5)-*', *-C(R5)=C(R6)-*', *-C≡C-*', *-N(R5)-*', *-Si(R5)(R6)-*' 및 *-P(R5)(R6)-*' 중에서 선택되고,

[0016] R5 및 R6은 선택적으로, 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C5-C30카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C1-C30헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

- [0018] a1 내지 a3는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고, a1이 0일 경우 $*(T_1)_{a1}-*$ 은 단일 결합이 되고, a2가 0일 경우 $*(T_2)_{a2}-*$ 은 단일 결합이 되고, a3가 0일 경우 $*(T_3)_{a3}-*$ 은 단일 결합이 되고,
- [0019] Z₂ 및 Z₃는 서로 독립적으로, -F, -Cl, -Br, -I, -C(=O)(Q₁), -CFH₂, -CF₂H, -CF₃, 시아노기, -S(=O)₂(Q₁), -N⁺(Q₁)(Q₂)(Q₃), 니트로기 및 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리 그룹 중에서 선택되고,
- [0020] b2 및 b3는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이되, b2 + b3는 1 이상이고, 단, X₂가 C이고, X₃가 N이면, b2는 0이 아니고; 및 X₂가 N이고, X₃가 C이면, b3는 0이 아니고,
- [0021] R₁ 내지 R₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기(aryloxy), 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio), 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic condensed polycyclic group), 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted monovalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group), -Si(Q₄)(Q₅)(Q₆), -N(Q₄)(Q₅), -B(Q₄)(Q₅), -C(=O)(Q₄), -S(=O)₂(Q₄) 및 -P(=O)(Q₄)(Q₅) 중에서 선택되고,
- [0022] c1 내지 c4는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이고,
- [0023] c1개의 R₁ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0024] c2개의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0025] c3개의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0026] c4개의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0027] R₁ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0028] 상기 치환된 π 전자 결핍성 함질소 고리, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0029] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0030] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0031] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0032] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0033] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0034] 중에서 선택되고,

[0035] 상기 Q₁ 내지 Q₆, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0036] * 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0037] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0038] 상기 발광층 중 유기금속 화합물이 도펀트로 작용할 수 있다.

[0039] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

발명의 효과

[0040] 상기 유기금속 화합물은 우수한 전기적 특성 및 열적 안정성을 갖는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 우수한 구동전압, 발광 효율, 전력 효율, 색순도 및 수명 특성을 갖는다. 또한, 상기 유기금속 화합물은 우수한 인광 발광 특성을 가지므로, 이를 이용하면, 높은 진단 효율을 갖는 진단용 조성물을 제공할 수 있다.

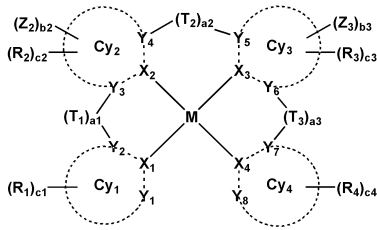
도면의 간단한 설명

[0041] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0042] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0043] <화학식 1>



[0044]

[0045] 상기 화학식 1 중, M은 백금(Pt) 또는 팔라듐(Pd)일 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 M은 Pt일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0046] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 양이온과 음이온의 이온쌍으로 이루어지지 않은 중성(neutral)일 수 있다.

[0047] 상기 화학식 1 중, X₁ 내지 X₄는 서로 독립적으로, 탄소 원자(C) 또는 질소 원자(N)이되, X₂ 및 X₃ 중 적어도 하나는 C이고, X₁와 M 사이의 결합, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 2개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 2개의 결합은 배위 결합일 수 있다.

[0048] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 X₁ 및 X₄는 N이고, X₂ 및 X₃는 C이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합일 수 있다.

[0049] 다른 예로서, X₁ 및 X₂는 C이고, X₃ 및 X₄는 N이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₂와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합일 수 있다.

[0050] 또 다른 예로서, X₁ 및 X₂는 N이고, X₃ 및 X₄는 C이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₂와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 공유 결합일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0051] 상기 화학식 1 중, Y₁ 및 Y₈는 서로 독립적으로, C 또는 N이고, Y₂ 내지 Y₇는 서로 독립적으로, C, N, 산소 원자(O) 또는 황 원자(S)이고, X₁과 Y₁ 사이의 결합, X₁과 Y₂ 사이의 결합, X₂와 Y₃ 사이의 결합, X₂와 Y₄ 사이의 결합, X₃와 Y₅ 사이의 결합, X₃와 Y₆ 사이의 결합, X₄와 Y₇ 사이의 결합 및 X₄와 Y₈ 사이의 결합은 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 이중 결합일 수 있다.

[0052] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 Y₁ 및 Y₈는 C일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0053] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, X₁ 및 X₄는 N이고, X₂ 및 X₃는 C이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, Y₁ 내지 Y₈는 C일 수 있다.

[0054] 다른 구현예에 따르면, X₁ 및 X₂는 C이고, X₃ 및 X₄는 N이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₂와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, Y₁ 내지 Y₈는 C일 수 있다.

[0055] 또 다른 구현예에 따르면, X₁ 및 X₂는 N이고, X₃ 및 X₄는 C이고, X₁와 M 사이의 결합 및 X₂와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, Y₁ 내지 Y₈는 C일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0056] 상기 화학식 1 중, Cy₁ 내지 Cy₄는 서로 독립적으로 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0057] 예를 들어, 상기 화학식 1 중,

[0058] Cy₁ 내지 Cy₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹,

파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 피롤 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹 및 벤조퓨로피리딘(benzofuropyridine) 그룹 중에서 선택되,

[0059] Cy₂ 및 Cy₃ 중 적어도 하나는 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 피롤 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹 및 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0060] 다른 예로서, 상기 화학식 1 중,

[0061] Cy₁ 내지 Cy₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹 및 벤조퓨로피리딘 그룹 중에서 선택되,

[0062] Cy₂ 및 Cy₃ 중 적어도 하나는 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹 및 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0063] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중,

[0064] Cy₁ 내지 Cy₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹 및 벤조퓨로피리딘 그룹 중에서 선택되,

[0065] Cy₂ 및 Cy₃ 중 적어도 하나는 벤젠 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0066] 상기 화학식 1 중, T₁ 내지 T₃는 서로 독립적으로, *-O-*, *-S-*, *-C(R₅)(R₆)-*, *-C(R₅)=*, *=C(R₅)-*, *-C(R₅)=C(R₆)-*, *-C≡C-*, *-N(R₅)-*, *-Si(R₅)(R₆)-* 및 *-P(R₅)(R₆)-* 중에서 선택될 수 있다. 상기 R₅ 및 R₆에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다. 상기 * 및 *'은 각각 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0067] 상기 R₅ 및 R₆은 선택적으로, 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.

[0068] 상기 제1연결기는, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₉)(R₁₀)-*, *-C(R₉)=*, *=C(R₉)-*, *-C(R₉)=C(R₁₀)-*, *-C≡C-*, *-N(R₉)-*, *-Si(R₉)(R₁₀)-* 및 *-P(R₉)(R₁₀)-* 중에서 선택될 수 있고, 상기 R₉ 및 R₁₀에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₅에 대한 설명을 참조하고, * 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0069] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 T₁ 내지 T₃는 서로 독립적으로, *-O-*, *-S-*, *-C(R₅)(R₆)-*, *-N(R₅)-*, *-Si(R₅)(R₆)-* 및 *-P(R₅)(R₆)-* 중에서 선택될 수 있다.

[0070] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 T₁ 내지 T₃는 *-N(R₅)-*일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0071] 상기 화학식 1 중, a₁ 내지 a₃는 각각 T₁ 내지 T₃의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3 일 수 있다. 상기 a₁이 0일 경우 *(T₁)_{a₁}-*은 단일 결합이 되고, a₁이 2 이상일 경우 2 이상의 T₁은 서로 동일하거나 상이하고, a₂가 0일 경우 *(T₂)_{a₂}-*은 단일 결합이 되고, a₂가 2 이상일 경우 2 이상의 T₂는 서로 동일하거나 상이하고, a₃가 0일 경우 *(T₃)_{a₃}-*은 단일 결합이 되고, a₃가 2 이상일 경우 2 이상의 T₃는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [0072] 예를 들어, 상기 a1 내지 a3는 서로 독립적으로, 0 또는 1일 수 있다.
- [0073] 상기 화학식 1 중 a1 + a2 + a3는 0이거나; 또는 1 이상일 수 있다.
- [0074] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,
- [0075] a1, a2 및 a3는 모두 0이거나;
- [0076] a1은 1이고, a2 및 a3는 0이거나;
- [0077] a2는 1이고, a1 및 a3는 0이거나; 또는
- [0078] a3는 1이고, a1 및 a2는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0079] 상기 화학식 1 중, a1 및 a3는 0이고, a2는 1이고, T₂가 *-N(R₅)-*인 경우, R₅ 중 치환 또는 비치환된 페닐기는 제외될 수 있다.
- [0080] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 a1 및 a3는 0이고, a2는 1이고, T₂가 *-N(R₅)-*이면, 상기 R₅는 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₇-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₄)(Q₅)(Q₆), -N(Q₄)(Q₅), -B(Q₄)(Q₅), -C(=O)(Q₄), -S(=O)₂(Q₄) 및 -P(=O)(Q₄)(Q₅) 중에서 선택되고,
- [0081] 상기 Q₄ 내지 Q₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라조닌, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0082] 다른 예로서, 상기 화학식 1 중 a1 및 a3는 0이고, a2는 1이고, T₂가 *-N(R₅)-*이면, R₅는,
- [0083] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, -SF₅, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0084] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기 (adamantanyl), 노르보나닐기 (norbornanyl), 노르보네닐기 (norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기;
- [0085] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알콕시기;
- [0086] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로

펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 나프틸기, 플루오렌테닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 셀레노페닐기(selenophenyl), 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0087] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오렌테닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 나프틸기, 플루오렌테닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0088] -N(Q₄)(Q₅), -Si(Q₄)(Q₅)(Q₆), -B(Q₄)(Q₅) 및 -P(=O)(Q₄)(Q₅);

[0089] 중에서 선택되고,

[0090] Q₄ 내지 Q₆은 서로 독립적으로,

[0091] -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CH₂CH₃, -CH₂CD₃, -CH₂CD₂H, -CH₂CDH₂, -CHDC₃, -CHDCD₂H, -CHDCDH₂, -CHDCD₃, -CD₂CD₃, -CD₂CD₂H 및 -CD₂CDH₂;

[0092] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

[0093] 중수소, C₁-C₁₀알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

[0094] 중에서 선택될 수 있다.

[0095] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중 a₁ 및 a₃는 0이고, a₂는 1이고, T₂가 *-N(R₅)-*이면, 상기 R₅는,

[0096] 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 나프타세닐기, 벤조안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 벤조페난트레닐기, 크라이세닐기, 플루오란테닐기, 피세닐기, 펜타페닐기, 페틸렌기, 피롤일기, 피라졸일기, 이미다졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 트리아졸, 옥사디아졸, 테트라졸, 피리디닐기,

피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 벤조티아졸일기, 이소벤조티아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 시놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 나프티리디닐기, 벤조퀴놀리닐기, 아크리디닐기, 페난트리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기; 및

[0097] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 나프타세닐기, 벤조안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 벤조페난트레닐기, 크라이세닐기, 플루오란테닐기, 피세닐기, 펜타페닐기, 페틸렌기, 피롤일기, 피라졸일기, 이미다졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 트리아졸, 옥사디아졸, 테트라졸, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 벤조티아졸일기, 이소벤조티아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 시놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 나프티리디닐기, 벤조퀴놀리닐기, 아크리디닐기, 페난트리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 나프타세닐기, 벤조안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 벤조페난트레닐기, 크라이세닐기, 플루오란테닐기, 피세닐기, 펜타페닐기, 페틸렌기, 피롤일기, 피라졸일기, 이미다졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 트리아졸, 옥사디아졸, 테트라졸, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 벤조티아졸일기, 이소벤조티아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 시놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 나프티리디닐기, 벤조퀴놀리닐기, 아크리디닐기, 페난트리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기;

[0098] 중에서 선택될 수 있다.

[0099] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중 a1 및 a3는 0이고, a2는 1이고, T₂가 *-N(R₅)-*'이면, 상기 R₅는,

[0100] 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 플루오란테닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트롤리닐기 및 트리아지닐기; 및

[0101] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 플루오란테닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트롤리닐기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 플루오란테닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트롤리닐기 및 트리아지닐기;

[0102] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0103] 상기 화학식 1 중, Z₂ 및 Z₃는 각각 Cy₂ 및 Cy₃에 대하여 전자 π 는 특성을 갖는 전자끌개기(electron withdrawing group)로서, 서로 독립적으로, -F, -Cl, -Br, -I, -C(=O)(Q₁), -CFH₂, -CF₂H, -CF₃, 시아노기, -S(=O)₂(Q₁), -N⁺(Q₁)(Q₂)(Q₃), 니트로기 및 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 합질소 고리 그룹 중에서 선택되고,

[0104] 상기 Q₁ 내지 Q₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미

디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알킬닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0105] 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리 그룹"은, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 의미한다.

[0106] 예를 들어, 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리 그룹"은, i) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹이거나, ii) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 2 이상이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹이거나, 또는 iii) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 적어도 하나와, 적어도 하나의 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.

[0107] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Z₂ 및 Z₃는 서로 독립적으로,

[0108] -F, -Cl, -Br, -I, -C(=O)(Q₁), -CFH₂, -CF₂H, -CF₃, 시아노기, -S(=O)₂(Q₁), -N⁺(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 니트로기;

[0109] 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인다졸일기 그룹, 푸리닐기(puriny), 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 아자카바졸일기; 및

[0110] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -C(=O)(Q₃₁), -CFH₂, -CF₂H, -CF₃, 시아노기, -S(=O)₂(Q₃₁), -N⁺(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), 니트로기, 히드라진노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴아로-비플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜에닐기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜에닐기, 벤조셀레노페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜에닐기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인다졸일기 그룹, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 아자카바졸일기 중 적어도 하나로 치환된, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인다졸일기 그룹, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐 및 아자카바졸일기; 및

[0111] 중에서 선택되고,

[0112] 상기 Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0113] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Z₂ 및 Z₃는 서로 독립적으로,

[0114] -F, -Cl, -Br, -I, -C(=O)(Q₁), -CFH₂, -CF₂H, -CF₃, 시아노기, -S(=O)₂(Q₁), -N⁺(Q₁)(Q₂)(Q₃) 및 니트로기 중에

서 선택되고,

- [0115] 상기 Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0116] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Z₂ 및 Z₃는 서로 독립적으로, -F, -CF₃ 또는 시아노기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0117] 상기 화학식 1 중, b₂ 및 b₃는 각각 z₂ 및 z₃의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이되, b₂ + b₃는 1 이상일 수 있다. b₂가 2 이상일 경우 2 이상의 Z₂는 서로 동일하거나 상이하고, b₃가 2 이상일 경우 2 이상의 Z₃는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0118] 예를 들어, 상기 b₂ 및 b₃는 서로 독립적으로, 0 또는 1일 수 있다.
- [0119] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,
- [0120] b₂는 1이고, b₃는 0이거나;
- [0121] b₂는 0이고, b₃는 1이거나; 또는
- [0122] b₂ 및 b₃가 모두 1일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0123] 상기 화학식 1 중, X₂가 C이고, X₃가 N이면, b₂는 0이 아니고, X₂가 N이고, X₃가 C이면, b₃는 0이 아니다.
- [0124] 예를 들어, 상기 화학식 1 중,
- [0125] X₂가 C이고, X₃가 N이면, b₂는 1, 2 또는 3이고, b₃는 0, 1, 2 또는 3일 수 있고;
- [0126] X₂가 N이고, X₃가 C이면, b₂는 0, 1, 2 또는 3이고, b₃는 1, 2 또는 3일 수 있고; 또는
- [0127] X₂ 및 X₃가 모두 C이면, b₂ 및 b₃는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이되, b₂ + b₃는 1 이상일 수 있다.
- [0128] 상기 화학식 1 중, R₁ 내지 R₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₄)(Q₅)(Q₆), -N(Q₄)(Q₅), -B(Q₄)(Q₅), -C(=O)(Q₄), -S(=O)₂(Q₄) 및 -P(=O)(Q₄)(Q₅) 중에서 선택되고,
- [0129] 상기 Q₄ 내지 Q₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0130] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R₁ 내지 R₆은 서로 독립적으로,
- [0131] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, -SF₅, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0132] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노

기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0133] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0134] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 셀레노페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 벤조셀레노페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조셀레노페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0135] -N(Q₄)(Q₅), -Si(Q₄)(Q₅)(Q₆), -B(Q₄)(Q₅) 및 -P(=O)(Q₄)(Q₅);

[0136] 중에서 선택되고,

[0137] Q₄ 내지 Q₆은 서로 독립적으로,

[0138] -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CH₂CH₃, -CH₂CD₃, -CH₂CD₂H, -CH₂CDH₂, -CHDCH₃, -CHDCH₂H, -CHDCDH₂, -CHDCD₃, -CD₂CD₃, -CD₂CD₂H 및 -CD₂CDH₂;

[0139] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

[0140] 중수소, C₁-C₁₀알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

[0141] 중에서 선택될 수 있다.

- [0142] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R_1 내지 R_6 은 서로 독립적으로,
- [0143] 수소, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF₅, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기, 퓨라닐기, 티오펜일기, 셀레노페닐기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조셀레노페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기 및 디벤조셀레노페닐기;
- [0144] 중수소, -F, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, 니트로기, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기, 퓨라닐기, 티오펜일기, 셀레노페닐기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조셀레노페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기 및 디벤조셀레노페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기, 퓨라닐기, 티오펜일기, 셀레노페닐기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조셀레노페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기 및 디벤조셀레노페닐기; 및
- [0145] -N(Q₄)(Q₅), -Si(Q₄)(Q₅)(Q₆), -B(Q₄)(Q₅) 및 -P(=O)(Q₄)(Q₅);
- [0146] 중에서 선택되고,
- [0147] Q₄ 내지 Q₆은 서로 독립적으로,
- [0148] -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CH₂CH₃, -CH₂CD₃, -CH₂CD₂H, -CH₂CDH₂, -CHDCH₃, -CHDCD₂H, -CHDCDH₂, -CHDCD₃, -CD₂CD₃, -CD₂CD₂H 및 -CD₂CDH₂;
- [0149] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및
- [0150] 중수소, C₁-C₁₀알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;
- [0151] 중에서 선택될 수 있다.
- [0152] 상기 화학식 1 중, c₁ 내지 c₄는 각각 R₁ 내지 R₄의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5일 수 있다. 상기 c₁이 2 이상일 경우, 2 이상의 R₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 상기 c₂가 2 이상일 경우, 2 이상의 R₂는 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 상기 c₃가 2 이상일 경우, 2 이상의 R₃는 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 상기 c₄가 2 이상일 경우, 2 이상의 R₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0153] 상기 화학식 1 중, c₁개의 R₁ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, c₂개의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, c₃개의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환

또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, c4개의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, R₁ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, R₅ 및 R₆ 중 하나와 R₃는, 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, R₅ 및 R₆ 중 하나와 R₄는, 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.

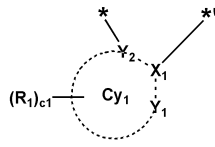
[0154] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 i) c1개의 R₁ 중 2개, ii) c2개의 R₂ 중 2개, iii) c3개의 R₃ 중 2개, iv) c4개의 R₄ 중 2개, v) R₁ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상, vi) R₅ 및 R₆ 중 하나와 R₃ 및 vii) R₅ 및 R₆ 중 하나와 R₄가, 각각 선택적으로, 서로 결합하여, 형성할 수 있는, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹은,

[0155] 펜타디엔 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헵탄 그룹, 아다만탄 그룹, 비시클로-헵탄(bicycle-heptanes) 그룹, 비시클로-옥탄 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 테트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 디하이드로나프탈렌 그룹, 페날렌 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자인돌 그룹, 아자인덴 그룹 및 아자벤조실롤 그룹; 및

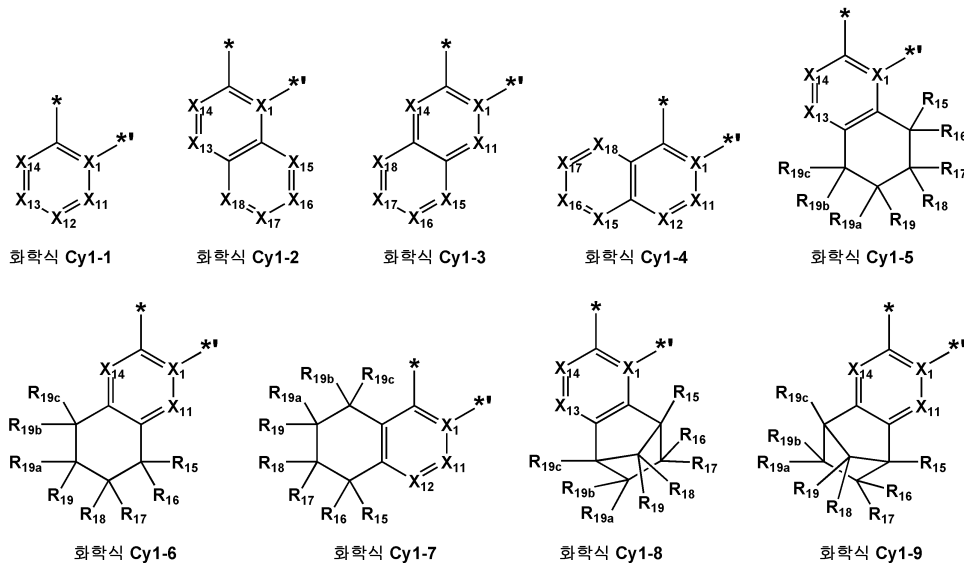
[0156] 적어도 하나의 R_{1a}로 치환된, 펜타디엔 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헵탄 그룹, 아다만탄 그룹, 비시클로-헵탄(bicycle-heptanes) 그룹, 비시클로-옥탄 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 테트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 디하이드로나프탈렌 그룹, 페날렌 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자인돌 그룹, 아자인덴 그룹 및 아자벤조실롤 그룹;

[0157] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

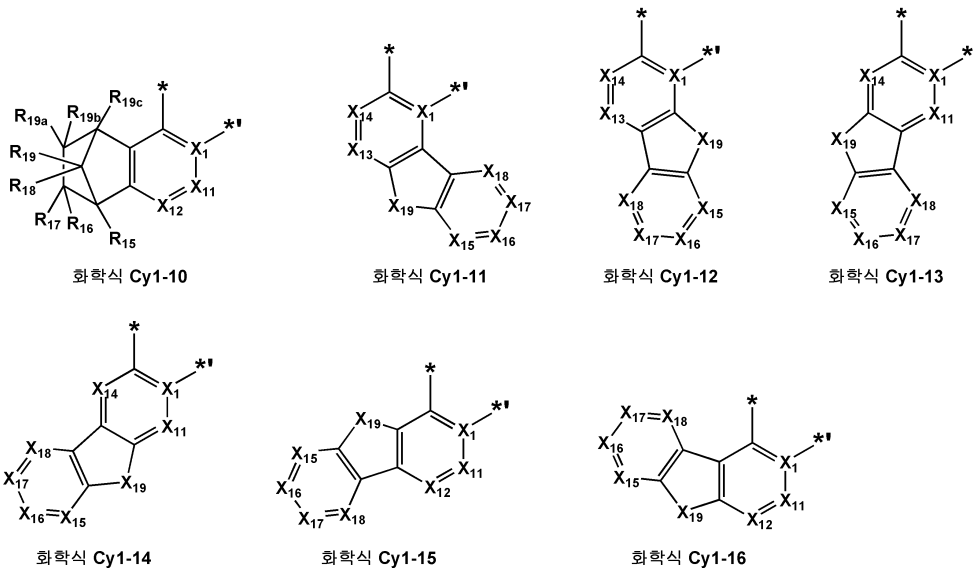
[0158] 상기 R_{1a}에 대한 설명은 본 명세서 중 R₁에 대한 설명을 참조한다.



[0159] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy1-1 내지 Cy1-16으로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



[0160]



[0161]

[0162]

[0163]

[0164]

[0165]

[0166]

[0167]

[0168]

상기 화학식 Cy1-1 내지 Cy1-16 중,

X₁은 N 또는 C이고,

X₁₁은 N 또는 C(R₁₁)이고, X₁₂은 N 또는 C(R₁₂)이고, X₁₃은 N 또는 C(R₁₃)이고, X₁₄는 N 또는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 N 또는 C(R₁₅)이고, X₁₆은 N 또는 C(R₁₆)이고, X₁₇은 N 또는 C(R₁₇)이고, X₁₈은 N 또는 C(R₁₈)이고,

X₁₉는 C(R_{19a})(R_{19b}), N(R₁₉), O, S 또는 Si(R_{19a})(R_{19b})이고,

R₁₁ 내지 R₁₉ 및 R_{19a} 내지 R_{19c}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 R₁에 대한 설명을 참조하고,

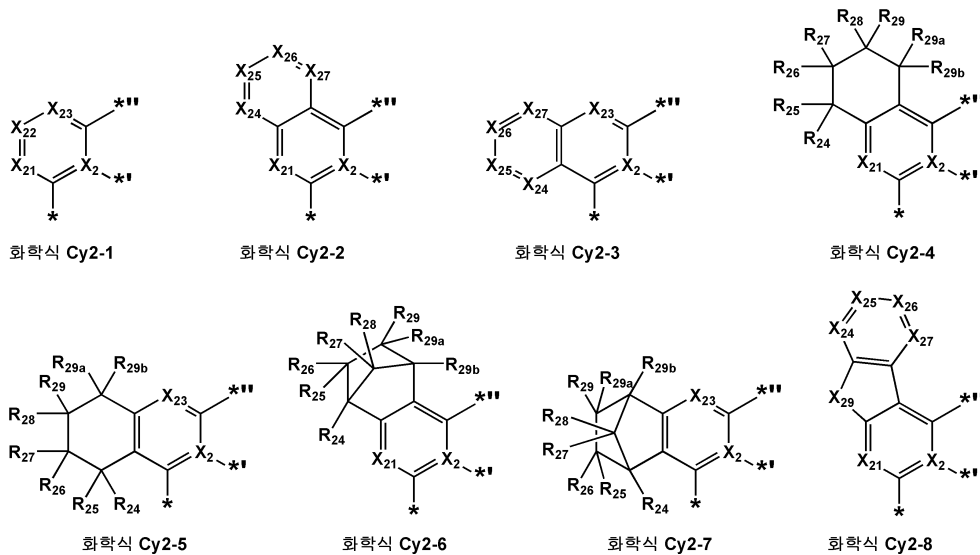
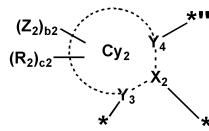
* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

예를 들어, 상기 화학식 Cy1-1 내지 Cy1-16 중, X₁₁은 C(R₁₁)이고, X₁₂는 C(R₁₂)이고, X₁₃은 C(R₁₃)이고, X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅)이고, X₁₆은 C(R₁₆)이고, X₁₇은 C(R₁₇)이고, X₁₈은 C(R₁₈)이고, X₁₉는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

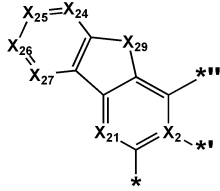
[0169]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중

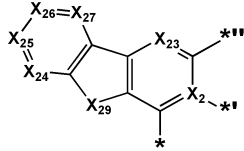
Cy2-11로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



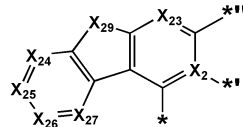
[0170]



화학식 Cy2-9



화학식 Cy2-10



화학식 Cy2-11

[0171]

[0172]

[0173]

[0174]

[0175]

[0176]

[0177]

[0178]

[0179]

[0180]

상기 화학식 Cy2-1 내지 Cy2-11 중,

X₂은 N 또는 C이고,

X₂₁은 N, C(R₂₁) 또는 C(Z₂₁)이고, X₂₂는 N, C(R₂₂) 또는 C(Z₂₂)이고, X₂₃은 N, C(R₂₃) 또는 C(Z₂₃)이고, X₂₄는 N, C(R₂₄) 또는 C(Z₂₄)이고, X₂₅는 N, C(R₂₅) 또는 C(Z₂₅)이고, X₂₆는 N, C(R₂₆) 또는 C(Z₂₆)이고, X₂₇는 N, C(R₂₇) 또는 C(Z₂₇)이고,

X₂₉는 C(R_{29a})(R_{29b}), N(R₂₉), O, S 또는 Si(R_{29a})(R_{29b})이고,

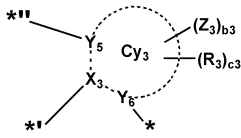
R₂₁ 내지 R₂₇, R₂₉, R_{29a} 및 R_{29b}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 R₂에 대한 설명을 참조하고,

Z₂₁ 내지 Z₂₇에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 Z₂에 대한 설명을 참조하고,

*, *' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

예를 들어, 상기 화학식 Cy2-1 내지 Cy2-11 중 X₂₁은 C(R₂₁)이고, X₂₂는 C(R₂₂)이고, X₂₃은 C(R₂₃)이고, X₂₄는 C(R₂₄)이고, X₂₅는 C(R₂₅)이고, X₂₆는 C(R₂₆)이고, X₂₇는 C(R₂₇)이고, X₂₉는 O일 수 있다.

다른 예로서, 상기 화학식 Cy2-1 내지 Cy2-11 중 X₂₁은 C(R₂₁)이고, X₂₂는 C(Z₂₂)이고, X₂₃은 C(R₂₃)이고, X₂₄는 C(R₂₄)이고, X₂₅는 C(R₂₅)이고, X₂₆는 C(R₂₆)이고, X₂₇는 C(R₂₇)이고, X₂₉는 O일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

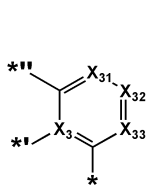


[0181]

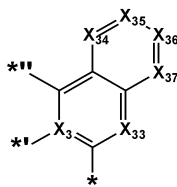
일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy3-1 내지

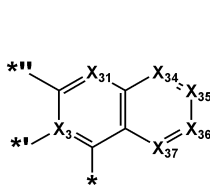
Cy3-11로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



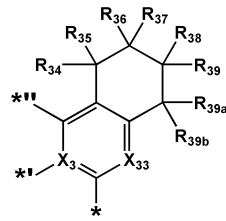
화학식 Cy3-1



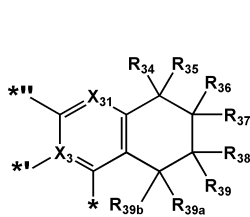
화학식 Cy3-2



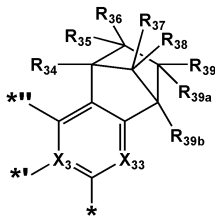
화학식 Cy3-3



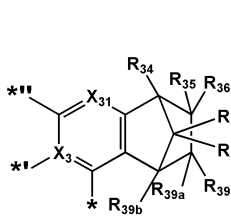
화학식 Cy3-4



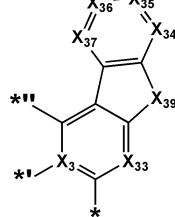
화학식 Cy3-5



화학식 Cy3-6

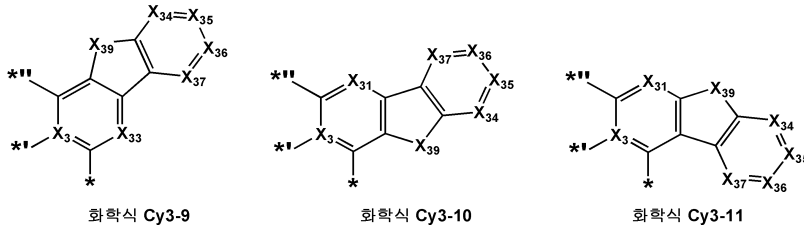


화학식 Cy3-7



화학식 Cy3-8

[0182]



[0183]

[0184]

[0185]

[0186]

[0187]

[0188]

[0189]

[0190]

[0191]

[0192]

상기 화학식 Cy3-1 내지 Cy3-11 중,

X₃은 N 또는 C이고,

X₃₁은 N, C(R₃₁) 또는 C(Z₃₁)이고, X₃₂는 N, C(R₃₂) 또는 C(Z₃₂)이고, X₃₃은 N, C(R₃₃) 또는 C(Z₃₃)이고, X₃₄는 N, C(R₃₄) 또는 C(Z₃₄)이고, X₃₅는 N, C(R₃₅) 또는 C(Z₃₅)이고, X₃₆는 N, C(R₃₆) 또는 C(Z₃₆)이고, X₃₇는 N, C(R₃₇) 또는 C(Z₃₇)이고,

X₃₉는 C(R_{39a})(R_{39b}), N(R₃₉), O, S 또는 Si(R_{39a})(R_{39b})이고,

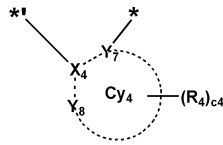
R₃₁ 내지 R₃₇, R₃₉, R_{39a} 및 R_{39b}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 R₃에 대한 설명을 참조하고,

Z₃₁ 내지 Z₃₇에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 Z₃에 대한 설명을 참조하고,

*, *' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

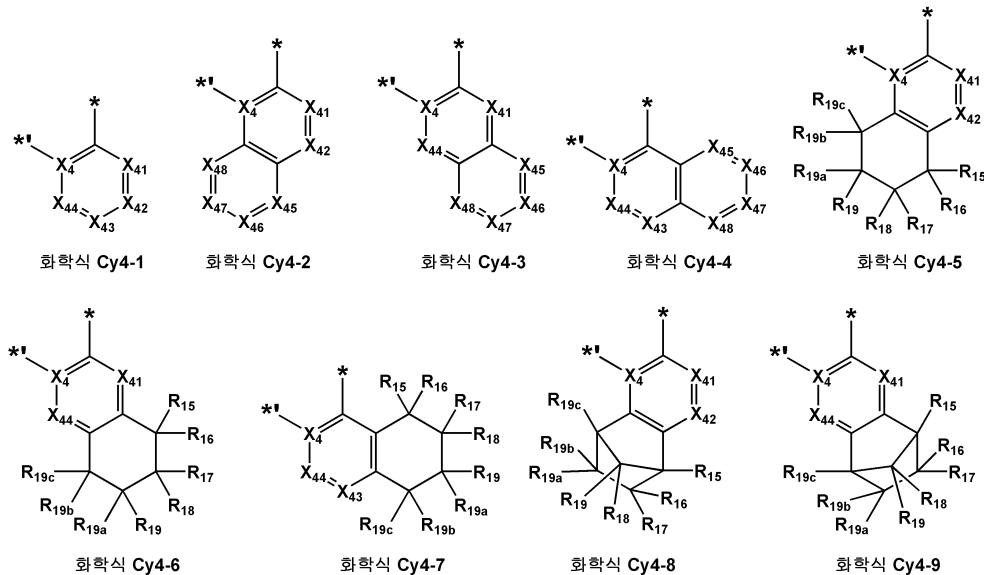
예를 들어, 상기 화학식 Cy3-1 내지 Cy3-11 중, X₃₁은 C(R₃₁)이고, X₃₂는 C(R₃₂)이고, X₃₃은 C(R₃₃)이고, X₃₄는 C(R₃₄)이고, X₃₅는 C(R₃₅)이고, X₃₆는 C(R₃₆)이고, X₃₇는 C(R₃₇)이고, X₃₉는 O일 수 있다.

다른 예로서, 상기 화학식 Cy3-1 내지 Cy3-11 중, X₃₁은 C(R₃₁)이고, X₃₂는 C(Z₃₂)이고, X₃₃은 C(R₃₃)이고, X₃₄는 C(R₃₄)이고, X₃₅는 C(R₃₅)이고, X₃₆는 C(R₃₆)이고, X₃₇는 C(R₃₇)이고, X₃₉는 O일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

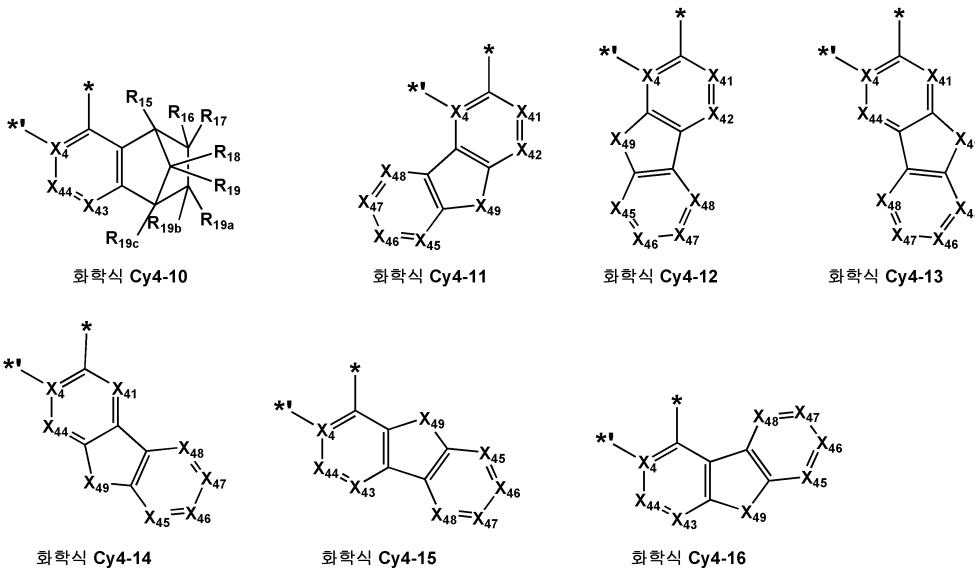


[0193]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy4-1 내지 Cy4-16으로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



[0194]



[0195]

[0196]

[0197]

[0198]

[0199]

[0200]

[0201]

[0202]

상기 화학식 Cy4-1 내지 Cy4-16 중,

X₄은 N 또는 C이고,

X₄₁은 N 또는 C(R₄₁)이고, X₄₂은 N 또는 C(R₄₂)이고, X₄₃은 N 또는 C(R₄₃)이고, X₄₄은 N 또는 C(R₄₄)이고, X₄₅는 N 또는 C(R₄₅)이고, X₄₆은 N 또는 C(R₄₆)이고, X₄₇은 N 또는 C(R₄₇)이고, X₄₈은 N 또는 C(R₄₈)이고,

X₄₉는 C(R_{49a})(R_{49b}), N(R₄₉), O, S 또는 Si(R_{49a})(R_{49b})이고,

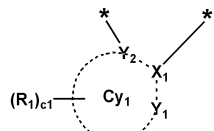
R₄₁ 내지 R₄₉ 및 R_{49a} 내지 R_{49c}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 R₄에 대한 설명을 참조하고,

* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

예를 들어, 상기 화학식 Cy4-1 내지 Cy4-16 중, X₄₁은 C(R₄₁)이고, X₄₂는 C(R₄₂)이고, X₄₃은 C(R₄₃)이고, X₄₄는 C(R₄₄)이고, X₄₅는 C(R₄₅)이고, X₄₆은 C(R₄₆)이고, X₄₇은 C(R₄₇)이고, X₄₈은 C(R₄₈)이고, X₄₉는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

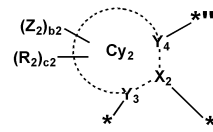
[0203]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



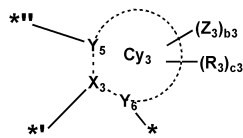
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy1-1, Cy1-14

및 Cy1-15로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있고,

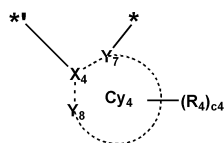


로 표시되는 모이어티가 상기 화학식

Cy2-1로 표시되는 그룹이고,



로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy3-1로 표시되는 그룹

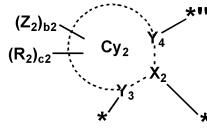


이고,

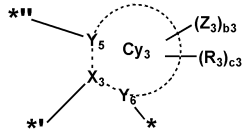
로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy4-1, Cy4-14 및 Cy4-15로 표시되는 그룹 중

에서 선택될 수 있다. 이때, 상기 X₁은 N이고, X₂은 C이고, X₃은 C이고, X₄은 N이거나; X₁은 C이고, X₂은 C이고, X₃은 N이고, X₄은 N이거나; 또는 X₁은 N이고, X₂은 N이고, X₃은 C이고, X₄은 C일 수 있으나, 이에 한정되는 것은

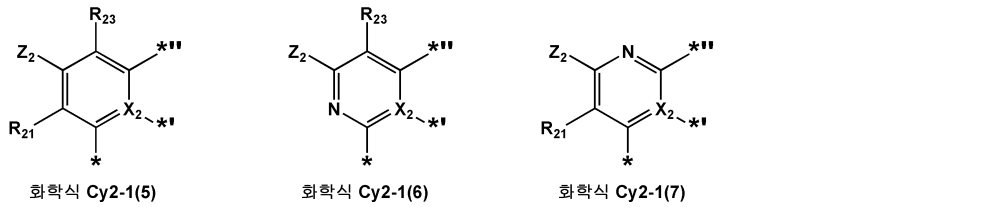
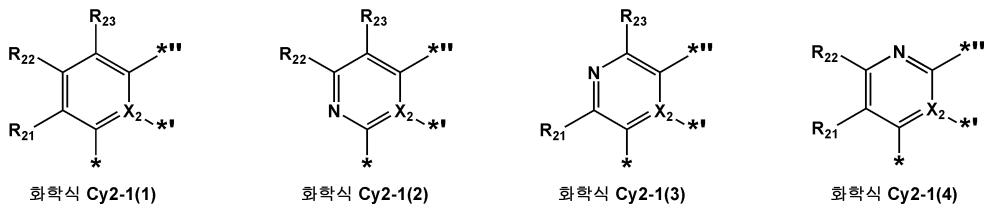
아니다.



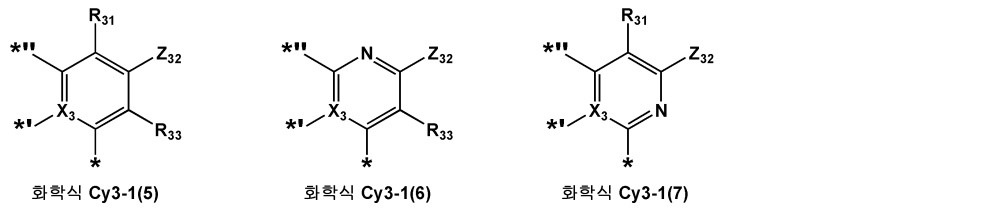
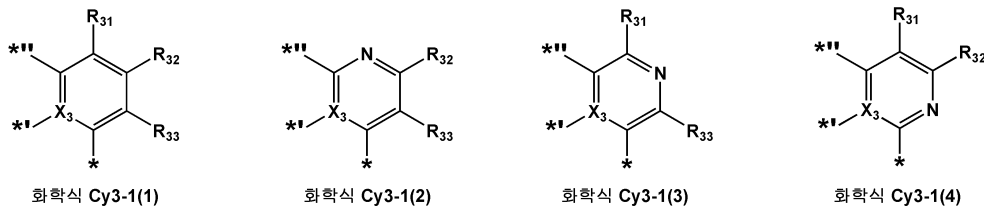
[0204] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Cy2-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 및/또는



[0205] 상기 화학식 1 중 Cy3-1(1) 내지 Cy3-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



[0206]



[0207]

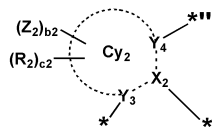
[0208] 상기 화학식 Cy2-1(1) 내지 Cy2-1(7) 및 Cy3-1(1) 내지 Cy3-1(7) 중,

[0209] X₂, X₃, Z₂ 및 Z₃에 대한 설명은 제1항에 기재된 바를 참조하고,

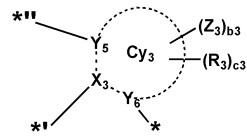
[0210] R₂₁ 내지 R₂₃에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 R₂에 대한 설명을 참조하고,

[0211] R₃₁ 내지 R₃₃에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 R₃에 대한 설명을 참조하고,

[0212] *, *' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.



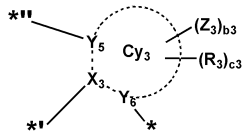
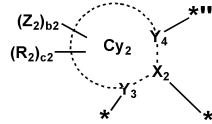
[0213] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 Cy2-1(1) 내지 Cy2-



1(4)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X_2 는 C 또는 N이고, 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5) 내지 Cy3-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X_3 는 C일 수 있다.

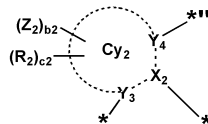
[0214]

다른 예로서, 상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(5) 내지 Cy2-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X_2 는 C이고,



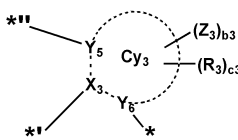
[0215]

로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(1) 내지 Cy3-1(4)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X_3 는 C 또는 N일 수 있다.

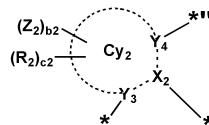


[0216]

또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(5) 내지 Cy2-

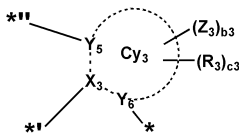


1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5) 내지 Cy3-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X_2 및 X_3 는 서로 독립적으로 C 또는 N이되, 상기 X_2 및 X_3 중 적어도 하나는 C일 수 있다.

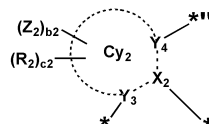


[0217]

또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(1)로 표시되

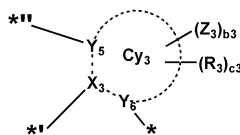


는 그룹이고, 상기 X_2 는 C 또는 N이고, 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5)로 표시되는 그룹이고, 상기 X_3 는 C일 수 있다.



[0218]

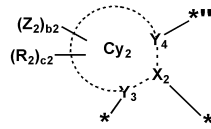
또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(5)로 표시되



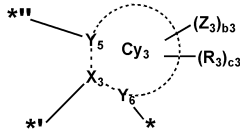
는 그룹이고, 상기 X_2 는 C이고, 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(1)로 표시되는 그룹이고, 상기 X_3 는 C 또는 N일 수 있다.

[0219]

또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중



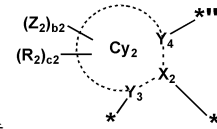
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(5)로 표시되



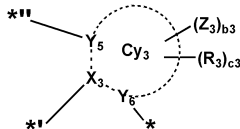
는 그룹이고, 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5)로 표시되는 그룹이고, 상기 X₂ 및 X₃는 서로 독립적으로 C 또는 N이되, 상기 X₂ 및 X₃는 중 적어도 하나는 C일 수 있다.

[0220]

또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중



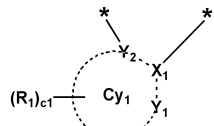
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(5)로 표시되



는 그룹이고, 로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5)로 표시되는 그룹이고, 상기 X₂ 및 X₃는 C일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

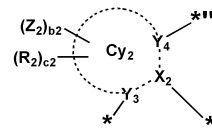
[0221]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



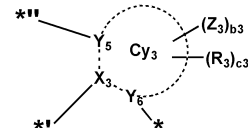
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy1-1, Cy1-14

및 Cy1-15로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,



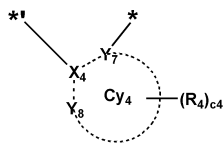
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-1(1)

내지 Cy2-1(4)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X₂는 C 또는 N이고,



로 표시되는

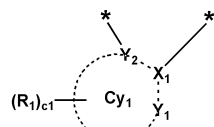
모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5) 내지 Cy3-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X₃는 C이고,



로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy4-1, Cy4-14 및 Cy4-15로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.

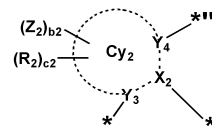
[0222]

다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



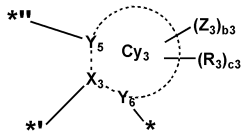
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy1-1, Cy1-

14 및 Cy1-15로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,



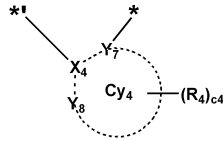
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy2-

1(5) 내지 Cy2-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X₂는 C이고,



[0223]

로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(1) 내지 Cy3-1(4)로 표시되는 그룹 중에서 선



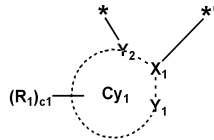
택되고, 상기 X₃는 C 또는 N이고,

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy4-1, Cy4-14 및

Cy4-15로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.

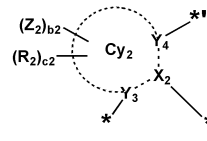
[0224]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



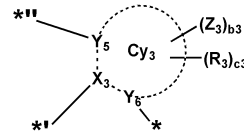
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy1-1,

Cy1-14 및 Cy1-15로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,



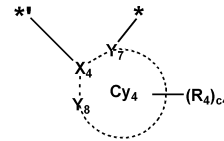
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식

Cy2-1(5) 내지 Cy2-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기



로 표시되는 모이어티가

상기 화학식 Cy3-1(5) 내지 Cy3-1(7)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고, 상기 X₂ 및 X₃는 서로 독립적으로 C 또



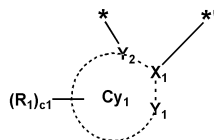
는 N이되, 상기 X₂ 및 X₃ 중 적어도 하나는 C이고,

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식

Cy4-1, Cy4-14 및 Cy4-15로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.

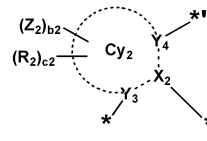
[0225]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



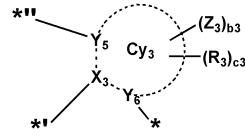
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy1-1,

Cy1-14 및 Cy1-15로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,



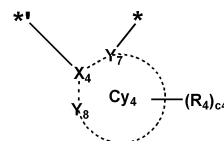
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식

Cy2-1(1)로 표시되는 그룹이고, 상기 X₂는 C 또는 N이고,



로 표시되는 모이어티가 상기 화

학식 Cy3-1(5)로 표시되는 그룹이고, 상기 X₃는 C이고,

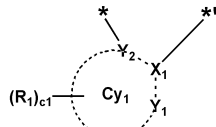


로 표시되는 모이어티가 하기 화학

식 Cy4-1, Cy4-14 및 Cy4-15로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.

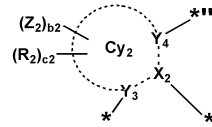
[0226]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



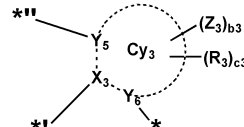
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy1-1,

Cy1-14 및 Cy1-15로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,



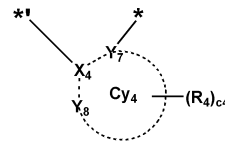
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식

Cy2-1(5)로 표시되는 그룹이고, 상기 X2는 C이고,



로 표시되는 모이어티가 상기 화학식

Cy3-1(1)로 표시되는 그룹이고, 상기 X3는 C 또는 N이고,

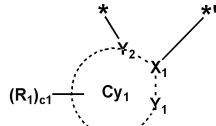


로 표시되는 모이어티가 하기 화학

식 Cy4-1, Cy4-14 및 Cy4-15로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.

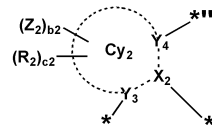
[0227]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



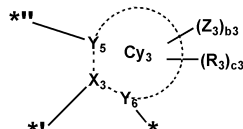
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy1-1,

Cy1-14 및 Cy1-15로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,



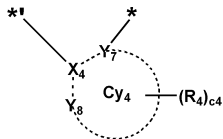
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식

Cy2-1(5)로 표시되는 그룹이고,



로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5)로 표시되는

그룹이고, 상기 X2 및 X3는 서로 독립적으로 C 또는 N이되, 상기 X2 및 X3는 중 적어도 하나는 C이고,

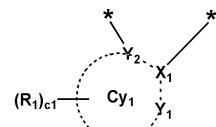


로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy4-1, Cy4-14 및 Cy4-15로 표시되는 그룹 중에서 선택

될 수 있다.

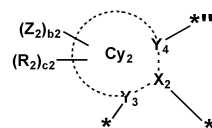
[0228]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



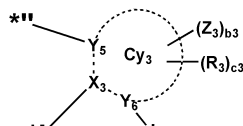
로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy1-1,

Cy1-14 및 Cy1-15로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

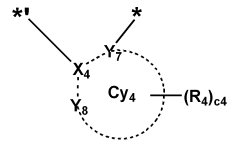


로 표시되는 모이어티가 상기 화학식

Cy2-1(5)로 표시되는 그룹이고,

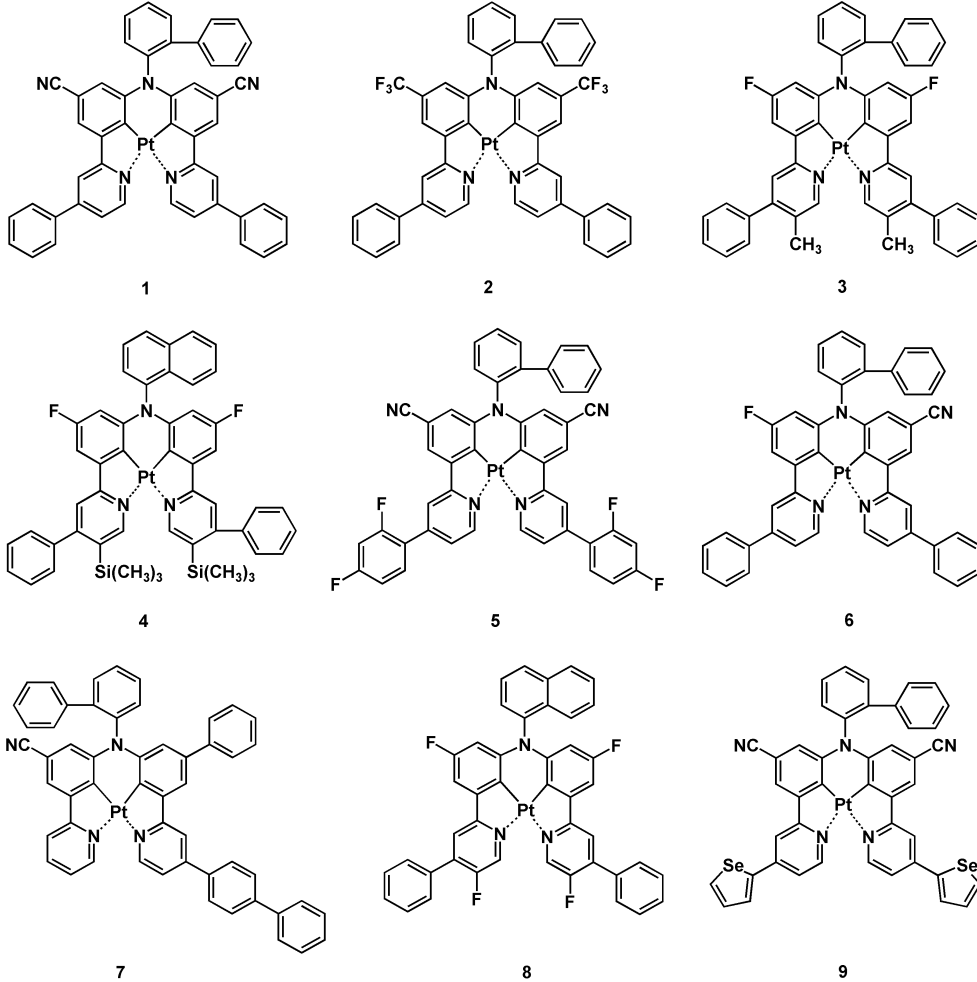


로 표시되는 모이어티가 상기 화학식 Cy3-1(5)로 표시되는



그룹이고, 상기 X_2 및 X_3 는 C이고, 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 Cy4-1, Cy4-14 및 Cy4-15로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0229] 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은, 하기 화합물 1 내지 9 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0230]

[0231]

[0232] 상기 화학식 1 중, T_1 내지 T_3 는 서로 독립적으로, $*-O-*'$, $*-S-*'$, $*-C(R_5)(R_6)-*'$, $*-C(R_5)=*'$, $*=C(R_5)-*'$, $*-C(R_5)=C(R_6)-*'$, $*-C\equiv C-*'$, $*-N(R_5)-*'$, $*-Si(R_5)(R_6)-*'$ 및 $*-P(R_5)(R_6)-*'$ 중에서 선택된다. 상기 T_1 내지 T_3 의 목록에서 $*-P(=O)R_5-*'$ 는 제외되는데, $*-P(=O)R_5-*'$ 를 링커로서 포함한 유기금속 화합물은 비발광전이기가 발생하는 문제가 있고, 따라서 $*-P(=O)R_5-*'$ 를 링커로서 포함한 유기금속 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 수명이 짧다. 반면, $*-O-*'$, $*-S-*'$, $*-C(R_5)(R_6)-*'$, $*-C(R_5)=*'$, $*=C(R_5)-*'$, $*-C(R_5)=C(R_6)-*'$, $*-C\equiv C-*'$, $*-N(R_5)-*'$, $*-Si(R_5)(R_6)-*'$ 및/또는 $*-P(R_5)(R_6)-*'$ 를 링커로서 포함한 유기금속 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 장수명을 갖는다.

[0233] 또한, 상기 화학식 1 중, X_2 및 X_3 가 모두 C이면, Cy2 및 Cy3 중 적어도 하나에는 Z_2 또는 Z_3 가 반드시 포함되고; X_2 가 C이고, X_3 가 N이면, Cy2는 반드시 Z_2 를 포함하고; 및 X_2 가 N이고, X_3 가 C이면, Cy3는 반드시 Z_3 를 포함한다. 이러한 경우, oscillation strength가 증가하고, 그 결과 발광 효율을 향상시킬 수 있다. 특히, Cy2 또는 Cy3가 벤젠 그룹이고, Z_2 또는 Z_3 가 금속 M에 대하여 para 위치에 존재하는 경우, oscillation strength를 더욱 향상시킬 수 있다.

[0234] 예를 들어, 상기 화합물 1 내지 9에 대한 HOMO, LUMO, 단일항(S_1) 및 삼중항(T_1) 에너지 레벨을 Gaussian 프로

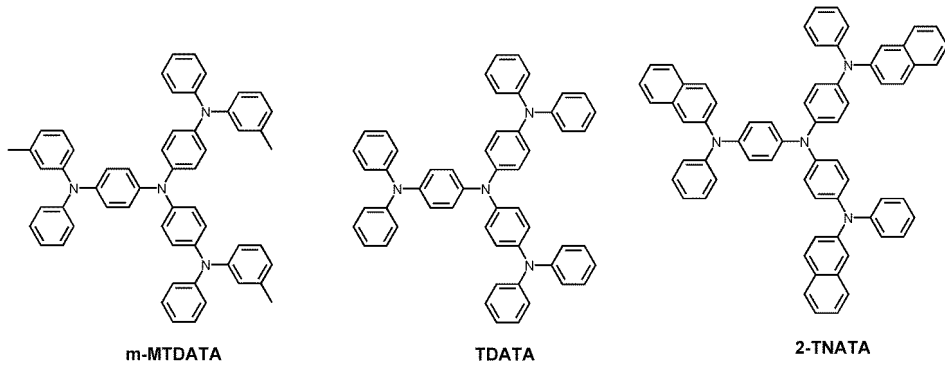
그램의 DFT 방법을 이용하여 (B3LYP, 6-31G(d,p) 수준에서 구조 최적화함) 평가한 결과는 하기 표 1과 같다.

표 1

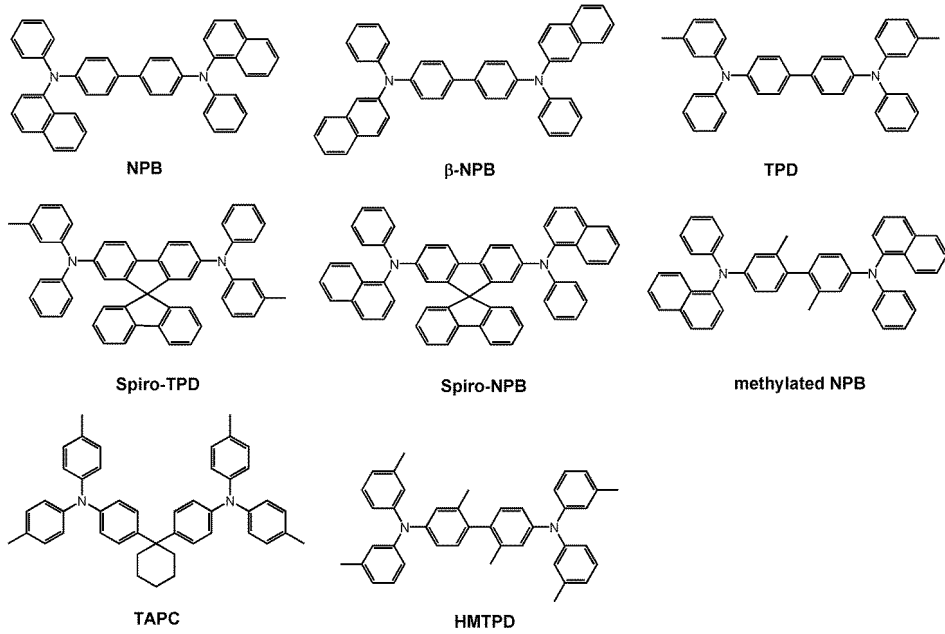
화합물 No.	HOMO(eV)	LUMO(eV)	S ₁ 에너지 레벨(eV)	T ₁ 에너지 레벨(eV)
1	-5.05	-2.25	2.23	1.98
2	-4.82	-2.05	2.16	1.97
3	-4.69	-2.03	2.10	1.90
4	-4.54	-1.77	2.16	1.93
5	-5.13	-2.37	2.22	1.96
6	-4.82	-2.08	2.16	1.94
7	-4.77	-2.03	2.12	1.95
8	-4.69	-2.03	2.09	1.90
9	-5.08	-2.43	2.10	1.89

- [0235]
- [0236] 상기 표 1로부터, 상기 화학식 1로 표시된 유기 금속 화합물은 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 도펀트로 사용하기에 적합한 전기적 특성을 가짐을 확인할 수 있다.
- [0237] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 인식할 수 있다.
- [0238] 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 유기층, 예를 들면, 상기 유기층 중 발광층의 도펀트로 사용하기 적합할 수 있는 바, 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 적어도 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0239] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한 유기층을 구비함으로써, 저구동전압, 고효율, 고전력, 고양자 효율, 장수명 및 낮은 롤-오프비와 우수한 색순도를 가질 수 있다.
- [0240] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있다. 이 때, 상기 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 하고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함할 수 있다(즉, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 함량은 상기 호스트의 함량보다 작음).
- [0241] 본 명세서 중 "(유기층이) 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 유기금속 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 유기금속 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0242] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 유기금속 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)할 수 있다.
- [0243] 상기 제1전극은 정공 주입 전극인 애노드이고 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드이거나, 상기 제1전극은 전자 주입 전극인 캐소드이고 상기 제2전극은 정공 주입 전극인 애소드이다.
- [0244] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자 중 상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고, 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고, 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0245] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"은 유기 화합물뿐만 아니라, 금속을 포함한 유기금속 착체 등도 포함할 수 있다.
- [0246] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다. 유기 발광 소자(10)는 제1전극(11), 유기층(15) 및 제2전극(19)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.

- [0247] 상기 제1전극(11) 하부 또는 제2전극(19) 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0248] 상기 제1전극(11)은 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 애노드일 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등과 같은 금속을 이용할 수 있다.
- [0249] 상기 제1전극(11)은 단일층 또는 2 이상의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(11)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0250] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.
- [0251] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.
- [0252] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.
- [0253] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 버퍼층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0254] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층만을 포함하거나, 정공 수송층만을 포함할 수 있다. 또는, 상기 정공 수송 영역은, 제1전극(11)로부터 차례로 적층된, 정공 주입층/정공 수송층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 구조를 가질 수 있다.
- [0255] 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(11) 상부에 진공증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0256] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500°C, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0257] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0258] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.
- [0259] 상기 정공 수송 영역은, 예를 들면, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, methylated-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄퍼술포산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



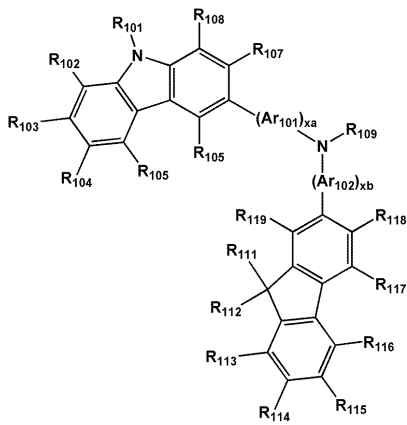
[0260]



[0261]

[0262]

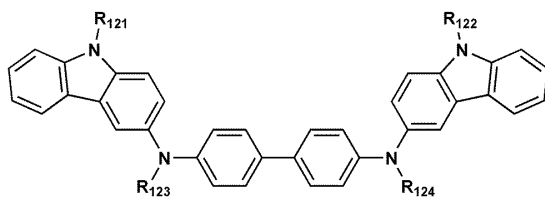
<화학식 201>



[0263]

[0264]

<화학식 202>



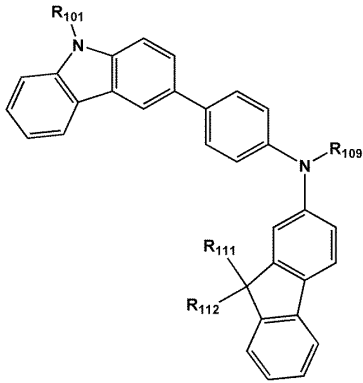
[0265]

[0266]

상기 화학식 201 중, Ar₁₀₁ 및 Ar₁₀₂는 서로 독립적으로,

- [0267] 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 콰이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기; 및
- [0268] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 콰이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기;
- [0269] 중에서 선택될 수 있다.
- [0270] 상기 화학식 201 중, 상기 xa 및 xb는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수, 또는 0, 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, 상기 xa는 1이고, xb는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0271] 상기 화학식 201 및 202 중, 상기 R₁₀₁ 내지 R₁₀₈, R₁₁₁ 내지 R₁₁₉ 및 R₁₂₁ 내지 R₁₂₄는 서로 독립적으로,
- [0272] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등) 및 C₁-C₁₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기 등);
- [0273] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 하나 이상으로 치환된, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기;
- [0274] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 콰이레닐기; 및
- [0275] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 콰이레닐기;
- [0276] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0277] 상기 화학식 201 중, R₁₀₉는,
- [0278] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기; 및
- [0279] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기;
- [0280] 중에서 선택될 수 있다.
- [0281] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

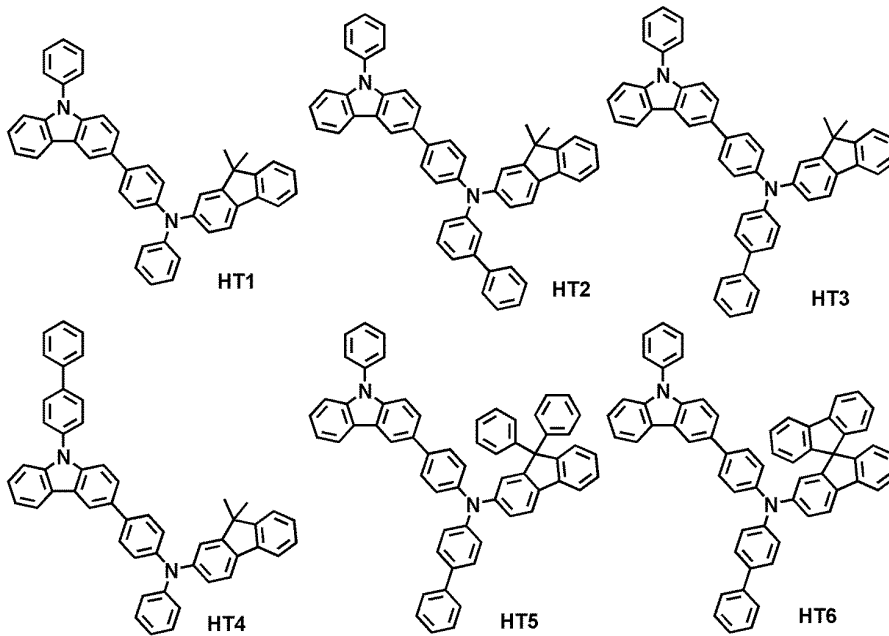
[0282] <화학식 201A>



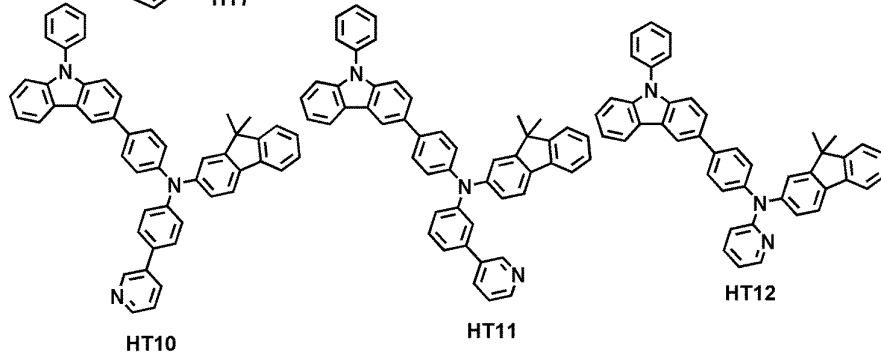
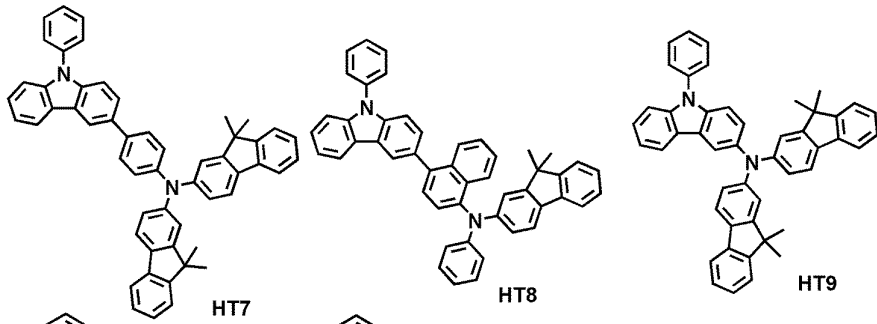
[0283]

[0284] 상기 화학식 201A 중, R₁₀₁, R₁₁₁, R₁₁₂ 및 R₁₀₉에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

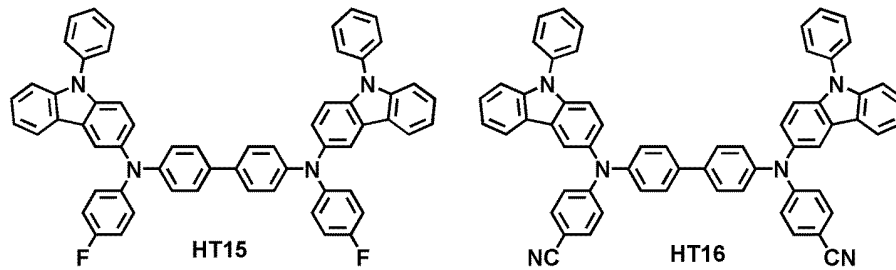
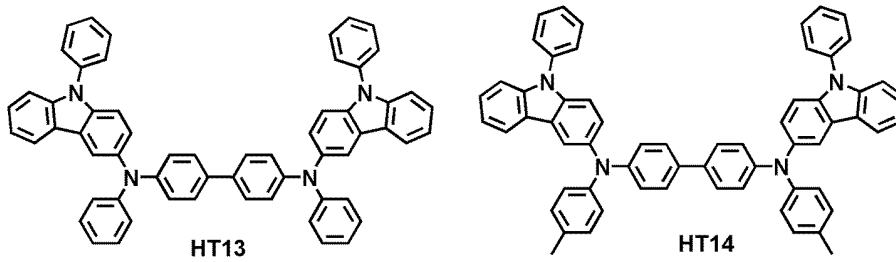
[0285] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



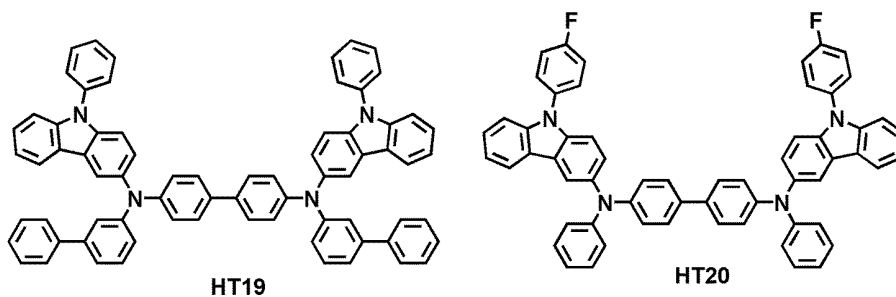
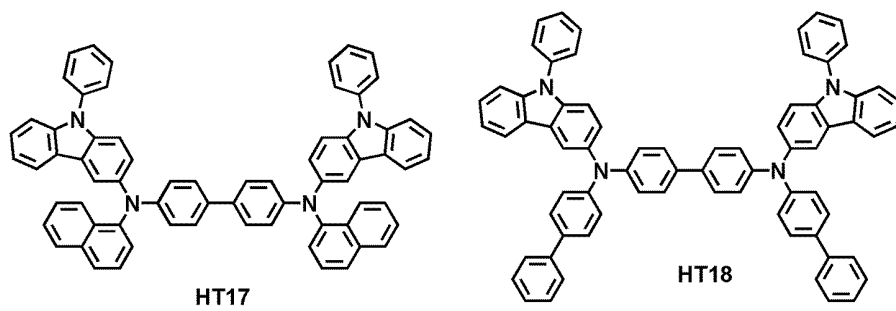
[0286]



[0287]



[0288]



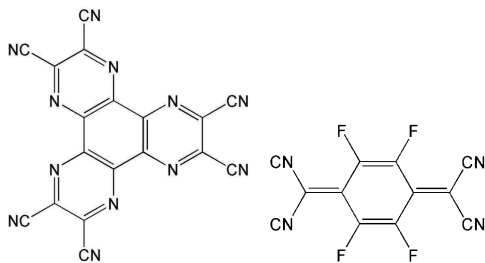
[0289]

[0290] 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 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0291] 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.

[0292] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라시아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 HT-D1 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0293] <화합물 HT-D1> <F4-TCNQ>



[0294] 상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

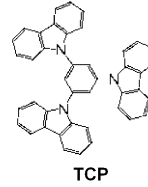
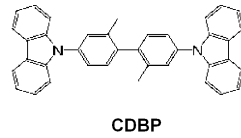
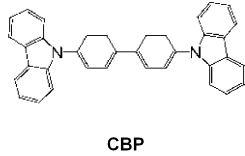
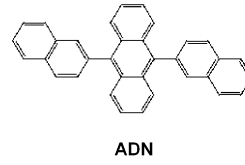
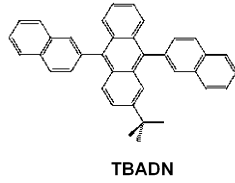
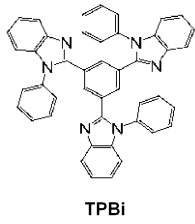
[0296] 상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 수 있다.

[0297] 상기 정공 수송 영역 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0298] 한편, 상기 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 상기 전자 저지층 재료는, 상술한 바와 같은 정공 수송 영역에 사용될 수 있는 물질 및 후술하는 호스트 물질 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 전자 저지층 재료로서, 후술하는 mCP를 사용할 수 있다.

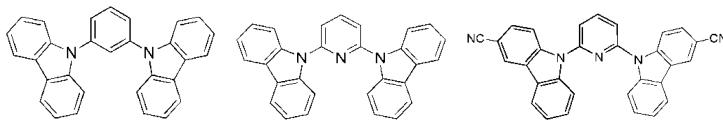
[0299] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한다.

[0300] 상기 호스트는 하기 TPBi, TBADN, ADN("DNA"라고도 함), CBP, CDBP, TCP, Mcp, 화합물 H50 및 화합물 H51 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



[0301]

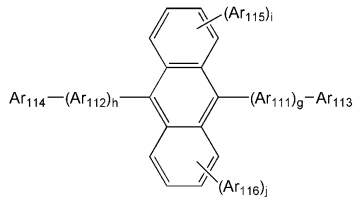
[0302] <mCP> <화합물 H50> <화합물 H51>



[0303]

[0304] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 더 포함할 수 있다:

[0305] <화학식 301>



[0306]

[0307] 상기 화학식 301 중, Ar₁₁₁ 및 Ar₁₁₂는 서로 독립적으로,

[0308] 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기; 및

[0309] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기;

[0310] 중에서 선택될 수 있다.

[0311] 상기 화학식 301 중 상기 Ar₁₁₃ 내지 Ar₁₁₆은 서로 독립적으로,

[0312] C₁-C₁₀알킬기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기; 및

[0313] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기;

[0314] 중에서 선택될 수 있다.

[0315] 상기 화학식 301 중 g, h, i 및 j는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수, 예를 들면, 0, 1 또는 2일 수 있다.

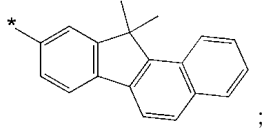
[0316] 상기 화학식 301 중, Ar₁₁₃ 내지 Ar₁₁₆은 서로 독립적으로,

[0317] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기;

[0318] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기;

[0319] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기 중 하나 이상

으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기; 및



[0320]

[0321]

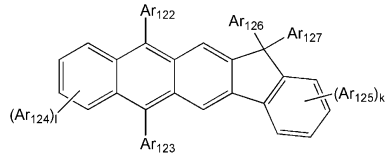
[0322]

[0323]

중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

또는, 상기 호스트는 하기 화학식 302로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

<화학식 302>



[0324]

[0325]

[0326]

[0327]

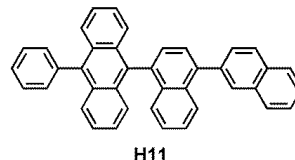
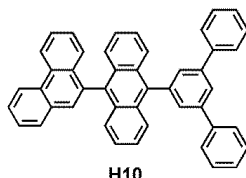
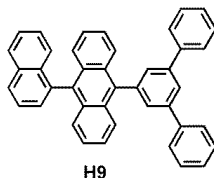
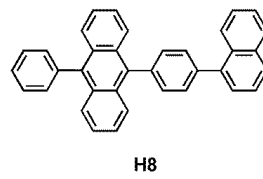
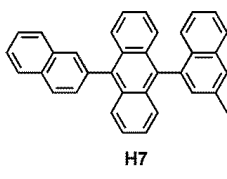
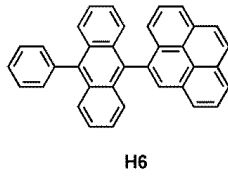
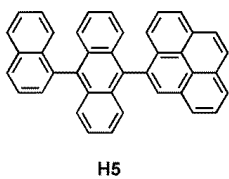
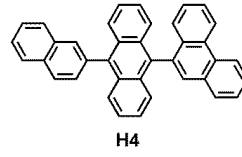
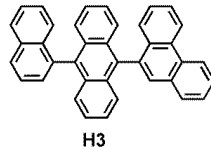
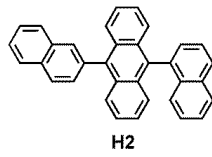
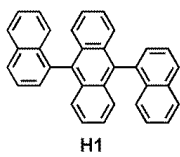
[0328]

상기 화학식 302 중 Ar_{122} 내지 Ar_{125} 에 대한 상세한 설명은 상기 화학식 301의 Ar_{113} 에 대한 설명을 참조한다.

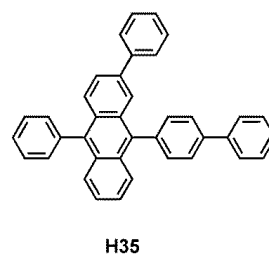
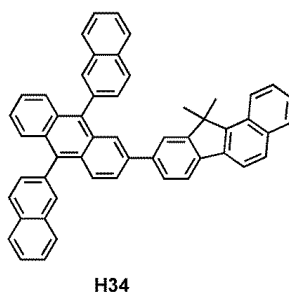
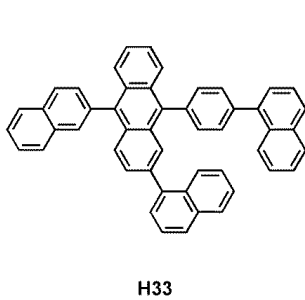
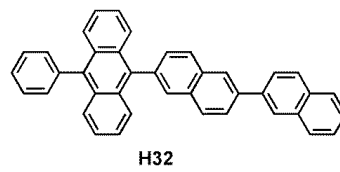
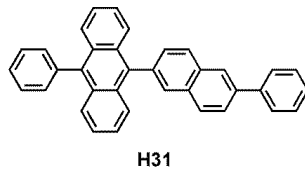
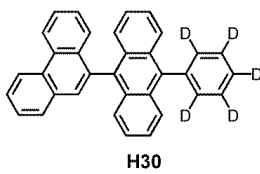
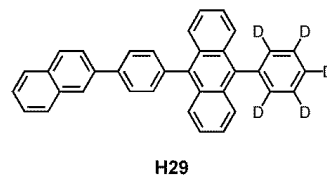
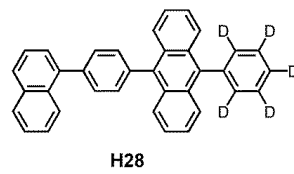
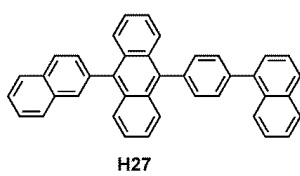
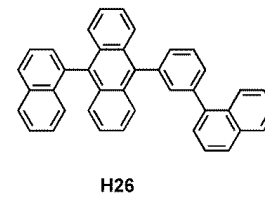
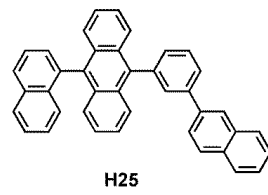
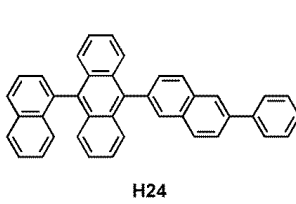
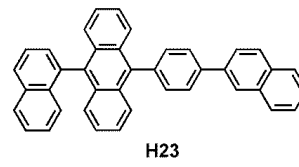
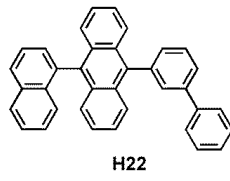
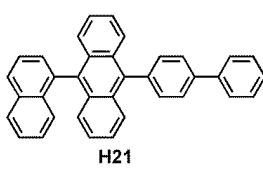
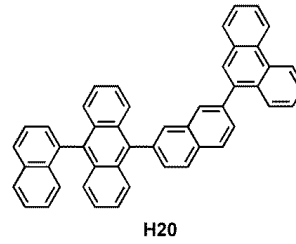
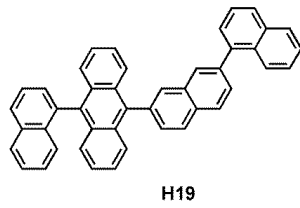
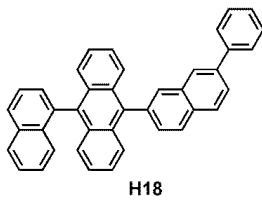
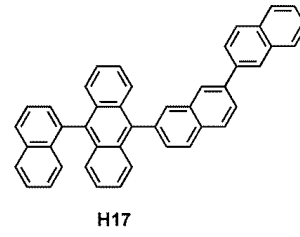
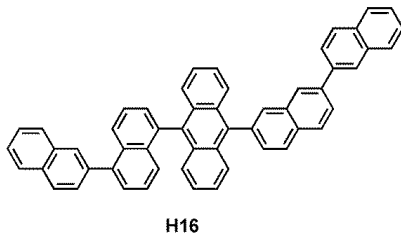
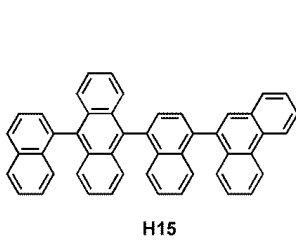
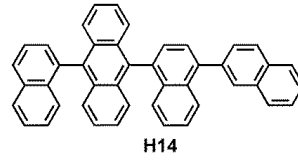
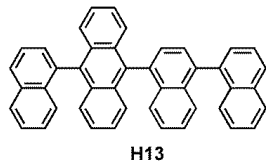
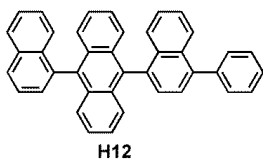
상기 화학식 302 중 Ar_{126} 및 Ar_{127} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기 또는 프로필기)일 수 있다.

상기 화학식 302 중 k 및 l 은 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 k 및 l 은 0, 1 또는 2일 수 있다.

상기 화학식 301로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 302로 표시되는 화합물은 하기 화합물 H1 내지 H42를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



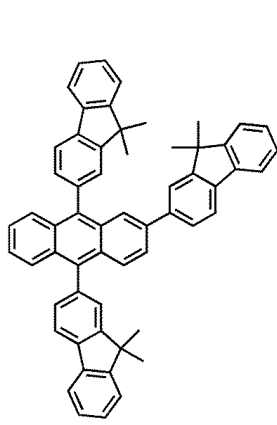
[0329]



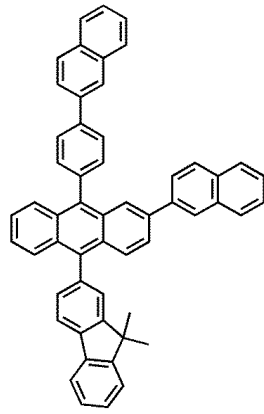
[0330]

[0331]

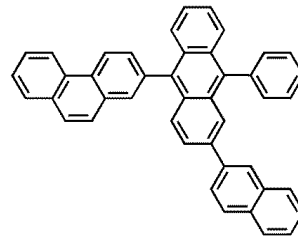
[0332]



H36

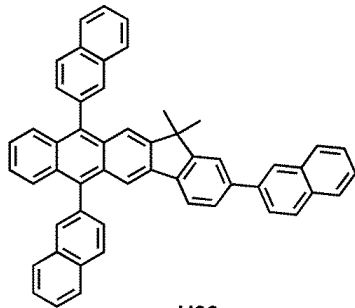


H37

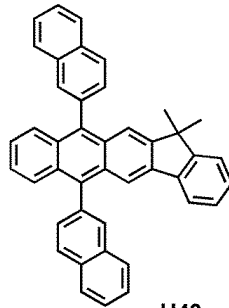


H38

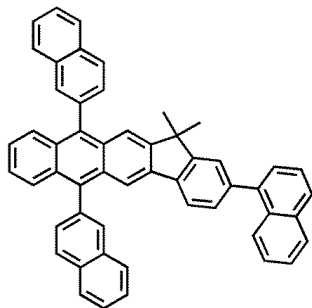
[0333]



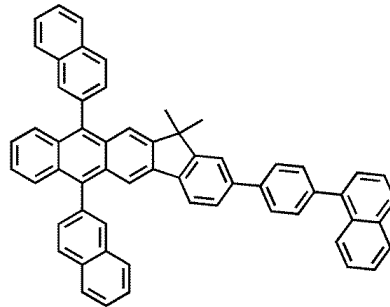
H39



H40



H41



H42

[0334]

[0335]

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

[0336]

상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0337]

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 구동전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0338]

다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.

[0339]

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

[0340]

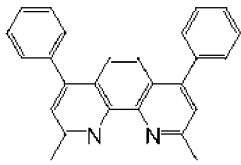
예를 들어, 전자 수송 영역은 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층 또는 전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 전자 수송층은 단일층 또는 2 이상의 서로 다른 물질을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

[0341]

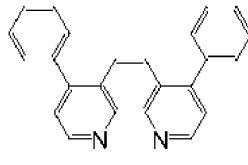
상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참

조한다.

[0342] 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP, Bphen 및 Balq 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



BCP



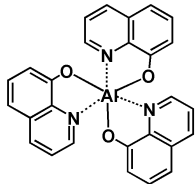
Bphen

[0343]

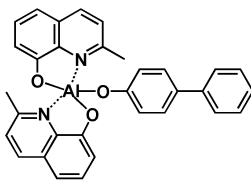
[0344] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0345]

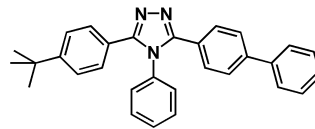
상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq₃, Balq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.



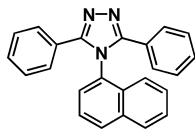
Alq₃



BAlq



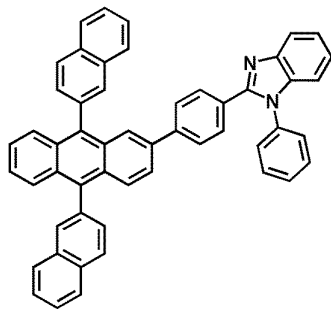
TAZ



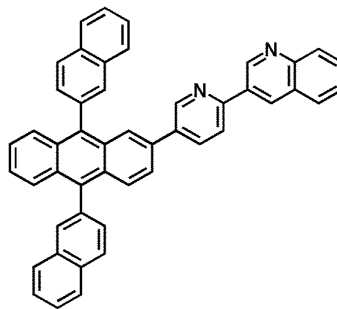
NTAZ

[0346]

[0347] 또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 및 ET2 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



ET1



ET2

[0348]

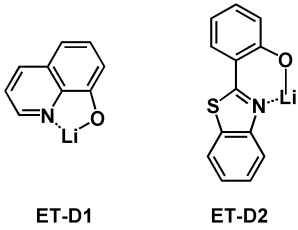
[0349] 상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0350]

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

[0351]

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.



[0352]

[0353] 또한 전자 수송 영역은, 제2전극(19)으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 전자 주입층(EIL)을 포함할 수 있다.

[0354] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li₂O 및 BaO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0355] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 예를 들면, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 적절한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0356] 상기 유기층(15) 상부로는 제2전극(19)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(19)은 캐소드일 수 있다. 상기 제2전극(19)용 물질로는 상대적으로 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 제2전극(19) 형성용 물질로 사용할 수 있다. 또는, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용하여 투과형 제2전극(19)을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0357] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0358] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

[0359] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 고발광 효율을 제공할 수 있으므로, 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물은 높은 진단 효율을 가질 수 있다.

[0360] 상기 진단용 조성물은, 각종 진단용 키트, 진단 시약, 바이오 센서, 바이오 마커 등에 다양하게 응용될 수 있다.

[0361] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 포화 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

[0362] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는 -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.

[0363] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0364] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0365] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0366] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로퓨라닐

기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0367] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0368] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-디히드로푸라닐기, 2,3-디히드로티오펜기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0369] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0370] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0371] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.

[0372] 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, 8 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예는 플루오레닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

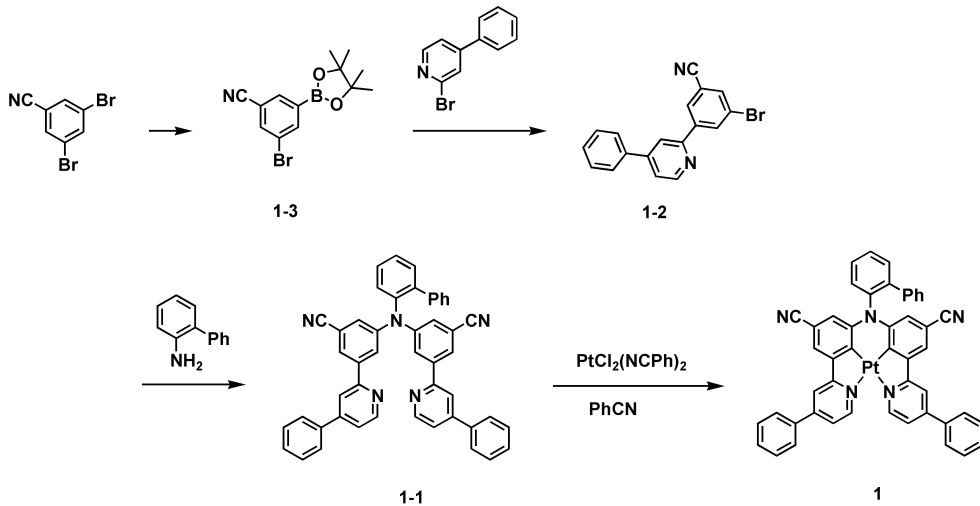
[0373] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 1 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은, 카바졸일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0374] 본 명세서 중 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 5 내지 30개의 탄소만을 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.

[0375] 본 명세서 중 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 1 내지 30개의 탄소 외에, N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 적어도 하나 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.

- [0376] 상기 치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0377] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0378] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅), -B(Q₁₆)(Q₁₇) 및 -P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0379] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0380] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅), -B(Q₂₆)(Q₂₇) 및 -P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0381] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), -B(Q₃₆)(Q₃₇) 및 -P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉);
- [0382] 중에서 선택되고,
- [0383] 상기 Q₁ 내지 Q₉, Q₁₁ 내지 Q₁₉, Q₂₁ 내지 Q₂₉ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.
- [0384] 이하, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 하기 합성에 중 'A' 대신 'B'를 사용하였다"란 표현 중 'B'의 사용량과 'A'의 사용량은 몰당량 기준으로 동일하다.
- [0385]
- [0386] [실시예]

[0387] 합성에 1: 화합물 1의 합성



[0388]

[0389] 1) 중간체 1-3의 합성

[0390] 반응기에 3,5-Dibromobenzonitrile 12.0g (46.0 mmol)을 무수 THF 200ml에 녹인 후, Bis(pinacolate)diboron 14.0g (55.2 mmol)을 첨가하였다. 여기에, $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ 1.6g (2.30 mmol), Potassium acetate 13.5g (137.9 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 85°C 이하에서 12시간 동안 가열하였다. 반응이 완료되면, 에틸아세테이트 200ml와 증류수 300ml를 가하여 추출하고, 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하여 감압 증류 시켰다. 이로부터 수득한 결과물을 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 1-3을 약 8.0g (25.8 mmol, 수율 56%) 수득하였다. 생성된 화합물은 $^1\text{H NMR}$ 로 확인하였다.

[0391] $^1\text{H NMR}(300\text{MHz}, \text{CDCl}_3)$ δ = 8.15-8.14(m, 1H), 8.02-8.01(m, 1H), 7.86-7.85(m, 1H), 1.36 (s, 12H).

[0392] 2) 중간체 1-2의 합성

[0393] 반응기에 중간체 1-3 6.9g (22.5 mmol), 2-Bromo-4-phenylpyridine 4.4g (18.7mmol)을 넣고 톨루엔 60ml, 증류수 20ml 및 에탄올 20ml을 첨가하였다. 여기에, $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 1.51g (1.31 mmol)과 Potassium carbonate 6.5g (47.0 mmol) 첨가한 다음, 상기 혼합물을 105°C에서 16시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄 120ml에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 얻어진 유기층에 물 60ml를 가하여 추출하고, 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류 시켰다. 이로부터 수득한 결과물을 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 1-2을 약 2.7g (7.8 mmol, 수율 41%) 수득하였다. LC-MS로 확인하였다.

[0394] LC-MS m/z = 335(M+H)⁺

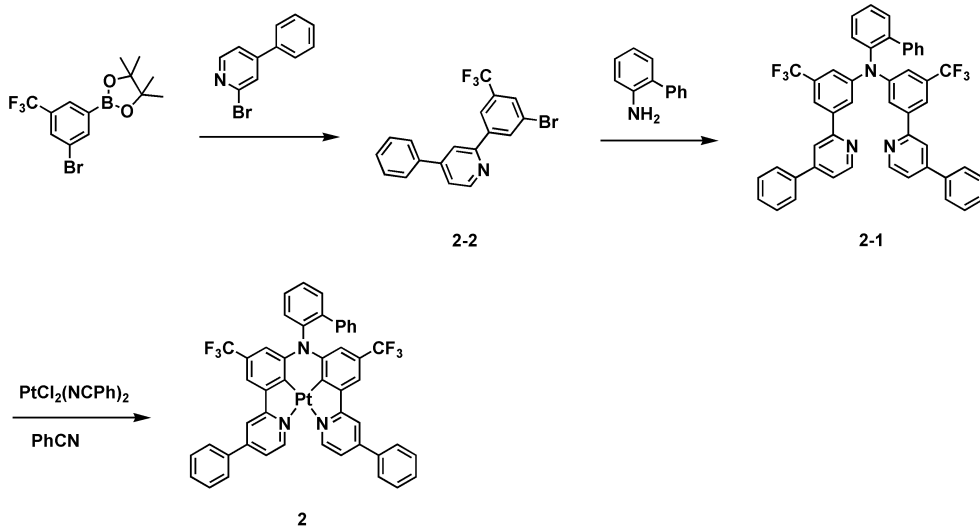
[0395] 3) 중간체 1-1의 합성

[0396] 반응기에 1-2 2.7g (8.0 mmol) 및 톨루엔 80ml를 첨가하였다. 여기에 2-Aminobiphenyl 0.64g (3.8mmol), $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.3g (1.2 mmol), tri-Butyl phosphine (50wt% in toluene) 0.5g (1.2 mmol) 및 소듐부톡사이드 1.1g (11.5 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 110°C에서 24시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄 400ml에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 얻어진 유기층을 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 중간체 1-1 1.0g (1.5 mmol, 수율 38%)을 수득하였다. LC-MS m/z = 678(M+H)⁺

[0397] 4) 화합물 1의 합성

[0398] 25°C에서, 반응기에 중간체 1-1 0.8g (1.2 mmol), o-자일렌 10ml 및 벤조니트릴 30ml를 첨가하였다. 여기에, $\text{PtCl}_2(\text{NCPh})_2$ 0.5g (1.2 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 140°C에서 10시간 동안 가열하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 액체크로마토그래피로 정제하여 화합물 3 0.3g (0.3 mmol, 수율 28%)를 수득하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS m/z = 871(M+H)⁺

[0399] 합성예 2: 화합물 2의 합성



[0400]

[0401] 1) 중간체 2-2의 합성

[0402] 중간체 1-3 대신 3-Bromo-5-(trifluoromethyl)benzeneboronic acid pinacol ester을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 2-2 (수율 60%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 378(\text{M}+\text{H})^+$

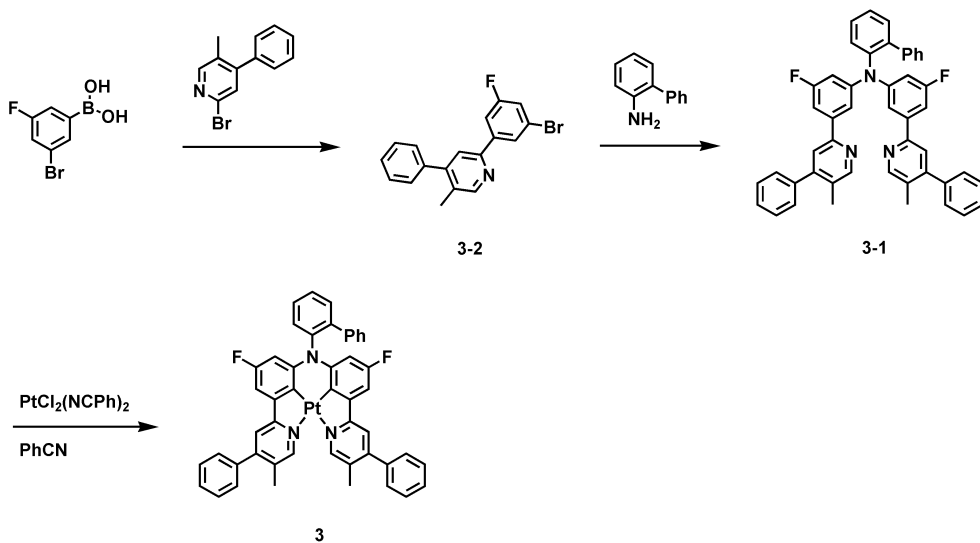
[0403] 2) 중간체 2-1의 합성

[0404] 중간체 1-2 대신 중간체 2-2를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 1-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 2-1 (수율 42%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 764(\text{M}+\text{H})^+$

[0405] 3) 화합물 2의 합성

[0406] 중간체 1-1 대신 중간체 2-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 2 (수율 35%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 957(\text{M}+\text{H})^+$

[0407] 합성예 3: 화합물 3의 합성



[0408]

[0409] 1) 중간체 3-2의 합성

[0410] 중간체 1-3 대신 3-Bromo-5-fluorobenzeneboronic acid을 사용하고, 2-Bromo-4-phenylpyridine 대신 2-Bromo-

5-methyl-4-phenylpyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 3-2 (수율 55%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 392(M+H)^+$

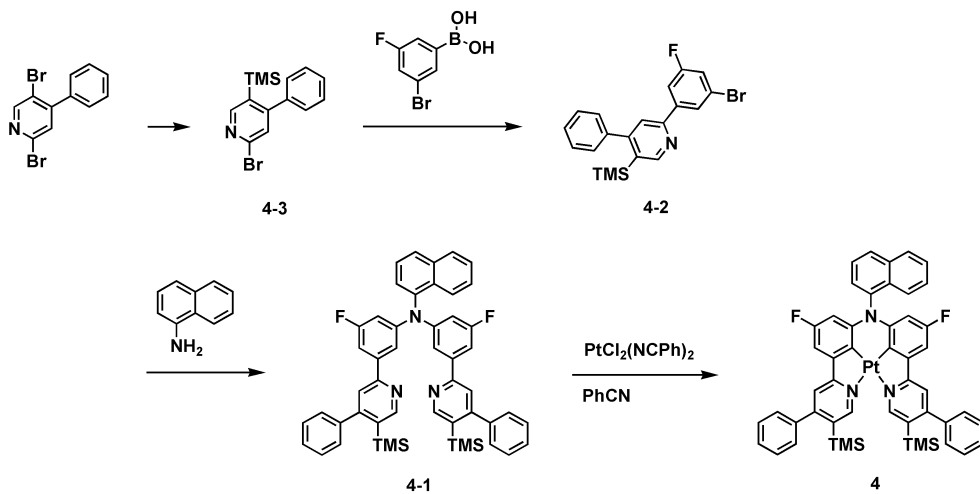
[0411] 2) 중간체 3-1의 합성

[0412] 중간체 1-2 대신 중간체 3-2를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 1-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 3-1 (수율 40%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 692(M+H)^+$

[0413] 3) 화합물 3의 합성

[0414] 중간체 1-1 대신 중간체 3-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 3 (수율 28%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 885(M+H)^+$

[0415] 합성에 4: 화합물 4의 합성



[0416] 1) 중간체 4-3의 합성

[0417] 2-Bromo-4-iodopyridine 4.0g (14.0 mmol)을 Ethanol 60ml에 녹인 후, $-78^\circ C$ 에서 1.6M n-BuLi (1.6M solution in hexane) 27.0ml를 천천히 가하여 약 2시간 동안 교반하였다. 이후, Chlorotrimethylsilane 6.1ml (49.0 mmol)를 천천히 가하여 1시간 동안 $-78^\circ C$ 에서 교반하고 실온에서 약 18시간 교반하였다. 반응이 완료되면, 에틸아세테이트 200ml와 증류수 300ml를 가하여 추출하고, 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류 시켰다. 이로부터 수득한 결과물을 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 4-3을 약 11.5g (38.1 mmol, 수율 93%) 수득하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 306(M+H)^+$

[0418] 2) 중간체 4-2의 합성

[0419] 2-Bromo-5-methyl-4-phenylpyridine 대신 중간체 4-3을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 3의 중간체 3-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 4-2 (수율 62%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 400(M+H)^+$

[0420] 3) 중간체 4-1의 합성

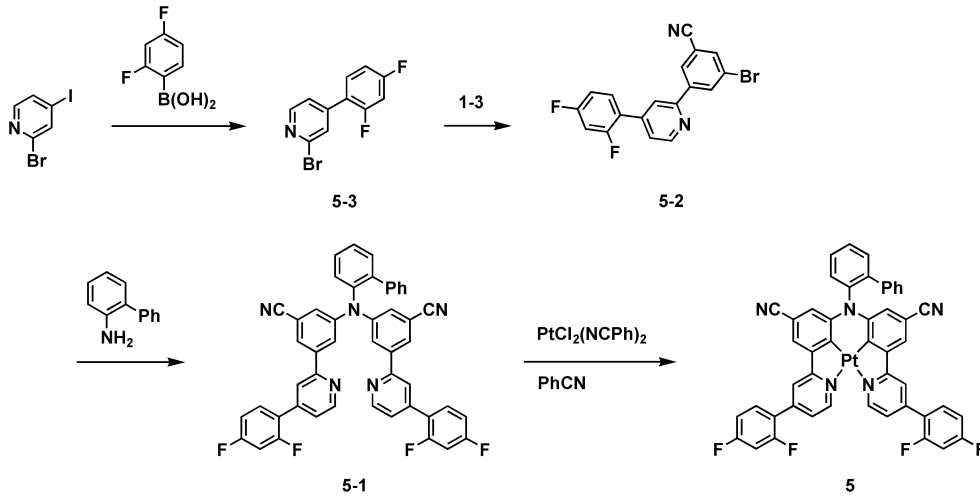
[0421] 중간체 1-2 대신 중간체 4-2를 사용하고, 2-Aminobiphenyl 대신 1-Naphthylamine hydrochloride를 사용했다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 1-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 4-1 (수율 45%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 782(M+H)^+$

[0422] 4) 화합물 4의 합성

[0423] 중간체 1-1 대신 중간체 4-1을 사용하고, 반응 온도를 $120^\circ C$ 에서 3일 동안 가열한 점을 제외하고는, 상기 합성

예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 4 (수율 7%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 975(M+H)^+$

[0425] **합성예 5: 화합물 5의 합성**



[0426]

[0427] **1) 중간체 5-3의 합성**

[0428] 반응기에 2-Bromo-4-iodopyridine 4.0g (14.0 mmol), 2,4-Difluorophenyl boronic acid 2.4g (15.5mmol)을 넣고 95% Ethanol (Ethanol 95% + water 5%) 60ml를 첨가하였다. 여기에, $Pd(PPh_3)_4$ 0.8g (0.7 mmol)과 Sodium carbonate 3.0g (28.0 mmol) 첨가한 다음, 상기 혼합물을 70°C에서 14시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄 120ml에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 얻어진 유기층을 물 60ml를 가하여 추출하고, 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류 시켰다. 이로부터 수득한 결과물을 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 5-3을 약 1.8g (6.6 mmol, 수율 47%) 수득하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 270(M+H)^+$

[0429] **2) 중간체 5-2의 합성**

[0430] 2-Bromo-4-phenylpyridine 대신 중간체 5-3을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 4-2 (수율 19%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 371(M+H)^+$

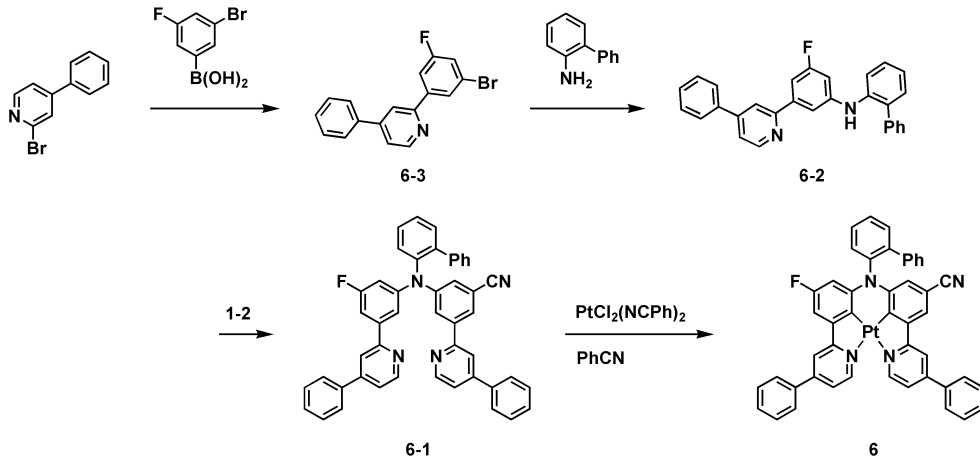
[0431] **3) 중간체 5-1의 합성**

[0432] 중간체 1-2 대신 중간체 5-2를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 1-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 5-1 (수율 25%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 750(M+H)^+$

[0433] **4) 화합물 5의 합성**

[0434] 중간체 1-1 대신 중간체 5-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 5 (수율 40%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 943(M+H)^+$

[0435] 합성예 6: 화합물 6의 합성



[0436]

[0437] 1) 중간체 6-3의 합성

[0438] 2-Bromo-5-methyl-4-phenylpyridine 대신 2-Bromo-4-phenylpyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 3의 중간체 3-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 6-3 (수율 66%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS m/z = 328(M+H)⁺

[0439] 2) 중간체 6-2의 합성

[0440] 반응기에 중간체 6-3 1.5g (4.6 mmol) 및 톨루엔 60ml를 첨가하였다. 여기에 2-Aminobiphenyl 0.85g (5.1mmol), Pd₂(dba)₃ 0.2g (0.2 mmol), tri-Butyl phosphine (50wt% in toluene) 0.25g (0.6 mmol) 및 소듐부톡사이드 1.3g (13.8 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 110℃에서 18시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 규조토에 통과시켜 여과하였다. 얻어진 유기층을 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 6-2 1.5g (3.7 mmol, 수율 80%)을 수득하였다. LC-MS m/z = 417(M+H)⁺

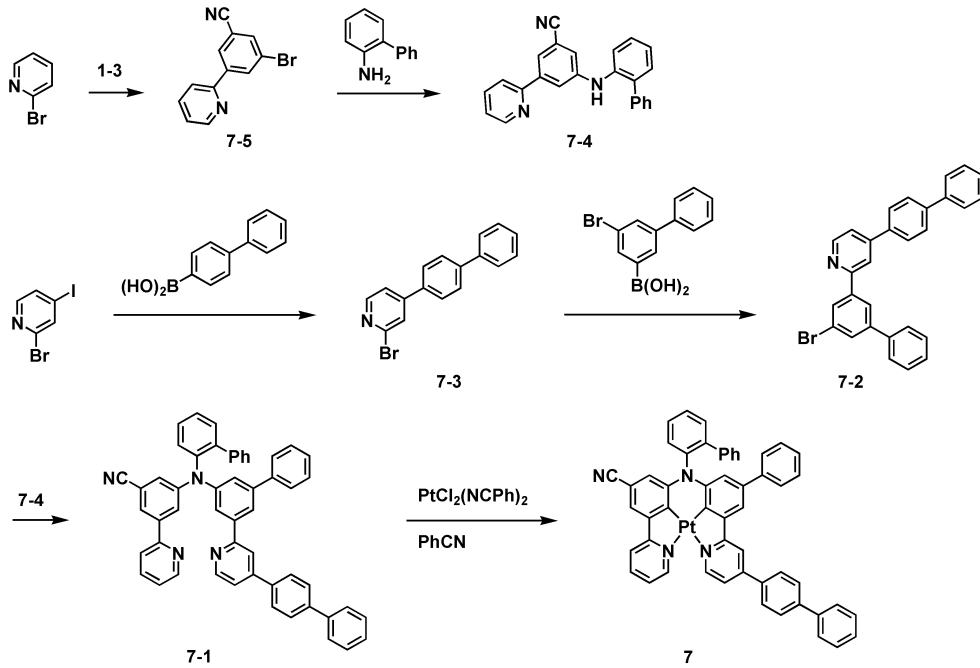
[0441] 3) 중간체 6-1의 합성

[0442] 반응기에 중간체 6-2 1.0g (2.4 mmol) 및 톨루엔 60ml를 첨가하였다. 여기에 중간체 1-2 0.84g (2.5mmol), Pd(dba)₂ 0.1g (0.17 mmol), tri-Butyl phosphine (50wt% in toluene) 0.14g (0.34 mmol) 및 소듐부톡사이드 0.7g (7.2 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 110℃에서 24시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 규조토에 통과시켜 여과하였다. 얻어진 유기층을 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 6-1 0.7g (1.0 mmol, 수율 45%)을 수득하였다. LC-MS m/z = 671(M+H)⁺

[0443] 4) 화합물 6의 합성

[0444] 중간체 1-1 대신 중간체 6-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 6 (수율 40%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS m/z = 864(M+H)⁺

[0445] 합성예 7: 화합물 7의 합성



[0446]

[0447] 1) 중간체 7-5의 합성

[0448] 2-Bromo-4-phenylpyridine 대신 2-Bromopyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 7-5 (수율 75%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 259(M+H)^+$

[0449] 2) 중간체 7-4의 합성

[0450] 중간체 6-3 대신 중간체 7-5을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 6의 중간체 6-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 7-4 (수율 70%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 348(M+H)^+$

[0451] 3) 중간체 7-3의 합성

[0452] 2,4-Difluorophenyl boronic acid 대신 4-Biphenylboronic acid을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 5의 중간체 5-3의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 7-3 (수율 83%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 310(M+H)^+$

[0453] 4) 중간체 7-2의 합성

[0454] 2-Bromo-4-phenylpyridine 대신 중간체 7-3을 사용하고 1-3 대신 (5-Bromo-[1,1'-biphenyl]-3-yl)boronic acid를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 7-2 (수율 80%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 462(M+H)^+$

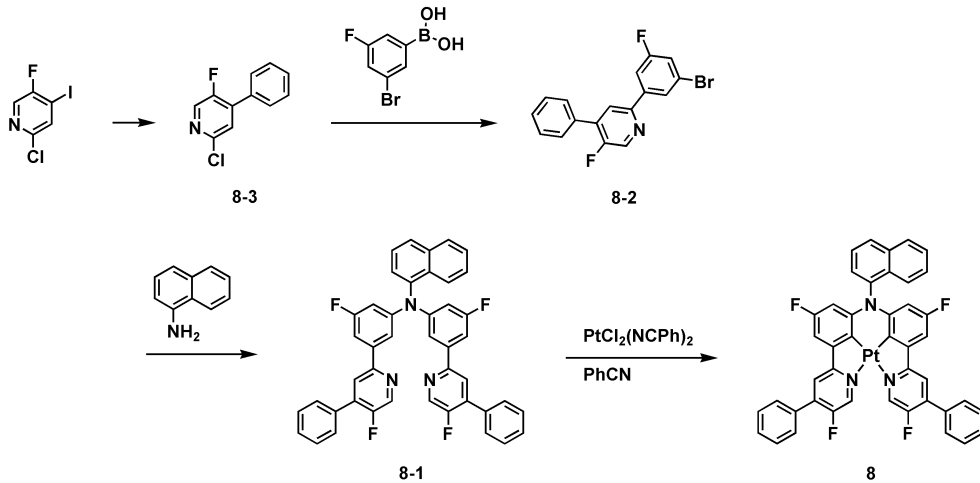
[0455] 5) 중간체 7-1의 합성

[0456] 중간체 6-2 대신 중간체 7-4를 사용하고, 중간체 1-2 대신 중간체 7-2를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 6의 중간체 6-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 7-1 (수율 68%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 729(M+H)^+$

[0457] 6) 화합물 7의 합성

[0458] 중간체 1-1 대신 중간체 7-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 7 (수율 50%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 922(M+H)^+$

[0459] 합성예 8: 화합물 8의 합성



[0460]

[0461] 1) 중간체 8-3의 합성

[0462] 2-Bromo-4-iodopyridine 대신 2-Chloro-5-fluoro-4-iodopyridine을 사용하고 2,4-Difluorophenyl boronic acid 대신 Phenyl boronic acid를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 5의 중간체 5-3의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 8-3 (수율 85%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 208(M+H)^+$

[0463] 2) 중간체 8-2의 합성

[0464] 중간체 4-3 대신 중간체 8-3을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 4의 중간체 4-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 8-2 (수율 50%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 346(M+H)^+$

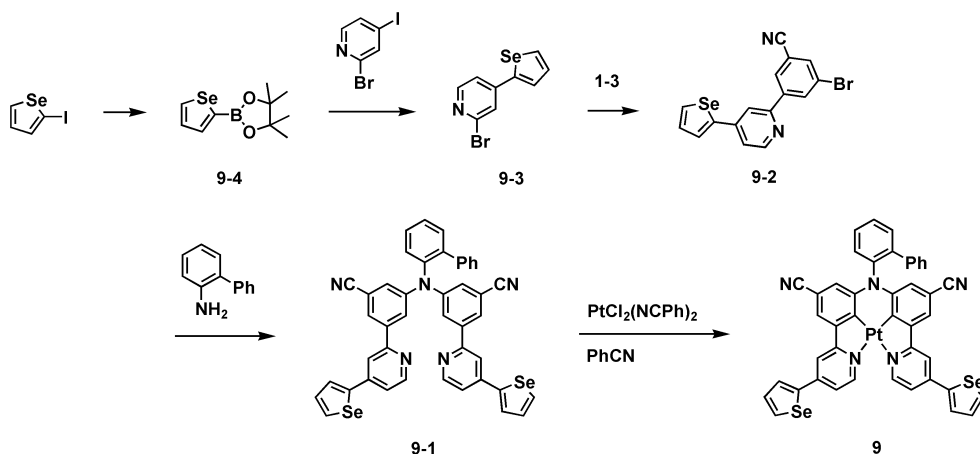
[0465] 3) 중간체 8-1의 합성

[0466] 중간체 1-2 대신 중간체 8-2를 사용하고, 2-Aminobiphenyl 대신 1-Naphthylamine hydrochloride를 사용했다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 1-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 8-1 (수율 38%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 674(M+H)^+$

[0467] 4) 화합물 8의 합성

[0468] 중간체 1-1 대신 중간체 8-1을 사용하여 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 8 (수율 12%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS $m/z = 867(M+H)^+$

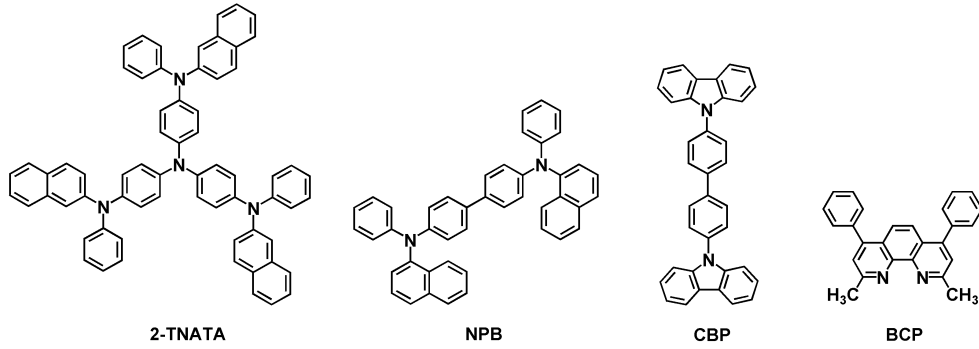
[0469] 합성예 9: 화합물 9의 합성



[0470]

[0471] 1) 중간체 9-4의 합성

- [0472] 2-Iodoselenophene 11g (42.2 mmol)을 Diethyl ether 200ml에 녹인 후, -78℃에서 n-BuLi (1.6M solution in hexane) 27.0ml를 천천히 가하여 약 2시간 동안 교반하였다. 이후, 2-Isopropoxy-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 10.0ml (50.6 mmol)를 천천히 가하여 1시간 동안 -78℃에서 교반하고, 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면, 에틸아세테이트 200ml와 증류수 300ml를 가하여 추출하고, 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류 시켰다. 이로부터 수득한 결과물을 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 9-4을 약 9.2g (35.9 mmol, 수율 85%) 수득하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS m/z = 259(M+H)⁺
- [0473] 2) 중간체 9-3의 합성
- [0474] 2,4-Difluorophenyl boronic acid 대신 중간체 9-4를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 5의 중간체 5-3의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 9-3 (수율 22%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS m/z = 287(M+H)⁺
- [0475] 3) 중간체 9-2의 합성
- [0476] 2-Bromo-4-phenylpyridine 대신 중간체 9-3을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 9-2 (수율 40%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS m/z = 389(M+H)⁺
- [0477] 4) 중간체 9-1의 합성
- [0478] 중간체 1-2 대신 중간체 9-2를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 1-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 9-1 (수율 20%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS m/z = 786(M+H)⁺
- [0479] 5) 화합물 9의 합성
- [0480] 중간체 1-1 대신 중간체 9-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 9 (수율 13%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다. LC-MS m/z = 979(M+H)⁺
- [0481] **실시예 1**
- [0482] 애노드로서 ITO/Ag/ITO가 70/1000/70Å 두께로 증착된 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 이소프로필알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고, 오존에 노출시켜 세정하였다.
- [0483] 이어서, 상기 기판 상부에 2-TNATA를 600Å 두께로 진공 증착하여 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 상에 4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하, NPB)을 1350Å의 두께로 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다.
- [0484] 상기 정공 수송층 상에 화합물 1(도펀트) 및 CBP(호스트)를 95:5의 중량비로 동시 증착하여 400Å의 두께의 발광층을 형성하였다.
- [0485] 상기 발광층 상에 이어서 BCP를 50Å의 두께로 진공 증착하여 정공 저지층을 형성한 다음, 상기 정공 저지층 상에 Alq₃를 350Å의 두께로 증착하여 전자 수송층을 형성하고, 이어서 상기 전자 수송층 상에 LiF를 10Å의 두께로 증착하여 전자 주입층을 형성한 후, MgAg를 90:10의 중량비로 진공 증착하여 120Å 두께의 전극을 형성함으로써, 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0486]

[0487]

실시예 2 내지 5 및 비교예 A 내지 D

[0488]

발광층 형성시 도펀트로서 화합물 1 대신 표 2에 기재된 화합물을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0489]

평가예 1: 유기 발광 소자의 특성 평가

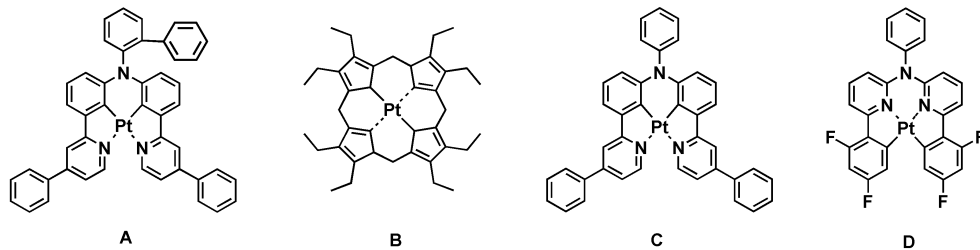
[0490]

상기 실시예 1 내지 5와 비교예 A 내지 D에서 제조된 각각의 유기 발광 소자에 대하여 구동전압, 전류 밀도, 휘도, 발광 효율, 발광색, 반치폭, 색좌표 및 수명을 평가하여, 그 결과를 표 2에 나타내었다. 평가 장치로서 전류-전압계(Keithley 2400) 및 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 사용하였다.

표 2

[0491]

	도펀트	구동 전압 (V)	전류 밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	발광색	반치폭 (nm)	색좌표	LT ₉₇ (hr)
실시예 1	화합물 1	4.8	10	3,030	30.3	적색	43	0.66, 0.34	1500
실시예 2	화합물 2	4.7	10	3,210	32.1	적색	52	0.64, 0.33	1000
실시예 3	화합물 4	4.7	10	3,350	33.5	적색	46	0.62, 0.32	1700
실시예 4	화합물 5	4.8	10	2,990	29.9	적색	42	0.68, 0.34	1300
실시예 5	화합물 7	4.7	10	2,830	28.3	적색	55	0.69, 0.32	1000
비교예 A	화합물 A	5.8	10	2,237	22.3	적색	76	0.65, 0.31	500
비교예 B	화합물 B	7.3	10	2,212	22.1	적색	85	0.67, 0.32	65
비교예 C	화합물 C	5.8	10	2,200	22.0	적색	78	0.66, 0.32	350
비교예 D	화합물 D	5.7	10	1,605	16.0	청색	80	0.20, 0.28	1



[0492]

[0493]

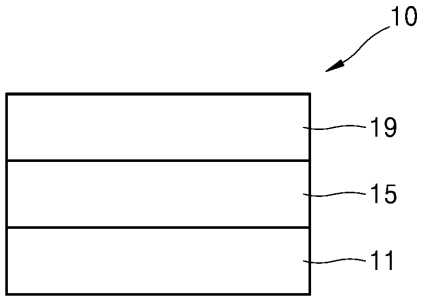
상기 표 2로부터, 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자는 비교예 A 내지 D의 유기 발광 소자에 비하여 저구동전압, 고투도, 고효율, 고색순도, 및 장수명을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

- [0494] 10: 유기 발광 소자
- 11: 제1전극
- 15: 유기층
- 19: 제2전극

도면

도면1



专利名称(译)	有机金属化合物，包括其的有机发光器件，以及包括其的诊断组合物		
公开(公告)号	KR1020180097372A	公开(公告)日	2018-08-31
申请号	KR1020170024279	申请日	2017-02-23
[标]申请(专利权)人(译)	三星电子株式会社		
申请(专利权)人(译)	三星电子有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星电子有限公司		
[标]发明人	CHOI JONG WON 최종원 LEE KUM HEE 이금희 LEE BANG LIN 이방린 KWAK YOON HYUN 광윤현 KWON O HYUN 권오현 ARATANI SUKEKAZU 아라타니스케카즈 CHOI BYOUNG KI 최병기		
发明人	최종원 이금희 이방린 광윤현 권오현 아라타니스케카즈 최병기		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0087 H01L51/5024 C09K2211/185 C07F15/0086 C09K2211/1029 H01L51/5016 H01L2251/552		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

该摘要目前正在准备中。更新的KPA将在2018年11月10日之后提供。*
 本标题 (54) 和代表图显示为申请人提交的。

