

# (19) 대한민국특허청(KR)

(12) 공개특허공보(A)

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

**CO7D** 487/04 (2006.01) **CO9K** 11/06 (2006.01) **HO1L** 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류 *CO7D 487/04* (2013.01) *CO9K 11/06* (2013.01)

(21) 출원번호

10-2015-0129782

(22) 출원일자

2015년09월14일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

(11) 공개번호

삼성디스플레이 주식회사

(43) 공개일자 2017년03월23일

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

10-2017-0032532

경상대학교산학협력단

경상남도 진주시 진주대로 501 (가좌동)

(72) 발명자

김미경

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1(농서동)

김유희

경상남도 진주시 진주대로 501, 화학과 (가좌동) (뒷면에 계속)

(74) 대리인

리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요 약

축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대 표 도 - 도1

10

190 150 110 (52) CPC특허분류

*H01L* 51/50 (2013.01) *C09K* 2211/1011 (2013.01) *C09K* 2211/1029 (2013.01)

(72) 발명자

## 권순기

경상남도 진주시 진주대로 501, 나노신소재공학부 (가좌동)

# 김희연

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1(농서동)

## 박윤지

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1(농서동)

# 정혜인

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1(농서동)

# 황재영

경상남도 진주시 진주대로 501,그린에너지융합연구 소 (가좌동)

## 명세서

## 청구범위

### 청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물:

#### <화학식 1>

$$\begin{bmatrix} (Ar_1)_{b1} \\ (L_1)_{a1} \\ \\ (R_1)_{c1} \\ \\ (L_2)_{a2} \\ \\ (Ar_2)_{b2} \end{bmatrix}_{n2}$$

상기 화학식 1 중,

 $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 서로 독립적으로 고리 구성 원자로서 헤테로원자를 포함하지 않는  $C_6$ - $C_{20}$ 방향족 고리이되,  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리가 동시에 벤젠인 경우는 제외되고,

 $L_1$  내지  $L_4$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 혜테로시클로알켈렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 혜테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_1$ - $C_1$ - $C_2$ - $C_3$ - $C_3$ - $C_3$ - $C_4$ - $C_5$ -

al 내지 a4는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, a1이 2 이상일 경우 2 이상의  $L_1$ 은 서로 동일하거나 상이하고, a2가 2 이상일 경우 2 이상의  $L_2$ 는 서로 동일하거나 상이하고, a3가 2 이상일 경우 2 이상의  $L_3$ 는 서로 동일하거나 상이하고, a4가 2 이상일 경우 2 이상의  $L_4$ 는 서로 동일하거나 상이하고,

Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아 미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또 는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알 키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다 환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q1)(Q2)(Q3), -N(Q4)(Q5) 및 -B(Q6)(Q7) 중에서 선택되고,

b1 및 b2는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b1이 2 이상일 경우, 2 이상의 b1은 서로 동일

하거나 상이할 수 있고, b2가 2 이상일 경우, 2 이상의 b2는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,

c1 및 c2는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

n1 및 n2는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기 및  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기;

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미다노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시 클로알킬기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴옥시기(aryloxy),  $C_6$ - $C_6$ 아릴티오기(arylthio),  $C_1$ - $C_6$ 에테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -Si( $Q_{11}$ )( $Q_{12}$ )( $Q_{13}$ ), -N( $Q_{14}$ )( $Q_{15}$ ) 및 -B( $Q_{16}$ )( $Q_{17}$ ) 중 적어도 하나로 치환된,  $C_1$ - $C_6$ 0알킬기,  $C_2$ - $C_6$ 0알케닐기,  $C_2$ - $C_6$ 0알키닐기 및  $C_1$ - $C_6$ 0알콕시기;

 $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 혜테로시클로알킬기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 혜테로시클로알케닐기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴티오기,  $C_1$ - $C_{60}$ 해테로아릴기,  $C_1$ - $C_{60}$ 해테로아릴기,  $C_1$ - $C_2$ - $C_3$ - $C_3$ - $C_4$ - $C_5$ 

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>) 및 -B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

-Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>) 및 -B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>); 중에서 선택되고;

상기  $Q_1$  내지  $Q_7$ ,  $Q_{11}$  내지  $Q_{17}$ ,  $Q_{21}$  내지  $Q_{27}$  및  $Q_{31}$  내지  $Q_{37}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기,  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알킬기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

#### 청구항 2

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 서로 독립적으로 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 크라이센 및 파이렌 중에서 선택된, 축합환 화합물.

### 청구항 3

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 서로 독립적으로 벤젠, 나프탈렌 및 페난트렌 중에서 선택된, 축합환 화합물.

## 청구항 4

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 서로 동일한, 축합환 화합물.

#### 청구항 5

제1항에 있어서.

상기 화학식 1 중  $L_1$  내지  $L_4$ 는 서로 독립적으로,

페닐렌기(phenylene), 펜탈레닐렌기(pentalenylene), 인데닐렌기(indenylene), 나프틸렌기(naphthylene), 아줄 레닐렌기(azulenylene), 헵탈레닐렌기(heptalenylene), 인다세닐렌기(indacenylene), (acenaphthylene), 플루오레닐렌기(fluorenylene), 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루 페날레닐렌기(phenalenylene), 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), (anthracenylene), 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 파이레닐렌기 (pyrenylene), 크라이세닐렌기(chrysenylene), 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 피세닐렌기(picenylene), 페 펜타페닐렌기(pentaphenylene), 헥사세닐렌기(hexacenylene), 릴레닐렌기(perylenylene), 펜타세닐렌기 (pentacenylene), 루비세닐렌기(rubicenylene), 코로네닐기렌기(coronenylene), 오발레닐기렌기(ovalenylene), 피롤일렌기(pyrrolylene), 티오페닐렌기(thiophenylene), 퓨라닐렌기(furanylene), 이미다졸일렌기 (imidazolylene), 피라졸일렌기(pyrazolylene), 티아졸일렌기(thiazolylene), 이소티아졸일렌기 옥사졸일렌기(oxazolylene), 이속사졸일렌기(isooxazolylene), 피리디닐렌기 (isothiazolylene), 피리다지닐렌기 피라지닐렌기(pyrazinylene), 피리미디닐렌기(pyrimidinylene), (pyridinylene), (pyridazinylene), 이소인돌일렌기(isoindolylene), 인돌일렌기(indolylene), 인다졸일렌기(indazolylene), 푸 리닐렌기(purinylene), 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 이소퀴놀리닐렌기(isoquinolinylene), 벤조퀴놀리닐렌기 (benzoquinolinylene), 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 나프티리디닐렌기(naphthyridinylene), 퀴녹살리닐 렌기(quinoxalinylene), 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylene), 시놀리닐렌기(cinnolinylene), 카바졸일렌기 (carbazolylene), 페난트리디닐렌기(phenanthridinylene), 아크리디닐렌기(acridinylene), 페난트롤리닐렌기 (phenanthrolinylene), 페나지닐렌기(phenazinylene), 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 벤조퓨라닐렌 기(benzofuranylene), 벤조티오페닐렌기(benzothiophenylene), 이소벤조티아졸일렌기(isobenzothiazolylene), 벤조옥사졸일렌기(benzooxazolylene), 이소벤조옥사졸일렌기(isobenzooxazolylene), 트리아졸일렌기 테트라졸일렌기(tetrazolylene), 옥사디아졸일렌기(oxadiazolylene), 트리아지닐렌기 (triazinylene), 디벤조퓨라닐렌기(dibenzofuranylene), 디벤조티오페닐렌기(dibenzothiophenylene), 벤조카바 졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기 및 이미다조피리미디닐렌기; 및

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미다노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로펜틸기, 시클로펜테닐기, 시클로펜테닐기, 제탈리 빌기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페탈레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐기레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 페세닐기, 페릴기레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 르라에네닐기, 고로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 파라드닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 익사졸일기, 이소시졸일기, 이소인돌일기, 인도일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤

조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리 디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤 조터아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐 기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐 기 및 이미다조피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄 레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루 오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페 닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세 닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 피롤일렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 이 미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 이소인돌일렌기, 인돌일렌기, 인다졸일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀 리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리 닐렌기, 시놀리닐렌기, 카바졸일렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤 조이미다졸일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사 졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 트리아지닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오 페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기 및 이미다조피리미 디닐렌기; 중에서 선택된, 축합환 화합물.

### 청구항 6

제1항에 있어서.

상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>는 서로 독립적으로,

하기 화학식 3-1 내지 화학식 3-33으로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 축합환 화합물:

상기 화학식 3-1 내지 3-33 중,

 $Y_1$ 은 0, S,  $C(Z_3)(Z_4)$ ,  $N(Z_5)$  및  $Si(Z_6)(Z_7)$  중에서 선택되고;

 $Z_1$  내지  $Z_7$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소,  $F_1$ ,  $F_2$ ,  $F_3$ ,  $F_4$ ,  $F_4$ ,  $F_5$ ,  $F_5$ ,  $F_6$ ,  $F_7$ ,  $F_8$ ,

d1은 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, d2는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, d3는 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, d4는 1 내지 8의 정수 중에서 선택되고, d5는 1 또는 2이고, d6는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

\* 및 \*'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

# 청구항 7

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중  $L_1$  내지  $L_4$ 는 서로 독립적으로,

하기 화학식 4-1 내지 화학식 4-28로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 축합환 화합물:

상기 화학식 4-1 및 4-28 중 \* 및 \*'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

# 청구항 8

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 a1 내지 a4는 서로 독립적으로 0 또는 1인, 축합환 화합물.

### 청구항 9

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,

페닐기(phenyl), 비페닐기(biphenyl), 터페닐기(terphenyl), 펜탈레닐기(pentalenyl), 인데닐기(indenyl), 나 프틸기(naphthyl), 아줄레닐기(azulenyl), 헵탈레닐기(heptalenyl), 인다세닐기(indacenyl), 아세나프틸기 (acenaphthyl), 플루오레닐기(fluorenyl), 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페 날레닐기(phenalenyl), 페난트레닐기(phenanthrenyl), 안트라세닐기(anthracenyl), (fluoranthenyl), 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 파이레닐기(pyrenyl), 크라이세닐기(chrysenyl), 나프타세 닐기(naphthacenyl), 피세닐기(picenyl), 페릴레닐기(perylenyl), 펜타페닐기(pentaphenyl), 헥사세닐기 펜타세닐기(pentacenyl), 루비세닐기(rubicenyl), 코로네닐기(coronenyl), (ovalenyl), 피롤일기(pyrrolyl), 티오페닐기(thiophenyl), 퓨라닐기(furanyl), 이미다졸일기(imidazolyl), 피 라졸일기(pyrazolyl), 티아졸일기(thiazolyl), 이소티아졸일기(isothiazolyl), 옥사졸일기(oxazolyl), 이속사 졸일기(isooxazolyl), 피리디닐기(pyridinyl), 피라지닐기(pyrazinyl), 피리미디닐기(pyrimidinyl), 피리다지 딜기(pyridazinyl), 이소인돌일기(isoindolyl), 인돌일기(indolyl), 인다졸일기(indazolyl), 푸리닐기 (purinyl), 퀴놀리닐기(quinolinyl), 이소퀴놀리닐기(isoquinolinyl), 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 프탈 라지닐기(phthalazinyl), 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐기(quinoxalinyl), (quinazolinyl), 시놀리닐기(cinnolinyl), 카바졸일기(carbazolyl), 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 아크리 디딜기(acridinyl), 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 페나지닐기(phenazinyl), 벤조이미다졸일기 벤조퓨라닐기(benzofuranyl), 벤조티오페닐기(benzothiophenyl), (benzoimidazolyl), 이소벤조티아졸일기 (isobenzothiazolyl), 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 이소벤조옥사졸일기(isobenzooxazolyl), 트리아졸일기 (triazolyl), 테트라졸일기(tetrazolyl), 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 트리아지닐기(triazinyl), 디벤조퓨라 닐기(dibenzofuranyl), 디벤조티오페닐기(dibenzothiophenyl), 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 디벤조실롤일 기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클 로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레 닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루 오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜 타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리 디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라 닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피 리미디닐기 및 -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐 기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페 닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐 기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸 일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소 인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프 티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리 닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오기페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오 페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조 피리미디닐기; 중에서 선택되고,

상기  $Q_{31}$  내지  $Q_{32}$ 은 서로 독립적으로,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 다프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 지라졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조류라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조디아졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 드리아졸일기, 드리아지닐기, 디벤조류라닐기, 디벤조디오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택된, 축합환 화합물.

### 청구항 10

제1항에 있어서.

상기 화학식 1 중  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 서로 독립적으로,

페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 미라지닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조리밀기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐 기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레 닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐 기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐 기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조 옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조 피리미디닐기 및 -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레 닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐 레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기. 피라지닐기. 피리미디닐기. 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이 미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디 아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 중 에서 선택되고,

상기  $Q_{31}$  내지  $Q_{33}$ 은 서로 독립적으로,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된, 축합환 화합물.

#### 청구항 11

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라 존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기;

페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루 오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티 오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피라지닐기, 피라지닐기, 제놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 케녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐 기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레 닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페 닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐 기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴 나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일 기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐 기, 이미다조피리미디닐기 및  $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$  중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸 기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐 기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이 미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디 아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및 -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>2</sub>); 중에서 선택되고.

상기  $Q_1$  내지  $Q_3$  및  $Q_{31}$  내지  $Q_{33}$ 은 서로 독립적으로,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된, 축합환 화합물.

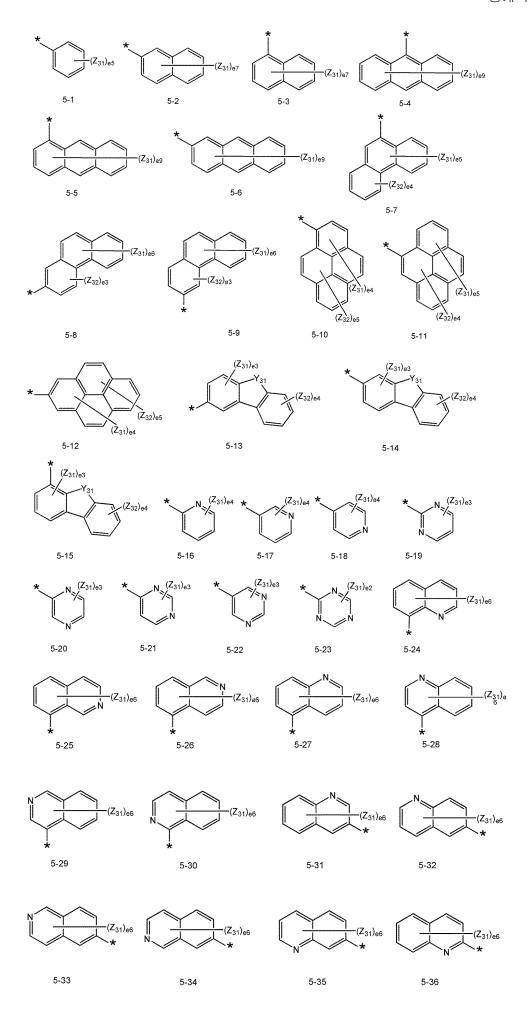
# 청구항 12

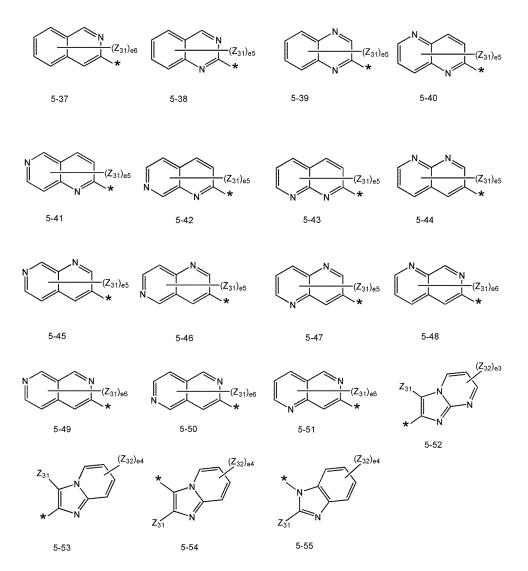
제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 서로 독립적으로, 하기 화학식 5-1 내지 화학식 5-55로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

 $R_1$  및  $R_2$ 는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라 존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_2$ 0알콕시기 및 하기 화학식 5-1 내지 5-55로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 축합환 화합물:





상기 화학식 5-1 내지 화학식 5-55 중,

Y<sub>31</sub>은 O, S, C(Z<sub>33</sub>)(Z<sub>34</sub>), N(Z<sub>35</sub>) 및 Si(Z<sub>36</sub>)(Z<sub>37</sub>) 중에서 선택되고;

 $Z_{31}$  내지  $Z_{37}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, F, CI, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,

e2는 1 또는 2이고, e3는 1 내지 3의 정수이고, e4는 1 내지 4의 정수이고, e5는 1 내지 5의 정수이고, e6은 1 내지 6의 정수이고, e7은 1 내지 7의 정수이고, e9은 1 내지 9의 정수이고, \*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

# 청구항 13

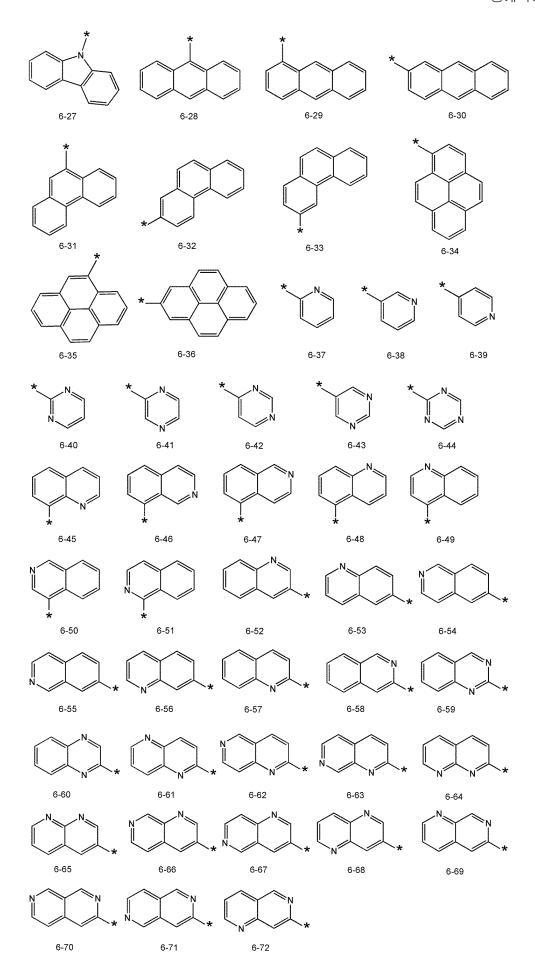
제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 Ar1 및 Ar2는 서로 독립적으로,

하기 화학식 6-1 내지 화학식 6-76으로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라 존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_2$ 0알콕시기 및 하기 화학식 6-1 내지 6-76으로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 축합환 화합물:



상기 화학식 6-1 내지 화학식 6-76 중, \*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

# 청구항 14

제1항에 있어서,

하기 화학식 1A 내지 1L 중 하나로 표시되는, 축합환 화합물:

<화학식 1A> <화학식 1B>

$$\begin{array}{c} (Ar_1)_{b1} \\ (Ar_1)_{b1} \\ (L_1)_{a1} \\ R_{2a} \\ R_{1b} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\$$

<화학식 1C> <화학식 1D>

$$\begin{array}{c} (Ar_1)_{b1} \\ (L_1)_{a1} \\ R_{1a} \\ R_{1b} \\ R_{1c} \\ R_{1c} \\ R_{1c} \\ R_{1c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{2c} \\ R_{2c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{1c} \\ R_{2c} \\ R_{2c$$

<화학식 1E> <화학식 1F>

$$\begin{array}{c} (Ar_1)_{b1} \\ (Ar_1)_{b1} \\ (L_1)_{a1} \\ R_{1a} \\ R_{1b} \\ R_{1c} \\$$

<화학식 1G> <화학식 1H>

<화학식 1I> <화학식 1J>

<화학식 1K> <화학식 1L>

$$\begin{array}{c} (Ar_1)_{b1} \\ (Ar_1)_{b1} \\ R_{1b} \\ R_{1a} \\ (L_1)_{a1} \\ R_{2a} \\ R_{2c} \\ R_{1d} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{2e} \\ R_{2e} \\ R_{2e} \\ R_{2e} \\ R_{2e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{2e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{1e} \\ R_{2e} \\ R_{1e} \\ R_{2e} \\$$

상기 화학식 1A 내지 1L 중  $L_1$ ,  $L_2$ , a1, a2,  $Ar_1$ ,  $Ar_2$ , b1 및 b2는 제1항에 기재된 바와 동일하고,  $R_{1a}$  내지  $R_{1h}$ 는 제1항에 기재된  $R_1$ 에 대한 설명을 참조하고,  $R_{2a}$  내지  $R_{2h}$ 는 제1항에 기재된  $R_2$ 에 대한 설명을 참조한다.

## 청구항 15

제14항에 있어서,

상기 화학식 1A 내지 1L 중,

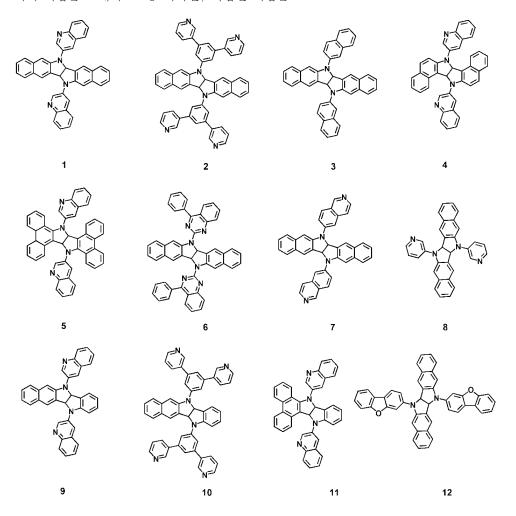
a1 및 a2는 서로 독립적으로 0 또는 1이고,

b1 및 b2는 1인, 축합환 화합물.

# 청구항 16

제1항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 12 중 하나인, 축합환 화합물:



## 청구항 17

제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제1항 내지 제16항 중 어느 한 항의 축합환 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

## 청구항 18

제17항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

상기 유기층이, i) 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되며, 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함한 정공 수송 영역 및 ii) 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되며, 정공 저 지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한 전자 수송 영역을 포함한, 유기 발광 소자.

# 청구항 19

제17항에 있어서,

상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자.

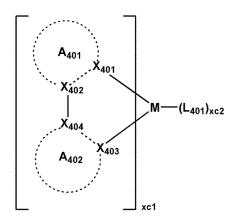
# 청구항 20

제19항에 있어서,

상기 발광층은 인광 도펀트를 더 포함하고, 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를

포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 401>



상기 화학식 401 중,

M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 톨륨(TM) 중에서 선택되고,

 $X_{401}$  내지  $X_{404}$ 는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

A<sub>401</sub> 및 A<sub>402</sub> 고리는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 벤젠, 치환 또는 비치환된 나프탈렌, 치환 또는 비치 환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오렌, 치환 또는 비치환된 인덴, 치환 또는 비치환된 피롤, 치환 또는 비치환된 티오펜, 치환 또는 비치환된 퓨란(furan), 치환 또는 비치환된 이미다졸, 치환 또는 비치환된 된 피라졸, 치환 또는 비치환된 티아졸, 치환 또는 비치환된 이소티아졸, 치환 또는 비치환된 옥사졸, 치환 또는 비치환된 이속사졸(isooxazole), 치환 또는 비치환된 피리딘, 치환 또는 비치환된 피라진, 치환 또는 비치환된 피리딘, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린, 치환 또는 비치환된 비즈퀴놀린, 치환 또는 비치환된 베즈퀴놀린, 치환 또는 비치환된 한국 발문 비치환된 벤조리는, 치환 또는 비치환된 한국 발문 비치환된 벤조리는, 치환 또는 비치환된 벤조리는데, 치환 또는 비치환된 벤조리는데, 치환 또는 비치환된 벤조리는데, 치환 또는 비치환된 벤조라는데, 치환 또는 비치환된 벤조라는데, 치환 또는 비치환된 벤조라는데, 치환 또는 비치환된 인소벤조 옥사졸, 치환 또는 비치환된 트리아졸, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸, 치환 또는 비치환된 트리아진, 치환 또는 비치환된 디벤조류란(dibenzofuran), 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 중에서 선택되고,

상기 치환된 벤젠, 치환된 나프탈렌, 치환된 플루오렌, 치환된 스파이로-플루오렌, 치환된 인덴, 치환된 피롤, 치환된 티오펜, 치환된 퓨란, 치환된 이미다졸, 치환된 피라졸, 치환된 티아졸, 치환된 이소티아졸, 치환된 옥 사졸, 치환된 이속사졸, 치환된 피리딘, 치환된 피라진, 치환된 피리미딘, 치환된 피리다진, 치환된 퀴놀린, 치환된 이소퀴놀린, 치환된 벤조퀴놀린, 치환된 퀴녹살린, 치환된 퀴나졸린, 치환된 카바졸, 치환된 벤조이미다졸, 치환된 벤조퓨란, 치환된 벤조티오펜, 치환된 이소벤조티오펜, 치환된 벤조옥사졸, 치환된 이소 벤조옥사졸, 치환된 트리아졸, 치환된 옥사디아졸, 치환된 트리아진, 치환된 디벤조퓨란 및 치환된 디벤조티오 펜의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기 및  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기(aryloxy), C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기(arylthio), C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group), 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -N(Q<sub>401</sub>)(Q<sub>402</sub>), -Si(Q<sub>403</sub>)(Q<sub>404</sub>)(Q<sub>405</sub>) 및 -B(Q<sub>406</sub>)(Q<sub>407</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, Q<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알퀴닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

 $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 혜테로시클로알킬기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 혜테로시클로알케닐기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴목시기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴티오기,  $C_1$ - $C_{60}$ 혜테로아릴기,  $C_1$ - $C_{60}$ 해테로아릴기,  $C_1$ - $C_2$ - $C_3$ - $C_3$ - $C_4$ - $C_5$ -

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알켈기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -N(Q<sub>411</sub>)(Q<sub>412</sub>), -Si(Q<sub>413</sub>)(Q<sub>414</sub>)(Q<sub>415</sub>) 및 -B(Q<sub>416</sub>)(Q<sub>417</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알켈기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알켈기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴의기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴의기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴의기, C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및

-N(Q<sub>421</sub>)(Q<sub>422</sub>), -Si(Q<sub>423</sub>)(Q<sub>424</sub>)(Q<sub>425</sub>) 및 -B(Q<sub>426</sub>)(Q<sub>427</sub>); 중에서 선택되고,

L<sub>401</sub>은 유기 리간드이고,

xc1은 1, 2 또는 3이고,

xc2는 0, 1, 2 또는 3이고,

상기 Q<sub>401</sub> 내지 Q<sub>407</sub>, Q<sub>411</sub> 내지 Q<sub>417</sub> 및 Q<sub>421</sub> 내지 Q<sub>427</sub>에 대한 설명은 제1항의 Q<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조한다.

## 발명의 설명

# 기 술 분 야

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

### 배경기술

- [0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.
- [0003] 상기 유기 발광 소자는 기판 상부에 제1전극이 배치되어 있고, 상기 제1전극 상부에 정공 수송 영역(hole transport region), 발광층, 전자 수송 영역(electron transport region) 및 제2전극이 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 상기 제1전극으로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 제2전극으로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상 태로 변하면서 광이 생성된다.

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

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

# 과제의 해결 수단

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

[0006] <화학식 1>

[0007] [0008]

상기 화학식 1 중,

[0009]  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 서로 독립적으로 고리 구성 원자로서 헤테로원자를 포함하지 않는  $C_6$ - $C_{20}$ 방향족 고리이되,  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리가 동시에 벤젠인 경우는 제외되고,

[0010] L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group) 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group) 중에서 선택되고;

[0011] a1 내지 a4는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, a1이 2 이상일 경우 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고, a2가 2 이상일 경우 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하고, a3가 2 이상일 경우 2 이상의 L₃는 서로 동일하거나 상이하고;

[0012] Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아 미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또 는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알 키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 치환 헤테로시클로알킬기, 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다 환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q1)(Q2)(Q3), -N(Q4)(Q5) 및 -B(Q6)(Q7) 중에서 선택되고;

[0013] b1 및 b2는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b1이 2 이상일 경우, 2 이상의 b1은 서로 동일 하거나 상이할 수 있고, b2가 2 이상일 경우, 2 이상의 b2는 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0014] c1 및 c2는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

[0015] n1 및 n2는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고;

[0016] 상기 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합 다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기,

 $C_{10}$ 시클로알케닐기, 치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, 치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기, 치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴디오기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기, 치환된  $C_1$ - $C_2$ - $C_3$ - $C_3$ - $C_4$ - $C_5$ - $C_$ 

- [0017] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0018] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시 클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기(aryloxy), C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기(arylthio), C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>) 및 -B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0019] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴디오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기;
- [0020] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킨기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킨기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐리, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐리, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐리, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐리, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐리, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐리, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐리, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐리, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>-C<sub>10</sub>
- [0021] -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>) 및 -B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>); 중에서 선택되고;
- [0022] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>7</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>17</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>27</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>37</sub>은 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, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐 기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

#### 발명의 효과

[0023] 상기 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있다.

# 도면의 간단한 설명

[0024] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

# 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0025] 상기 축합환 화합물은, 하기 화학식 1로 표시된다:

[0026] <화학식 1>

$$\begin{bmatrix} (Ar_1)_{b1} \\ (L_1)_{a1} \\ \\ (R_1)_{c1} - (L_3)_{a3} \end{bmatrix}_{n1} A_1 \begin{bmatrix} (L_4)_{a4} - (R_2)_{c2} \\ \\ (Ar_2)_{b2} \end{bmatrix}_{n2}$$

[0027]

- [0028] 상기 화학식 1 중,
- [0029]  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 서로 독립적으로 고리 구성 원자로서 헤테로원자를 포함하지 않는  $C_6$ - $C_{20}$ 방향족 고리이되,  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리가 동시에 벤젠인 경우는 제외된다.
- [0030] 상기 화학식 1 중 상기  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 각각 인접한 5원환 고리와 탄소를 공유하면서 축합되어 있는 고리이다.
- [0031] 예를 들어, 상기 화학식 1 중  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 서로 독립적으로 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 크라이센 및 파이렌 중에서 선택될 수 있다.
- [0032] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 A₁ 고리 및 A₂ 고리는 서로 독립적으로 벤젠, 나프탈렌 및 페난트렌 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0033] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 A<sub>1</sub> 고리 및 A<sub>2</sub> 고리는 서로 동일하거나 또는 상이하다.
- [0034] 예를 들어, 상기 화학식 1 중  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 서로 동일할 수 있다.
- [0035] 상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환 된 2가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group) 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed heteropolycyclic group) 중에서 선택될 수 있다.
- [0036] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>는 서로 독립적으로,
- [0037] 페닐렌기(phenylene), 펜탈레닐렌기(pentalenylene), 인데닐렌기(indenylene), 나프틸렌기(naphthylene), 아줄 레닐렌기(azulenylene), 헵탈레닐렌기(heptalenylene), 인다세닐렌기(indacenylene), 아세나프틸렌기 (acenaphthylene), 플루오레닐렌기(fluorenylene), 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 페날레닐렌기(phenalenylene), 안트라세닐렌기 (anthracenylene), 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 파이레닐렌기 (pyrenylene), 크라이세닐렌기(chrysenylene), 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 피세닐렌기(picenylene), 페 릴레닐렌기(perylenylene), 펜타페닐렌기(pentaphenylene), 헥사세닐렌기(hexacenylene), 펜타세닐렌기 (pentacenylene), 루비세닐렌기(rubicenylene), 코로네닐기렌기(coronenylene), 오발레닐기렌기(ovalenylene), 피롤일렌기(pyrrolylene), 티오페닐렌기(thiophenylene), 퓨라닐렌기(furanylene), 이미다졸일렌기 (imidazolylene), 피라졸일렌기(pyrazolylene), 티아졸일렌기(thiazolylene), 이소티아졸일렌기 이속사졸일렌기(isooxazolylene). 옥사졸일렌기(oxazolylene), 피리디닐렌기 (isothiazolylene). 피리미디닐렌기(pyrimidinylene), 피리다지닐렌기 (pyridinylene), 피라지닐렌기(pyrazinylene), (pyridazinylene), 이소인돌일렌기(isoindolylene), 인돌일렌기(indolylene), 인다졸일렌기(indazolylene), 푸

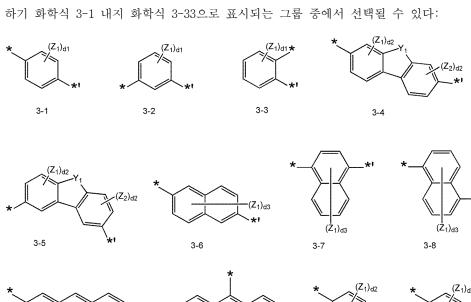
리닐렌기(purinylene), 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 이소퀴놀리닐렌기(isoquinolinylene), 벤조퀴놀리닐렌기 (benzoquinolinylene), 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 나프티리디닐렌기(naphthyridinylene), 퀴녹살리닐 렌기(quinoxalinylene), 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylene), 시놀리닐렌기(cinnolinylene), 카바졸일렌기 (carbazolylene), 페난트리디닐렌기(phenanthridinylene), 아크리디닐렌기(acridinylene), 페난트롤리닐렌기 (phenanthrolinylene), 페나지닐렌기(phenazinylene), 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 벤조퓨라닐렌 기(benzofuranylene), 벤조티오페닐렌기(benzothiophenylene), 이소벤조티아졸일렌기(isobenzothiazolylene), 이소벤조옥사졸일렌기(isobenzooxazolylene), 벤조옥사졸일렌기(benzooxazolylene), 트리아졸일렌기 테트라졸일렌기(tetrazolylene), 옥사디아졸일렌기(oxadiazolylene), (triazolylene), 트리아지닐렌기 (triazinylene), 디벤조퓨라닐렌기(dibenzofuranylene), 디벤조티오페닐렌기(dibenzothiophenylene), 벤조카바 졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기 및 이미다조피리미디닐렌기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클 로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레 닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루 오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐기레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴기레닐기, 헥사세닐기. 펜타세닐기. 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤 조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리 디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤 조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐 기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐 기 및 이미다조피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄 레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루 오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페 닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세 닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 피롤일렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 이 미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 이소인돌일렌기, 인돌일렌기, 인다졸일렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀 리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리 닐렌기, 시놀리닐렌기, 카바졸일렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤 조이미다졸일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사 졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 트리아지닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오 페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기 및 이미다조피리미 디닐렌기; 중에서 선택될 수 있다.

[0039] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>는 서로 독립적으로,

[0038]

[0040]



$$(Z_1)_{d2}$$
 $(Z_1)_{d2}$ 
 $(Z_$ 

$$(Z_1)_{d5}$$
 $(Z_1)_{d5}$ 
 $(Z_1)_{d5}$ 
 $(Z_1)_{d5}$ 
 $(Z_1)_{d5}$ 
 $(Z_1)_{d5}$ 
 $(Z_1)_{d5}$ 
 $(Z_1)_{d5}$ 
 $(Z_1)_{d5}$ 
 $(Z_1)_{d2}$ 
 $(Z_2)_{d6}$ 
 $(Z_1)_{d2}$ 
 $(Z_2)_{d6}$ 

$$(Z_1)_{d6}$$
 $(Z_1)_{d1}$ 
 $(Z_2)_{d2}$ 
 $(Z_2)_{d2}$ 
 $(Z_2)_{d2}$ 
 $(Z_2)_{d2}$ 
 $(Z_2)_{d2}$ 
 $(Z_2)_{d2}$ 

[0041]

[0042]

[0044] 상기 화학식 3-1 내지 3-33 중,

[0049]

[0050]

- [0045] Y<sub>1</sub>은 0, S, C(Z<sub>3</sub>)(Z<sub>4</sub>), N(Z<sub>5</sub>) 및 Si(Z<sub>6</sub>)(Z<sub>7</sub>) 중에서 선택되고;
- [0046]  $Z_1$  내지  $Z_7$ 은 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,  $C_1$ - $C_2$ 0알킬기,  $C_1$ - $C_2$ 0알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,
- [0047] d1은 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고, d2는 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, d3는 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, d4는 1 내지 8의 정수 중에서 선택되고, d5는 1 또는 2이고, d6는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고, \* 및 \*'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0048] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  $L_1$  내지  $L_4$ 는 서로 독립적으로, 하기 화학식 4-1 내지 화학식 4-28 로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0051] [0052]

상기 화학식 4-1 및 4-28 중 \* 및 \*'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0053]

상기 화학식 1 중 al은  $L_1$ 의 개수를 나타낸 것으로서, 0 내지 3의 정수 중에서 선택된다. 예를 들어, 상기 화학식 1 중 al은 0 또는 1일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. al이 0일 경우,  $*-(L_1)_{al}-*'$ 는 단일 결합이다. al이 2 이상일 경우 2 이상의  $L_1$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 상기 화학식 1 중 a2, a3 및 a4에 대한 설명은 al에 대한 설명 및 화학식 1의 구조를 참조하여 이해될 수 있다.

[0054]

상기 화학식 1 중 a1 내지 a4는 서로 독립적으로 0 또는 1일 수 있다.

[0055]

상기 화학식 1 중 Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 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, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>에클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>에테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>에테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환 된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 해테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -N(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>) 및 -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 중에서 선택될 수 있다. 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>7</sub>은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0056]

예를 들어, 상기 화학식 1 중 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,

[0057]

페닐기(phenyl), 비페닐기(biphenyl), 터페닐기(terphenyl), 펜탈레닐기(pentalenyl), 인데닐기(indenyl), 나 프틸기(naphthyl), 아줄레닐기(azulenyl), 헵탈레닐기(heptalenyl), 인다세닐기(indacenyl), 아세나프틸기 (acenaphthyl), 플루오레닐기(fluorenyl), 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페 날레닐기(phenalenyl), 페난트레닐기(phenanthrenyl), 안트라세닐기(anthracenyl), (fluoranthenyl), 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 파이레닐기(pyrenyl), 크라이세닐기(chrysenyl), 나프타세 닐기(naphthacenyl), 피세닐기(picenyl), 페릴레닐기(perylenyl), 펜타페닐기(pentaphenyl), 헥사세닐기 (hexacenvl), 펜타세닐기(pentacenyl), 루비세닐기(rubicenyl), 코로네닐기(coronenyl), (ovalenyl), 피롤일기(pyrrolyl), 티오페닐기(thiophenyl), 퓨라닐기(furanyl), 이미다졸일기(imidazolyl), 피 라졸일기(pyrazolyl), 티아졸일기(thiazolyl), 이소티아졸일기(isothiazolyl), 옥사졸일기(oxazolyl), 이속사 졸일기(isooxazolyl), 피리디닐기(pyridinyl), 피라지닐기(pyrazinyl), 피리미디닐기(pyrimidinyl), 피리다지 닐기(pyridazinyl), 이소인돌일기(isoindolyl), 인돌일기(indolyl), 인다졸일기(indazolyl), (purinyl), 퀴놀리닐기(quinolinyl), 이소퀴놀리닐기(isoquinolinyl), 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 프탈 라지닐기(phthalazinyl), 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐기(quinoxalinyl), 퀴나졸리닐기 (quinazolinyl), 시놀리닐기(cinnolinyl), 카바졸일기(carbazolyl), 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 아크리 디딜기(acridinyl), 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 페나지닐기(phenazinyl), 벤조이미다졸일기 벤조퓨라닐기(benzofuranyl), 벤조티오페닐기(benzothiophenyl), 이소벤조티아졸일기 (benzoimidazolyl), (isobenzothiazolyl), 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 이소벤조옥사졸일기(isobenzooxazolyl), 트리아졸일기 (triazolyl), 테트라졸일기(tetrazolyl), 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 트리아지닐기(triazinyl), 디벤조퓨라 닐기(dibenzofuranyl), 디벤조티오페닐기(dibenzothiophenyl), 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 디벤조실롤일 기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0058]

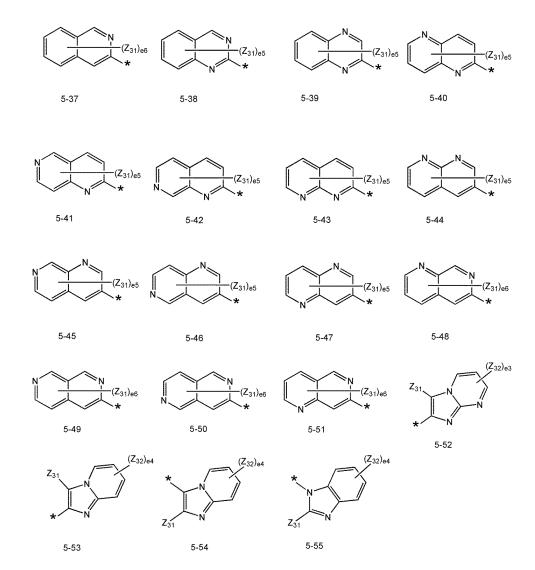
중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라진기, 하드라진기, 하드라진기, 하드라진기, 다르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1-C_{20}$ 알콕시기, 시클

로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레 닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루 오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 페세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜 타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리 디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라 닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피 리미디닐기 및 -Si(Q31)(Q32)(Q33) 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐 기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페 닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐 기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸 일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소 인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프 티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리 닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오기페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오 페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조 피리미디닐기; 중에서 선택되고,

- [0059] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 네조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조를일기, 티아디아졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0060] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,
- [0061] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및
- [0062] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라즈일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이스벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리디닐기 및 -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레

닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조류라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조류라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 중에서 선택되고,

- [0063] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0064] 한편, 상기 화학식 1 중 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,
- [0065] 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라 존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기:
- [0066] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;
- [0067] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 알콕시기, 페닐 기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레 닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페 닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐 기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴 나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일 기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐 기, 이미다조피리미디닐기 및  $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$  중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸 기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐 기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이 미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디 아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및
- [0068] -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>); 중에서 선택되고,
- [0069] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0070] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 서로 독립적으로, 하기 화학식 5-1 내지 화학식 5-55로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0071] R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미노기, 이디노기, 히드라진기, 히드라진기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기 및 하기 화학식 5-1 내지 5-55로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



[0077] 상기 화학식 5-1 내지 화학식 5-55 중,

[0075]

[0076]

[0082]

[0078] Y<sub>31</sub>은 0, S, C(Z<sub>33</sub>)(Z<sub>34</sub>), N(Z<sub>35</sub>) 및 Si(Z<sub>36</sub>)(Z<sub>37</sub>) 중에서 선택되고;

[0079]  $Z_{31}$  내지  $Z_{37}$ 은 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,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 키놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,

[0080] e2는 1 또는 2이고, e3는 1 내지 3의 정수이고, e4는 1 내지 4의 정수이고, e5는 1 내지 5의 정수이고, e6은 1 내지 6의 정수이고, e7은 1 내지 7의 정수이고, e9은 1 내지 9의 정수이고, \*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0081] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,

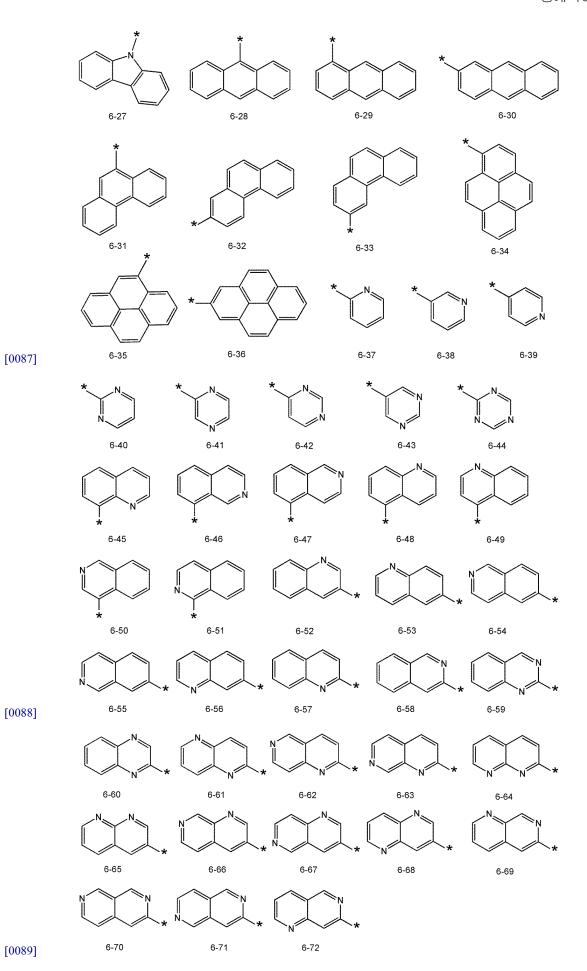
하기 화학식 6-1 내지 화학식 6-76으로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

[0083] R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기 및 하기 화학식 6-1 내지 6-76으로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0084]

[0085]

[0086]



[0090] [0091]

- 상기 화학식 6-1 내지 화학식 6-76 중, \*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0092] 예를 들어, 상기 화학식 1 중  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 서로 동일할 수 있다.
- [0093] 상기 화학식 1 중 b1은 Ar<sub>1</sub>의 개수를 나타낸 것으로서, 0 내지 3의 정수 중에서 선택될 수 있다. 예를 들어, b1은 1 또는 2일 수 있다. b1이 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. b2 에 대한 설명은 b1에 대한 설명 및 화학식 1의 구조를 참조하여 이해될 수 있다.
- [0094] 상기 화학식 1 중 c1은 R<sub>1</sub>의 개수를 나타낸 것으로서, 0 내지 3의 정수 중에서 선택될 수 있다. 예를 들어, c1 은 0, 1 또는 2일 수 있다. b1이 2 이상일 경우, 2 이상의 R<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. c2 에 대한 설명은 c1에 대한 설명 및 화학식 1의 구조를 참조하여 이해될 수 있다.
- [0095] 상기 화학식 1 중 n1은 \*-[(L<sub>3</sub>)<sub>a3</sub>-(R<sub>1</sub>)<sub>b1</sub>]의 개수를 나타낸 것으로서, 0 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있다. 예를 들어, n1은 1 내지 8의 정수 중에서 선택될 수 있다. n1이 2 이상일 경우, 2 이상의 \*-[(L<sub>3</sub>)<sub>a3</sub>-(R<sub>1</sub>)<sub>b1</sub>]은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. n2에 대한 설명은 n1에 대한 설명 및 화학식 1의 구조를 참조하여 이해될 수 있다.
- [0096] 일 구현예에 따르면, 상기 축합환 화합물은 하기 화학식 1A 내지 1L 중 하나로 표시될 수 있다:
- [0097] <화학식 1A> <화학식 1B>

[0098]

[0099] <화학식 1C> <화학식 1D>

[0100]

[0101] <화학식 1E> <화학식 1F>

[0103] <화학식 1G> <화학식 1H>

[0102]

[0104]

[0106]

[0108]

[0105] <화학식 1I> <화학식 1J>

[0107] <화학식 1K> <화학식 1L>

[0109] 상기 화학식 1A 내지 1L 중 L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, a1, a2, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, b1 및 b2는 본 명세서에 기재된 바와 동일하고, R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1h</sub>는 본 명세서 중 R<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고, R<sub>2a</sub> 내지 R<sub>2h</sub>는 본 명세서 중 R<sub>2</sub>에 대한 설명을 참조한다.

[0110] 예를 들어, 상기 화학식 1A 내지 1L 중,

[0111] L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로 상기 화학식 3-1 내지 3-33으로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

[0112] a1 및 a2는 서로 독립적으로 0 또는 1이고;

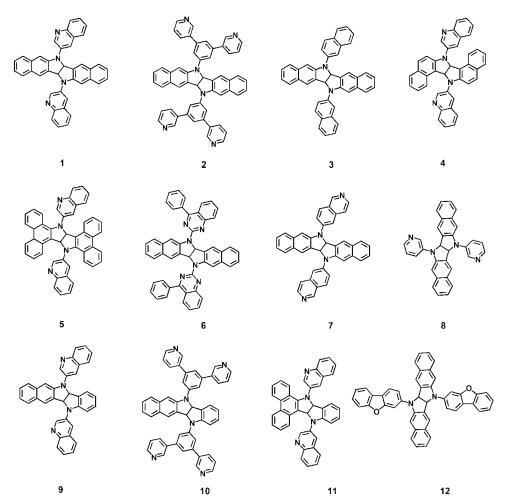
[0113] Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 상기 화학식 5-1 내지 5-55로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

[0114] b1 및 b2는 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

- [0115] R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1b</sub> 및 R<sub>2a</sub> 내지 R<sub>2b</sub>는 서로 독립적으로,
- [0116] 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라 존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0117] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피라지닐기, 기울리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리디닐기; 및
- [0118] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피라지닐기, 피라다지닐기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소타아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 케놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 케녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조디아졸일기, 벤조다아필일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조타오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0119] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1A 내지 1L 중,
- [0120] L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 상기 화학식 4-1 내지 4-28로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0121] a1 및 a2는 서로 독립적으로 0 또는 1이고;
- [0122] Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 상기 화학식 6-1 내지 6-76으로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0123] b1 및 b2는 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고;
- [0124] R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1h</sub> 및 R<sub>2a</sub> 내지 R<sub>2h</sub>는 서로 독립적으로,
- [0125] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라 존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0126] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 키놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리디닐기; 및
- [0127] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페날레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일

기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조탁사졸일기, 벤조옥사졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택될 수 있다.

- [0128] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1A 내지 1L 중, a1 및 a2는 서로 독립적으로 0 또는 1이고, b1 및 b2는 1일 수 있다.
- [0129] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1A 내지 1L 중,
- [0130] R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1h</sub> 및 R<sub>2a</sub> 내지 R<sub>2h</sub>가 수소일 수 있다.
- [0131] 다른 구현예에 따르면, 상기 축합환 화합물은 하기 화합물 1 내지 12 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0132]

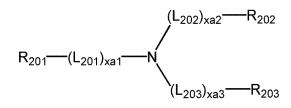
- [0133] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리는 동시에 벤젠이 아니다.  $A_1$  고리 및  $A_2$  고리가 동시에 벤젠인 경우, 전기적 안정성이 낮아 이를 채용한 유기 발광 소자는 수명이 짧은 단점이 있다.
- [0134] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0135] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 축합환 화합물은 발광층에 포함될 수 있다. 따라서, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층을 포함하되, 상기 유기층은 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시된 축합환 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0136] 본 명세서 중 "(유기층이) 축합환 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 축합환 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 축합환 화합물을 포함할 수 있

다"로 해석될 수 있다.

- [0137] 예를 들어, 상기 유기층은, 상기 축합환 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 축합환 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1 은 발광층에 존재하고 상기 화합물 2는 전자 수송층에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0138] 상기 유기층은, i) 상기 제1전극(애노드)과 상기 발광층 사이에 개재되며, 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함한, 정공 수송 영역을 포함하고, ii) 상기 발광층과 상기 제2전극(캐소드) 사이에 개재되며, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한, 전자 수송 영역을 포함할 수 있다. 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0139] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.
- [0140] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 유기 발광 소자(10)은 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)을 포함한다.
- [0141] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0142] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판은 기계 적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0143] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공 함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질로서, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 중 적어도 하나를 선택할 수 있다.
- [0144] 상기 제1전극(110)은 단일층 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(11 0)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0145] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.
- [0146] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되는 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되는 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.
- [0147] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있고, 상기 전자 수송 영역은 정공 저지층(HBL), 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0148] 상기 정공 수송 영역은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0149] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1전극(110) 으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/버퍼층, 정공 주입층/버퍼층, 정공 수입층/버퍼층, 정공 수송층/버퍼층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0150] 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 상기 제1전극(110) 상부에 상기 정공 주입층을 형성할 수 있다.

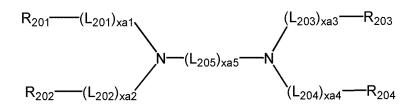
- [0151] 진공 중착법에 의하여 정공 주입층을 형성할 경우, 중착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500℃의 중착 온도, 약 10<sup>-8</sup> 내지 약 10<sup>-3</sup>torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 중착 속도 범위 내에서, 중착하고자 하는 정공 주입층용 화합물 및 형성하고자 하는 정공 주입층 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0152] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성할 경우, 코팅 조건은 약 2,000rpm 내지 약 5,000rpm의 코팅 속도 및 약 80℃ 내지 200℃의 열처리 온도 범위 내에서, 증착하고자 하는 정공 주입층용 화합물 및 형성하고자 하는 정 공 주입층 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0153] 상기 정공 수송 영역이 정공 수송층을 포함할 경우, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 제1전극(110) 상부 또는 정공 주입층 상부에 상기 정공 수송층을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층을 형성할 경우, 정공 수송층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.
- [0154] 상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, α-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술폰산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캠퍼술폰산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)), HT 21, 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:

[0157] <화학식 201>



[0158]

[0159] <화학식 202>



[0160] [0161]

상기 화학식 201 및 202 중,

[0162]  $L_{201}$  내지  $L_{205}$ 은 서로 독립적으로, 본 명세서 중  $L_1$ 에 대한 설명을 참조하고;

[0163] xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고;

[0164] xa5는 1, 2, 3, 4 및 5 중에서 선택되고;

[0165] R<sub>201</sub> 내지 R<sub>204</sub>은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴리오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴리오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0166] 예를 들어, 상기 화학식 201 및 202 중,

[0167] L<sub>201</sub> 내지 L<sub>205</sub>는 서로 독립적으로,

[0168] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오렌기, 디벤조플루오렌기, 페난트 레닐렌기, 안트라세닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리 다지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 카바졸일렌기 및 트리아지닐렌기; 및

[0169] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 이소인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페라지닐렌기, 페라디닐렌기, 페라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 카바졸일렌기, 카바졸일레기, 파라지닐렌기, 파라지닐렌기, 카바졸일레기, 파리디닐렌기, 카바졸일렌기 및 트리아지닐렌기; 중에서 선택되고;

[0170] xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고;

[0171] xa5는 1, 2 또는 3이고;

[0172] R<sub>201</sub> 내지 R<sub>204</sub>는 서로 독립적으로,

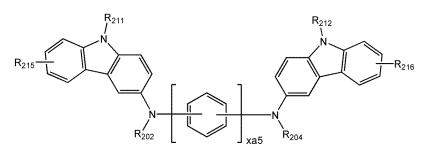
[0173] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루 오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피 리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및

- [0174] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리디닐기, 파라즈빌기, 파라즈빌기, 파라즈빌기, 파라즈빌기, 파라즈빌기, 파라즈빌기, 파라즈빌기, 파라즈빌기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0175] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:
- [0176] <화학식 201A>

$$R_{215}$$
  $R_{211}$   $R_{214}$   $R_{216}$   $R_{213}$   $R_{214}$   $R_{216}$   $R_{2$ 

- [0177] [0178]
  - 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0179] <화학식 201A-1>

- [0180]
- [0181] 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0182] <화학식 202A>



- [0183]
- [0184] 상기 화학식 201A, 201A-1 및 202A 중 L<sub>201</sub> 내지 L<sub>203</sub>, xal 내지 xa3, xa5 및 R<sub>202</sub> 내지 R<sub>204</sub>에 대한 설명은 본 명 세서에 기재된 바를 참조하고, R<sub>211</sub>은 R<sub>203</sub>에 대한 설명을 참조하고, R<sub>213</sub> 내지 R<sub>216</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중 수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라즌기, 카

르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기,  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알킬기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기옥시기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기티오기,  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기,  $C_1$ - $C_{60}$ 하리기옥시기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아리기티오기,  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아리기,  $C_1$ - $C_{60}$ 하리기옥시기,  $C_6$ - $C_6$ 0아리기티오기,  $C_1$ - $C_6$ 0하데로아리기,  $C_1$ - $C_6$ 0하데로아리기,  $C_1$ - $C_6$ 0하다.

- [0185] 예를 들어, 상기 화학식 201A, 201A-1 및 202A 중,
- [0186] L<sub>201</sub> 내지 L<sub>203</sub>은 서로 독립적으로,
- [0187] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐렌기, 피라지닐렌기, 기울리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 카바졸일 렌기 및 트리아지닐렌기; 및
- [0188] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페라드레닐렌기, 아트라세닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 피리디닐렌기, 피라지닐 렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 카바졸일렌기 및 트리아지닐렌기; 중에서 선택되고;
- [0189] xa1 내지 xa3은 서로 독립적으로, 0 또는 1이고;
- [0190] R<sub>203</sub>, R<sub>211</sub> 및 R<sub>212</sub>는 서로 독립적으로,
- [0191] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및
- [0192] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C1-C20알킬기, C1-C20알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 파리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택되고;
- [0193] R<sub>213</sub> 및 R<sub>214</sub>는 서로 독립적으로,
- [0194] C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0195] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C1-C20알킬기 및 C1-C20알콕시기;
- [0196] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루 오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피

리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및

- [0197] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페라디닐기, 페라디닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택되고;
- [0198] R<sub>215</sub> 및 R<sub>216</sub>은 서로 독립적으로,
- [0199] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라 존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0200] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C1-C20알킬기 및 C1-C20알콕시기;
- [0201] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기 및 트리아지닐기; 및
- [0202] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페라지닐기, 피리미디닐기, 페라지닐기, 카바졸일기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페라드레닐기, 아트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택되고;
- [0203] xa5는 1 또는 2이다.
- [0204] 상기 화학식 201A 및 201A-1 중 R<sub>213</sub> 및 R<sub>214</sub>는 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.
- [0205] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0209]

[0208]

[0210] 상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100Å 내지 약 10,000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1,000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층을 모두 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10,000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1,000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2,000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1,500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

- [0211] 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.
- [0212] 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 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0213] <화합물 HT-D1> <F4-TCNO>

[0214]

[0218]

[0215] 상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 정공 주입층 및 정공 수송층 외에, 버퍼층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시키는 역할을 수 있다. 상기 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층은 전자 수송 영역으로부터의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

[0216] 상기 제1전극(110) 상부 또는 정공 수송 영역 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 발광층을 형성한다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층을 형성할 경우, 발광층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.

[0217] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광 층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층이 적층된 구조를 갖거나, 적색광 발출 물질, 녹색광 발출 물질 및 청색광 방출 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

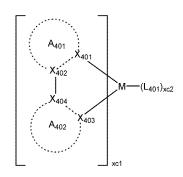
상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 축합한 화합물을 포함할 수 있다.

[0219] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 여기서, 상기 호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함할 수 있다.

[0220] 상기 도펀트는 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0221] 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함할 수 있다:

[0222] <화학식 401>



[0223]

[0224] 상기 화학식 401 중,

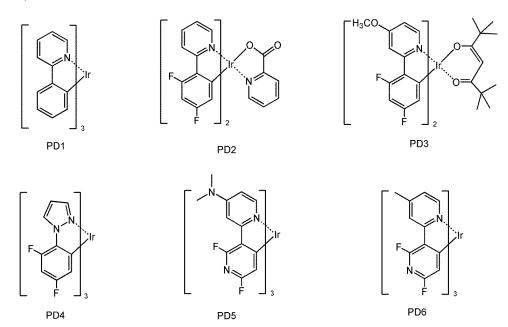
[0225] M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 톨륨(TM) 중에서 선택되고;

[0226] X<sub>401</sub> 내지 X<sub>404</sub>는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고;

- [0227] A<sub>401</sub> 및 A<sub>402</sub> 고리는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 벤젠, 치환 또는 비치환된 나프탈렌, 치환 또는 비치 환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오렌, 치환 또는 비치환된 인덴, 치환 또는 비치환된 피롤, 치환 또는 비치환된 티오펜, 치환 또는 비치환된 퓨란(furan), 치환 또는 비치환된 이미다졸, 치환 또는 비치환된 된 피라졸, 치환 또는 비치환된 티아졸, 치환 또는 비치환된 이소티아졸, 치환 또는 비치환된 옥사졸, 치환 또는 비치환된 이속사졸(isooxazole), 치환 또는 비치환된 피리딘, 치환 또는 비치환된 피라진, 치환 또는 비치환된 피라진, 치환 또는 비치환된 피라진, 치환 또는 비치환된 기수를린, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀린, 치환 또는 비치환된 퀴녹살린, 치환 또는 비치환된 퀴나졸린, 치환 또는 비치환된 카바졸, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸, 치환 또는 비치환된 벤조류란(benzofuran), 치환 또는 비치환된 벤조디오펜, 치환 또는 비치환된 벤조유라(benzofuran), 치환 또는 비치환된 이소벤조옥사졸, 치환 또는 비치환된 트리아질, 치환 또는 비치환된 우사디아졸, 치환 또는 비치환된 트리아진, 치환 또는 비치환된 디벤조유란(dibenzofuran) 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 중에서 선택되고;
- [0228] 상기 치환된 벤젠, 치환된 나프탈렌, 치환된 플루오렌, 치환된 스파이로-플루오렌, 치환된 인덴, 치환된 피롤, 치환된 티오펜, 치환된 퓨란, 치환된 이미다졸, 치환된 피라졸, 치환된 티아졸, 치환된 이소티아졸, 치환된 옥 사졸, 치환된 이속사졸, 치환된 피리딘, 치환된 피라진, 치환된 피리미딘, 치환된 피리다진, 치환된 퀴놀린, 치환된 이소퀴놀린, 치환된 벤조퀴놀린, 치환된 퀴녹살린, 치환된 퀴나졸린, 치환된 카바졸, 치환된 벤조이미다졸, 치환된 벤조퓨란, 치환된 벤조티오펜, 치환된 이소벤조티오펜, 치환된 벤조옥사졸, 치환된 이소 벤조옥사졸, 치환된 트리아졸, 치환된 옥사디아졸, 치환된 트리아진, 치환된 디벤조퓨란 및 치환된 디벤조티오 펜의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0229] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라즌기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐 기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0230] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알 킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기(aryloxy), C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기(arylthio), C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group), 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -N(Q<sub>401</sub>)(Q<sub>402</sub>), -Si(Q<sub>403</sub>)(Q<sub>404</sub>)(Q<sub>405</sub>) 및 -B(Q<sub>406</sub>)(Q<sub>407</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0231] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴지, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴지, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴지, C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기;
- [0232] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐 기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알 케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -N(Q<sub>411</sub>)(Q<sub>412</sub>), -Si(Q<sub>413</sub>)(Q<sub>414</sub>)(Q<sub>415</sub>) 및 -B(Q<sub>416</sub>)(Q<sub>417</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴의기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴리오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및
- [0233] -N(Q<sub>421</sub>)(Q<sub>422</sub>), -Si(Q<sub>423</sub>)(Q<sub>424</sub>)(Q<sub>425</sub>) 및 -B(Q<sub>426</sub>)(Q<sub>427</sub>); 중에서 선택되고;
- [0234] L<sub>401</sub>은 유기 리간드이고;
- [0235] xc1은 1, 2 또는 3이고;
- [0236] xc2는 0, 1, 2 또는 3이다.

- [0237] 상기 L<sub>401</sub>은 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, L<sub>401</sub>은 할로겐 리간드(예를 들면, Cl, F), 디케톤 리간드(예를 들면, 아세틸아세토네이트, 1,3-디페닐-1,3-프로판디오네이트, 2,2,6,6-테트라메틸-3,5-헵탄디오네이트, 헥사플루오로아세토네이트), 카르복실산 리간드(예를 들면, 피콜리네이트, 디메틸-3-피라 졸카르복실레이트, 벤조에이트), 카본 모노옥사이드 리간드, 이소니트릴 리간드, 시아노 리간드 및 포스포러스 리간드(예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphite)) 중 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0238] 상기 Q<sub>401</sub> 내지 Q<sub>407</sub>, Q<sub>411</sub> 내지 Q<sub>417</sub> 및 Q<sub>421</sub> 내지 Q<sub>427</sub>은 독립적으로, 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아 릴기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기 중에서 선택된다.
- [0239] 상기 화학식 401 중  $A_{401}$ 가 2 이상의 치환기를 가질 경우,  $A_{401}$ 의 2 이상의 치환기를 서로 결합하여 포화 또는 불 포화 고리를 형성할 수 있다.
- [0240] 상기 화학식 401 중  $A_{402}$ 가 2 이상의 치환기를 가질 경우,  $A_{402}$ 의 2 이상의 치환기를 서로 결합하여 포화 또는 불 포화 고리를 형성할 수 있다.

- [0241] 상기 화학식 401 중 xc1이 2 이상일 경우, 화학식 401 중 복수의 리간드 `````` 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 상기 화학식 401 중 xc1이 2 이상일 경우, A<sub>401</sub> 및 A<sub>402</sub>는 각각 이웃하는 다른 리간드의 A<sub>401</sub> 및 A<sub>402</sub>와 각각 직접(directly) 또는 연결기(예를 들면, C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>알킬렌기, -N(R')-(여기서, R'은 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 또는 C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>아릴기임) 또는 -C(=0)-)를 사이에 두고 연결될 수 있다.
- [0242] 상기 인광 도편트는 하기 화합물 PD1 내지 PD74 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0243]

[0246]

[0247] 
$$PD24$$
  $PD24$   $PD24$   $PD24$   $PD24$   $PD24$   $PD24$   $PD25$   $PD26$   $PD27$   $PD26$   $PD26$   $PD27$   $PD28$   $PD28$   $PD29$   $PD29$ 

[0250] 
$$PD40$$
  $PD41$   $PD41$   $PD42$   $PD42$   $PD43$   $PD45$   $PD45$   $PD45$   $PD46$   $PD47$   $PD48$   $PD48$   $PD49$   $PD50$   $PD50$   $PD51$   $PD51$   $PD52$   $PD52$   $PD53$   $PD54$   $PD55$   $PD55$   $PD55$   $PD56$   $PD57$ 

[0253] 
$$PD68$$
  $PD69$   $PD69$ 

[0256] 또는, 상기 인광 도펀트는 하기 PtOEP 및 PD75를 포함할 수 있다:

[0258] 상기 형광 도펀트는 하기 DPAVBi, BDAVBi, TBPe, DCM, DCJTB, Coumarin 6 및 C545T 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0260]

[0259]

[0257]

[0261] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범 위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0262] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있 다.

[0263] 다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치될 수 있다.

Coumarin 6

[0264] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적층된 전자 수송층/전자 주입층 또는 정공 저지층/ [0265] 전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0266] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 유기층(150)은 발광층과 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영 역을 포함하고, 상기 전자 수송 영역에, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 존재한다.

[0267] 상기 전자 수송 영역은 정공 저지층을 포함할 수 있다. 상기 정공 저지층은, 발광층이 인광 도펀트를 사용할 경우, 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 형성할 수 있다.

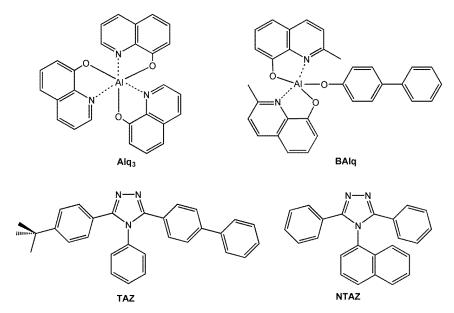
- [0268] 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 상기 발광층 상부에 상기 정공 저지층을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 정공 저지층을 형성할 경우, 정공 저지층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.
- [0269] 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP 및 Bphen 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0271] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0272] 상기 전자 수송 영역은 전자 수송층을 포함할 수 있다. 상기 전자 수송층은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 상기 발광층 상부 또는 정공 저지층 상부에 형성될 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 전자 수송층을 형성할 경우, 전자 수송층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.

[0273] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 유기층(150)은 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전 자 수송 영역을 포함한다. 상기 전자 수송 영역은 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0274] 상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq<sub>3</sub>, Balq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.



[0276] 또는, 상기 전자 수송층은, 하기 화학식 601로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 602로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다:

[0277] <화학식 601>

[0275]

[0270]

- [0278]  $Ar_{601}$ -[( $L_{601}$ )<sub>xe1</sub>- $E_{601}$ ]<sub>xe2</sub>
- [0279] 상기 화학식 601 중,
- [0280] Ar<sub>601</sub>은
- [0281] 나프탈렌(naphthalene), 헵탈렌(heptalene), 플루오렌(fluorenene), 스파이로-플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조 플루오렌, 페날렌(phenalene), 페난트렌(phenanthrene), 안트라센(anthracene), 플루오란텐(fluoranthene), 트리페닐렌(triphenylene), 파이렌(pyrene), 크라이센(chrysene), 나프타센(naphthacene), 피센(picene), 페릴렌 (perylene), 펜타펜(pentaphene) 및 인데노안트라센(indenoanthracene); 및
- [0282] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기 및 -Si(Q<sub>301</sub>)(Q<sub>302</sub>)(Q<sub>303</sub>) (상기 Q<sub>301</sub> 내지 Q<sub>303</sub>은 서로 독립적으로, 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기임) 중에서 선택된 적어도하나로 치환된, 나프탈렌, 헵탈렌, 플루오렌, 스파이로-플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 페날렌, 페난트렌, 안트라센, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 나프타센, 피센, 페릴렌, 펜타펜 및 인데노안트라센; 중에서 선택되고;
- [0283] L<sub>601</sub>에 대한 설명은 본 명세서 중 L<sub>301</sub>에 대한 설명을 참조하고;
- [0284] E<sub>601</sub>은
- [0285] 피롤일기(pyrrolyl), 티오페닐기(thiophenyl), 퓨라닐기(furanyl), 이미다졸일기(imidazolyl), 피라졸일기 (pyrazolyl), 티아졸일기(thiazolyl), 이소티아졸일기(isothiazolyl), 옥사졸일기(oxazolyl), 이속사졸일기 (isooxazolyl), 피리디닐기(pyridinyl), 피라지닐기(pyrazinyl), 피리미디닐기(pyrimidinyl), 피리다지닐기 (pyridazinyl), 이소인돌일기(isoindolyl), 인돌일기(indolyl), 인다졸일기(indazolyl), 푸리닐기(purinyl), 퀴놀리닐기(quinolinyl), 이소퀴놀리닐기(isoquinolinyl), 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 프탈라지닐기 (phthalazinyl), 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐기(quinoxalinyl), 퀴나졸리닐기(quinazolinyl), 시놀리닐기(cinnolinyl), 카바졸일기(carbazolyl), 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 아크리디닐기 (acridinyl), 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 페나지닐기(phenazinyl), 벤조이미다졸일기 벤조퓨라닐기(benzofuranyl), 벤조티오페닐기(benzothiophenyl), 이소벤조티아졸일기 (benzoimidazolyl), (isobenzothiazolyl), 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 이소벤조옥사졸일기(isobenzooxazolyl), 트리아졸일기 (triazolyl), 테트라졸일기(tetrazolyl), 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 트리아지닐기(triazinyl), 디벤조퓨라 닐기(dibenzofuranyl), 디벤조티오페닐기(dibenzothiophenyl), 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피 리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및
- [0286] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비 페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루 오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라 세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜 타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이 미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피 리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조 퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디 닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기,

피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조타오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 중에서 선택되고;

- [0287] xel은 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고;
- [0288] xe2는 1, 2, 3 및 4 중에서 선택된다.
- [0289] <화학식 602>

$$X_{611}$$
 $X_{613}$ 
 $X_{616}$ 
 $X_{616}$ 
 $X_{616}$ 
 $X_{616}$ 
 $X_{612}$ 
 $X_{615}$ 
 $X_{615}$ 
 $X_{615}$ 

[0291] 상기 화학식 602 중,

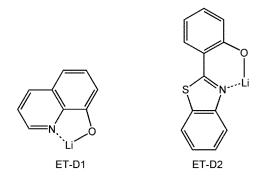
[0290]

- [0292] X<sub>611</sub>은 N 또는 C-(L<sub>611</sub>)<sub>xe611</sub>-R<sub>611</sub>이고, X<sub>612</sub>는 N 또는 C-(L<sub>612</sub>)<sub>xe612</sub>-R<sub>612</sub>이고, X<sub>613</sub>은 N 또는 C-(L<sub>613</sub>)<sub>xe613</sub>-R<sub>613</sub>이고, X<sub>611</sub> 내지 X<sub>613</sub> 중 적어도 하나는 N이고;
- [0293] L<sub>611</sub> 내지 L<sub>616</sub> 각각에 대한 설명은 본 명세서 중 L<sub>301</sub>에 대한 설명을 참조하고;
- [0294] R<sub>611</sub> 내지 R<sub>616</sub>은 서로 독립적으로,
- [0295] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루 오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐; 및
- [0296] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리디디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일 및 트리아지닐기; 중에서 선택되고;
- [0297] xe611 내지 xe616은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택된다.
- [0298] 상기 화학식 601로 표시되는 화합물 및 화학식 602로 표시되는 화합물은 서로 독립적으로, 하기 화합물 ET1 내지 ET15 중에서 선택될 수 있다:

[0304] 상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전

자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전 자 수송 특성을 얻을 수 있다.

- [0305] 상기 전자 수송층은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0306] 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2을 포함할 수 있다.



[0307]

- [0308] 상기 전자 수송 영역은, 제2전극(190)으로부터의 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다.
- [0309] 상기 전자 주입층은, 진공 중착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 상기 전자 수송층 상부에 형성될 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 전자 주입층을 형성할 경우, 전자 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건은 상기 정공 주입층의 증착 조건 및 코팅 조건을 참조한다.
- [0310] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O, BaO 및 LiQ 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0311] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0312] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(190)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 제2전극(190)용 물질의 구체적인 예에는, 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등이 포함될 수 있다. 또는, 상기 제2전극(190)용 물질로서 ITO 또는 IZO 등을 사용할 수 있다. 상기 제2전극(190)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다.
- [0313] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0314] 본 명세서 중  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬렌기는 상기  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 (divalent) 그룹을 의미한다.
- [0315] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기는, -0A<sub>101</sub>(여기서, A<sub>101</sub>은 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0316] 본 명세서 중  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기는, 상기  $C_2$ - $C_{60}$ 알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐렌기는 상기  $C_2$ - $C_{60</sub>알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.$
- [0317] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기는, 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0318] 본 명세서 중  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로펜틸기, 시클로헬틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬렌기는 상기  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0319] 본 명세서 중  $C_1$ - $C_{10}$ 해테로시클로알킬기는, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 혜테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로퓨라닐 기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오페닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중  $C_1$ - $C_{10}$ 해테로시클로알킬렌기는 상기  $C_1$ - $C_{10}$ 해테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0320] 본 명세서 중  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromacity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐렌기는 상기  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0321] 본 명세서 중  $C_1$ - $C_{10}$ 해테로시클로알케닐기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리 -형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-히드로퓨라닐기, 2,3-히드로티오페닐기 등을 포함한 다. 본 명세서 중  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐렌기는 상기  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐리와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0322] 본 명세서 중 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 (divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.
- [0323] 본 명세서 중  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고,  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로 아릴렌기는 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  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한 다. 상기  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기 및  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.
- [0324] 본 명세서 중 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기는 -0A<sub>102</sub>(여기서, A<sub>102</sub>는 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리키고, 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기 (arylthio)는 -SA<sub>103</sub>(여기서, A<sub>103</sub>은 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기기임)를 가리킨다.
- [0325] 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)를 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 8 내지 60을 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.
- [0326] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromacity)를 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 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.

- [0327] 본 명세서 중, 상기 치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬렌기, 치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 혜테로시클로알킬렌기, 치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐렌기, 치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 혜테로시클로알케닐렌기, 치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴렌기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 해테로아릴렌기, 치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기, 치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기, 치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기, 치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알키닐기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알리기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알리기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알리기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 아릴리기, 치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 아릴의기, 치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 아릴의기, 치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기, 치환된  $C_4$ - $C_{60}$ 아릴의기, 치환된  $C_6$ - $C_6$ 0아릴디오기, 치환된  $C_1$ - $C_6$ 0혜테로아릴기, 치환된  $C_1$ - $C_1$ 0혜테로아릴기, 치환된  $C_1$ - $C_1$ 0혜테로아릴기, 치환된  $C_1$ - $C_2$ 0혜테로아필리  $C_1$ 0현리  $C_1$
- [0328] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염,  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기 및  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기;
- [0329] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알 킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기(aryloxy), C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티 오기(arylthio), C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페 닐기, 터페닐기, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>) 및 -B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0330] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴지, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴디오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기;
- [0331] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>혜테로시클로알 케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴지, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>혜테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 혜테로축합다환 그룹, 비페닐기, 터페닐기, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>) 및 -B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>혜테로시클로알 케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>혜테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 혜테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기; 및
- [0332] -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>) 및 -B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>); 중에서 선택되고;
- [0333] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>7</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>17</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>27</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>37</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라즌기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0334] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu<sup>t</sup>"은 tert-부틸기를 의미한다.
- [0335] 이하에서, 합성예 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성예 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.
- [0336] 본 명세서 중 "비페닐기"는 2개의 벤젠이 단일 결합으로 서로 연결되어 있는 1가 그룹을 의미하고, "터페닐기"

는 3개의 벤젠이 단일 결합으로 서로 연결되어 있는 1가 그룹을 의미한다.

# [0337] [실시예]

### [0338] 합성예 1: 화합물 2의 합성

### [0339]

#### [0340] 중간체 (B)의 합성

[0341] 중간체 (A)에 무수 메탄올(MeOH) (120mL)을 가한 후 온도를 0°C로 유지하고, c-H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (60mL)를 천천히 적가하였다. 반응 혼합물을 90°C에서 14시간 동안 환류시킨 후 실온으로 냉각하였다. 감압 증류한 후 반응 혼합물을 얼음물에 천천히 넣고, NaHCO<sub>3</sub>을 이용하여 중화시켰다. 이때, 형성된 고체 생성물을 여과하고, 증류수를 이용하여 세척하였다. 상기 고체 생성물을 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 녹인 후 추출하였다. 유기층을 물로 세척하고, MgSO<sub>4</sub>로 처리한후 감압 증류하여 노란색의 중간체 (B) (7.58g, 60%)를 얻었다. H NMR (300MHz, DMSO-d<sub>6</sub>): 7.69-7.57 (m, 6H), 7.42 (t, 2H), 3.10 (t, 3H).

## [0342] 중간체 (C)의 합성

[0343] 중간체 (B) (15 g, 74.5 mmol)에 THF (200 mL)를 가한 후 천천히 교반하면서, NaH (5.72 g, 149 mmol, 60 % dispersion in mineral oil)를 적가하였다. 반응 혼합물을 72 시간 동안 60 °C에서 환류시킨 후, 실온으로 냉각하고, 증류수 (250 mL)를 가해 반응을 종료하였다. 상기 반응 혼합물에 2N HCl (500 mL)를 천천히 가한 후 60분간 교반하였다. 형성된 고체 생성물을 여과하고, 증류수를 이용하여 세척하였다. 상기 고체 생성물을 진공 건조하여 중간체 (C) (8.07 g, 64%)를 얻었다. <sup>1</sup>H NMR (300MHz, DMSO-d<sub>6</sub>) : 10.5 (s, 2H), 7.92 (m, 4H),7.88 (m, 4H),7.64 (s, 2H), 7.46 (s, 2H).

### [0344] <u>중간체 (D)의 합성</u>

[0345] 중간체 (C) (8.1 g, 24 mmol)에 무수 CHCl<sub>3</sub> (100 mL)를 가한 후 질소 분위기 하에서 30분간 교반하였다. 반응 혼합물에 PCl<sub>5</sub> (11 g, 52.8 mmol)를 천천히 가한 후 100 °C에서 6시간 동안 환류시켰다. 상기 반응 혼합물을 실온으로 냉각시킨 후 감압 증류한 다음 아세톤(50 mL)으로 3회 세척하였다. 이로부터 생성된 고체 생성물을 진공 건조하여 중간체 (D) (4.70g, 53%)를 얻었다. <sup>1</sup>H NMR (300MHz, DMSO-d<sub>6</sub>) : 8.29 (d, 2H), 8.20 (d, 2H), 7.85-7.72 (m, 8H), <sup>13</sup>C NMR (300MHz, DMSO-d<sub>6</sub>) : 133.50, 130.02, 128.00, 127.95, 125.80.

### [0346] <u>중간체 (E)의 합성</u>

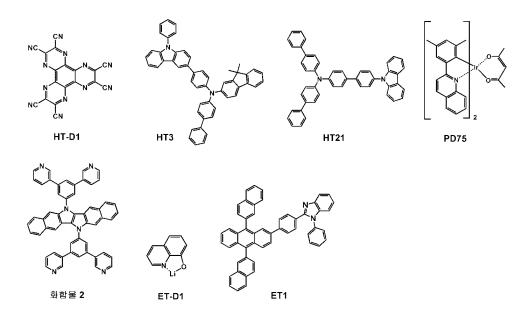
[0347] 중간체 (D) (5.1 g, 13.7 mmol)에 무수 THF (400 mL)를 가한 후 질소 분위기 하에서 20분간 교반하였다. 반응용기에 Zn (12.5 g, 191.8 mmol)를 가한 후 30분간 격렬히 교반하였다. 반응 혼합물에 트리플루오로아세트산 (trifluoroacetic acid: TFA) (23.5 mL, 315.1 mmol)를 천천히 적가한 후 실온에서 8시간 동안 교반하였다. 과포화 NH4Cl 수용액 (100 mL)를 가하여 반응을 종료시켰다. 반응 혼합물을 여과한 후 여액을 에틸아세테이트 (EtOAc)로 추출하고, 증류수로 세척하였다. 유기 용매를 감압 증류하여 얻어진 화합물을 n-헥산: THF (1:3)로 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여, 중간체 (E) (1.64 g, 39 %)를 얻었다. <sup>1</sup>H NMR (300MHz, DMSO-d<sub>6</sub>): 11.28 (s, 2H), 8.30 (s, 2H), 8.05 (d, 2H), 8.00 (m, 4H), 7.36(m, 4H), <sup>13</sup>C NMR (300MHz, DMSO-d<sub>6</sub>): 136.8, 136.5, 127.6, 127.4, 126.9, 121.5, 120.1, 113.5, EI (mass): m/z = 306.

### [0348] 화합물 2의 합성

- [0349] 중간체 (E) (1.0 g, 3.26 mmol)를 톨루엔(100 mL)에 녹인 후에, 3,3'-(5-브로모-1,3-페닐렌)디피리딘(3,3'-(5-bromo-1,3-phenylene)dipyridine) (2.54 g, 8.15 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.17 g, 0.19 mmol), P(t-Bu)₃ (1M in toluene, 0.0.39 mL, 0.39 mmol) 및 NaO¹Bu (1.87 g, 19.5 mmol)을 첨가하고, 100 ℃에서 48시간 동안 교반하였다. TLC(thin layer chromatography)로 반응을 체크한 후 반응이 완료되면 에틸아세테이트로 추출한 후, 증류수로 세척하고, 유기층을 MgSO₄로 건조하고 감압 증류한 후 생성된 화합물을 n-헥산: THF (1:1)로 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여, 화합물 2 (1.47g, 59 %)를 얻었다. ¹H NMR (300MHz, DMSO-d₆) : 9.58 (s, 2H), 8.44 (d, 2H), 8.07 (m, 6H), 7.91-7.83 (m, 12H), 7.60-7.67 (m, 6H), 7.51 (m, 3H), 7.40 (m, 3H), ¹³C NMR (300MHz, DMSO-d₆) : 149.9, 148.2, 144.6, 143.5, 138.5, 136.6, 134.0, 133.2, 133.0, 128.5, 125.1, 124.0, 123.4, 122.5, 120.5, 119.5, 115.4., EI \* (mass): m/z = 766.
- [0350] 화합물 2 이외의 다른 화합물들도 위의 합성 경로 및 원료 물질을 참조하여 기술 분야에 숙련된 이들이 그 합성 방법을 용이하게 인식할 수 있다.

## [0351] 실시예 1

- [0352] ITO/Ag/ITO로 형성된 전면 기판을 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착 장치에 상기 ITO 유리 기판(애노드)을 설치하였다. 상기 ITO 애노드 상부에 HT-D1를 증착하여 100Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 상기 정공 주입층 상부에 HT3을 증착하여 1,100Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상부에 HT21을 증착하여 700Å 두께의 버퍼층을 형성하였다.
- [0353] 상기 버퍼층 상부에 화합물 2(호스트) 및 하기 화합물 PD75(도펀트)를 97 : 3의 중량비로 공증착하여 400Å 두 께의 발광층을 형성하였다. 이후 상기 발광층 상부에 ET1 및 ET-D1을 50 : 50의 중량비로 공증착하여 360Å 두 께의 전자 수송층을 형성하고, 상기 전자 수송층 상부에 ET-D1을 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 다음, 상기 전자 주입층 상부에 Mg 및 Ag를 90 : 10의 중량비로 공증착하여, 110Å 두께의 캐소드를 형성함으로 써, 전면 유기 발광 소자를 제작하였다.



# [0355] 실시예 2

[0354]

[0358]

[0356] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 2 대신 화합물 5를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

# [0357] 실시예 3

발광층 형성시 호스트로서 화합물 2 대신 화합물 6을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

### [0359] <u>비교예 1</u>

[0360] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 2 대신 하기 화합물 A를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0361] <화합물 A>

# [0363] 비교예 2

[0364] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 2 대신 CBP를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0365]

[0362]

## [0366] 비교예 3

[0367] 발광충 형성시 호스트로서 화합물 2 대신 하기 화합물 B를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0368] <화합물 B>

[0369]

## [0370] <u>평가예 1</u>

[0371] 상기 실시예 1 내지 3 및 비교예 1 내지 3에서 제작된 유기 발광 소자의 구동 전압, 전류 밀도, 휘도, 효율 및 수명을 Kethley SMU 236 및 휘도계 PR650을 이용하여 측정하여, 그 결과를 표 1에 나타내었다. 수명은, 유기 발광 소자 구동 후 휘도가 초기 휘도의 3%만큼 감소되는데 걸리는 시간을 측정한 것이다.

## 丑 1

[0372]

	발광층 호스트	구동 전압	휘도	효율	3% 휘도 감소	
		(V)	(cd/m <sup>2</sup> )	(cd/A)	수명(hr@10mA/cm²)	
실시예 1	화합물 2	5.0	3,700	43	250	
실시예 2	화합물 5	4.8	3,700	42	200	
실시예 3	화합물 6	4.0	3,700	46	300	
비교예 1	화합물 A	4.4	3,700	40	10	
비교예 2	CBP	6.0	3,700	25	10	
비교예 3	화합물 B	6.4	3,700	21	5	

[0373] 상기 표 1로부터 실시예 1 내지 3 의 유기 발광 소자의 효율 및 수명은 비교예 1 내지 3의 유기 발광 소자의 효율 및 수명에 비하여 우수함을 확인할 수 있다.

## 부호의 설명

[0374] 10: 유기 발광 소자

110: 제1전극

150: 유기층

190: 제2전극

## 도면

### 도면1

10

190
150
110