



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2010년05월06일  
(11) 등록번호 10-0956051  
(24) 등록일자 2010년04월27일

(51) Int. Cl.  
C09K 11/06 (2006.01) H05B 33/14 (2006.01)  
C07D 471/22 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2005-7020614  
(22) 출원일자(국제출원일자) 2004년05월07일  
심사청구일자 2008년01월24일  
(85) 번역문제출일자 2005년10월29일  
(65) 공개번호 10-2006-0011979  
(43) 공개일자 2006년02월06일  
(86) 국제출원번호 PCT/JP2004/006498  
(87) 국제공개번호 WO 2004/099339  
국제공개일자 2004년11월18일  
(30) 우선권주장  
JP-P-2003-00132257 2003년05월09일 일본(JP)  
JP-P-2004-00088575 2004년03월25일 일본(JP)  
(56) 선행기술조사문헌  
JP59005566 A\*  
KR1020020072215 A  
KR1020000035289 A  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
후지필름 가부시기가이샤  
일본 도쿄도 미나토쿠 니시 아자부 2초메 26방 3  
0고  
(72) 발명자  
이가라시 다츠야  
일본 가나가와켄 미나미야시가라시 나카누마 210  
후지 사진 필름가부시기가이샤 나이  
와타나베 고우스케  
일본 가나가와켄 미나미야시가라시 나카누마 210  
후지 사진 필름가부시기가이샤 나이  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 19 항

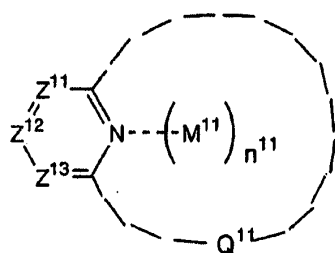
심사관 : 오현식

(54) 유기 전계발광 소자 및 백금 화합물

(57) 요약

한 쌍의 전극 및 전극 사이에 발광 층을 갖는 하나 이상의 유기층을 포함하며, 상기한 유기층은 화학식 (1)로 표시되는 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자:

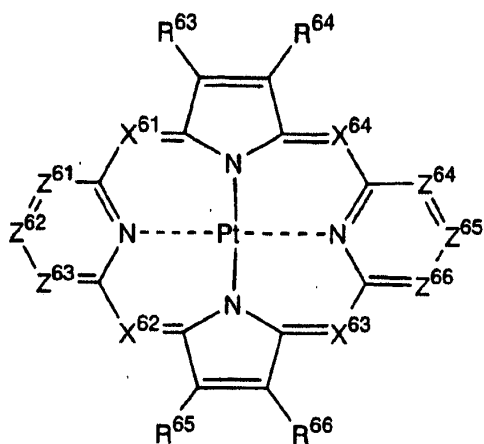
[화학식 1]



[화학식 (1)중, Q<sup>11</sup>는 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 원자단; Z<sup>11</sup> 내지 Z<sup>13</sup>은 각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자; n<sup>11</sup>은 0 또는 1; M<sup>11</sup>은 금속 이온 또는 붕소 이온을 나타내며, 각 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다],

및 화학식 (6)으로 표시되는 화합물:

[화학식 6]



[화학식 (6)중, R<sup>63</sup> 내지 R<sup>66</sup>는 각 수소 원자 또는 치환기; X<sup>61</sup> 내지 X<sup>64</sup>는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자; Z<sup>61</sup> 내지 Z<sup>66</sup>은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다].

(72) 발명자

이치지마 세이지

일본 가나가와켄 미나미아시가라시 나카누마 210

후지 샤신 필름가부시기가이샤 나이

이세 도시히로

일본 가나가와켄 미나미아시가라시 나카누마 210

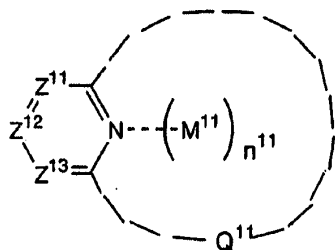
후지 샤신 필름가부시기가이샤 나이

## 특허청구의 범위

### 청구항 1

한 쌍의 전극 및 전극 사이에 발광 층을 갖는 하나 이상의 유기층을 포함하며, 상기한 유기층은 화학식 (1)로 표시되는 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자:

[화학식 1]

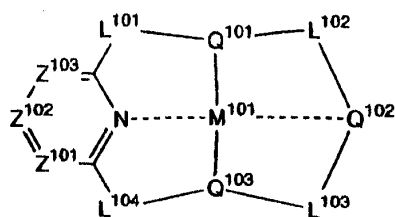


[화학식 (1) 중,  $Q^{11}$ 는 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 원자단;  $Z^{11}$ ,  $Z^{12}$  및  $Z^{13}$ 은 각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자;  $n^{11}$ 은 0 또는 1을 나타내고;  $M^{11}$ 은 금속 이온 또는 붕소 이온을 나타내며, 각 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다].

### 청구항 2

제 1 항에 있어서, 화학식 (1)로 표시되는 화합물이 화학식 (11)로 표시되는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 11]

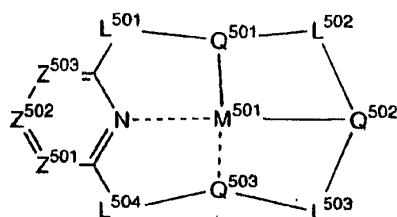


[화학식 (11) 중,  $Z^{101}$ ,  $Z^{102}$  및  $Z^{103}$ 은 각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{101}$ ,  $L^{102}$ ,  $L^{103}$  및  $L^{104}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기(linking group);  $Q^{101}$  및  $Q^{103}$ 은 각 탄소, 질소, 인, 산소 또는 황원자를  $M^{101}$ 의 배위 원자로 포함하는 기;  $Q^{102}$ 은 질소, 인, 산소 또는 황원자를  $M^{101}$ 의 배위 원자로 포함하는 기를 나타내고;  $M^{101}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다].

### 청구항 3

제 1 항에 있어서, 화학식 (1)로 표시되는 화합물이 화학식 (15)로 표시되는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 15]

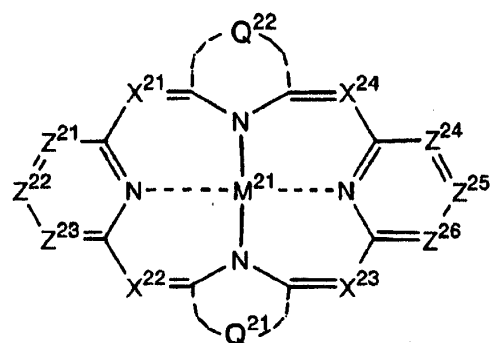


[화학식 (15)중,  $Z^{501}$ ,  $Z^{502}$  및  $Z^{503}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{501}$ ,  $L^{502}$ ,  $L^{503}$  및  $L^{504}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기;  $Q^{501}$  및  $Q^{502}$ 은 각 탄소, 질소, 인, 산소 또는 황원자를  $M^{501}$ 의 배위 원자로 포함하는 기;  $Q^{503}$ 은 질소, 인, 산소 또는 황원자를  $M^{501}$ 의 배위 원자로 포함하는 기를 나타내고;  $M^{501}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다].

#### 청구항 4

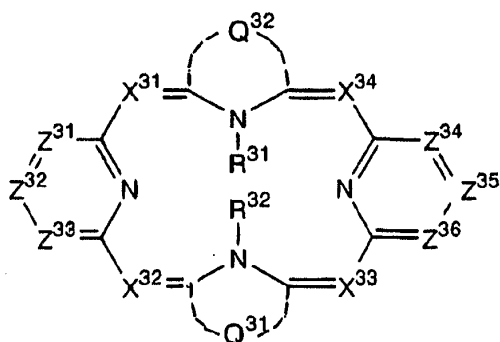
제 2 항에 있어서, 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 화학식 (2) 또는 (3)으로 표시되는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 2]



[화학식 (2)중,  $Q^{21}$  및  $Q^{22}$ 는 각각 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 기;  $X^{21}$ ,  $X^{22}$ ,  $X^{23}$  및  $X^{24}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{21}$ ,  $Z^{22}$ ,  $Z^{23}$ ,  $Z^{24}$ ,  $Z^{25}$  및  $Z^{26}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $M^{21}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다];

[화학식 3]

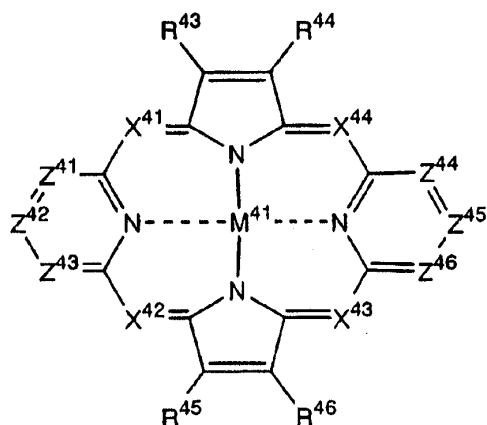


[화학식 (3)중,  $R^{31}$  및  $R^{32}$ 는 각 수소 원자 또는 치환기;  $Q^{31}$  및  $Q^{32}$ 는 각 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 원자단;  $X^{31}$ ,  $X^{32}$ ,  $X^{33}$  및  $X^{34}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{31}$ ,  $Z^{32}$ ,  $Z^{33}$ ,  $Z^{34}$ ,  $Z^{35}$  및  $Z^{36}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다].

#### 청구항 5

제 4 항에 있어서, 화학식 (2)로 표시되는 화합물이 화학식 (4)로 표시되는 화합물인 유기 전계발광 소자;

[화학식 4]

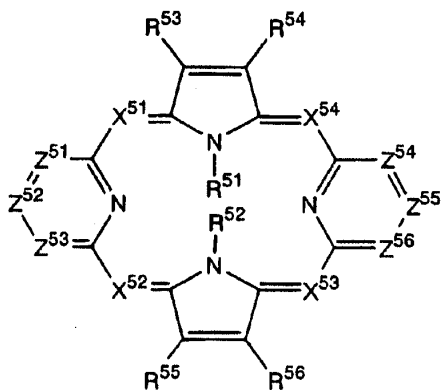


[화학식 (4)중,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$ 는 각 수소 원자 또는 치환기;  $X^{41}$ ,  $X^{42}$ ,  $X^{43}$  및  $X^{44}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{41}$ ,  $Z^{42}$ ,  $Z^{43}$ ,  $Z^{44}$ ,  $Z^{45}$  및  $Z^{46}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $M^{41}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다].

#### 청구항 6

제 4 항에 있어서, 화학식 (3)으로 표시되는 화합물이 화학식 (5)로 표시되는 화합물인 유기 전계발광 소자;

[화학식 5]

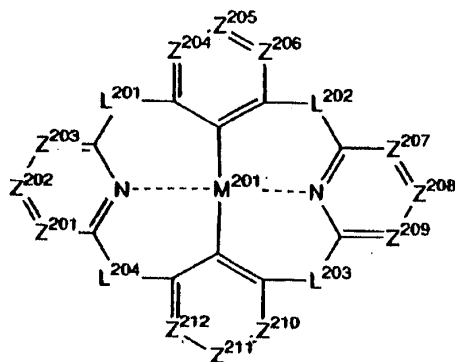


[화학식 (5)중,  $R^{51}$ ,  $R^{52}$ ,  $R^{53}$ ,  $R^{54}$ ,  $R^{55}$  및  $R^{56}$ 는 각 수소 원자 또는 치환기;  $X^{51}$ ,  $X^{52}$ ,  $X^{53}$  및  $X^{54}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{51}$ ,  $Z^{52}$ ,  $Z^{53}$ ,  $Z^{54}$ ,  $Z^{55}$  및  $Z^{56}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다].

#### 청구항 7

제 2 항에 있어서, 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 화학식 (12)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 유기 전계발광 소자:

[화학식 12]

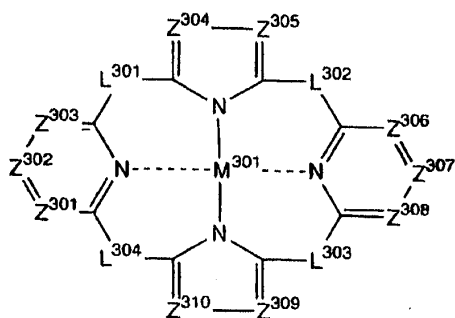


[화학식 (12)중,  $Z^{201}$ ,  $Z^{202}$ ,  $Z^{203}$ ,  $Z^{204}$ ,  $Z^{205}$ ,  $Z^{206}$ ,  $Z^{207}$ ,  $Z^{208}$ ,  $Z^{209}$ ,  $Z^{210}$ ,  $Z^{211}$  및  $Z^{212}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{201}$ ,  $L^{202}$ ,  $L^{203}$  및  $L^{204}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{201}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다].

#### 청구항 8

제 2 항에 있어서, 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 화학식 (13)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 유기 전계발광 소자:

[화학식 13]

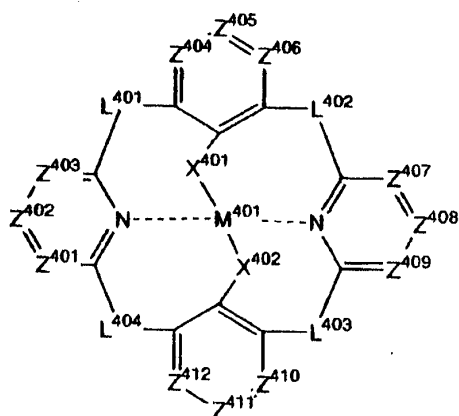


[화학식 (13)중,  $Z^{301}$ ,  $Z^{302}$ ,  $Z^{303}$ ,  $Z^{304}$ ,  $Z^{305}$ ,  $Z^{306}$ ,  $Z^{307}$ ,  $Z^{308}$ ,  $Z^{309}$  및  $Z^{310}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{301}$ ,  $L^{302}$ ,  $L^{303}$  및  $L^{304}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{301}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다].

#### 청구항 9

제 2 항에 있어서, 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 화학식 (14)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 유기 전 계발광 소자:

[화학식 14]

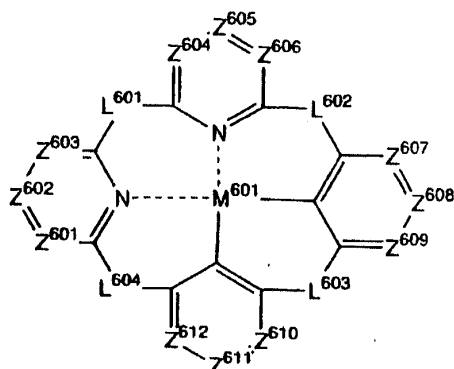


[화학식 (14)중,  $Z^{401}$ ,  $Z^{402}$ ,  $Z^{403}$ ,  $Z^{404}$ ,  $Z^{405}$ ,  $Z^{406}$ ,  $Z^{407}$ ,  $Z^{408}$ ,  $Z^{409}$ ,  $Z^{410}$ ,  $Z^{411}$  및  $Z^{412}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{401}$ ,  $L^{402}$ ,  $L^{403}$  및  $L^{404}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{401}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있고;  $X^{401}$  및  $X^{402}$ 는 각 산소 원자, 치환 또는 비 치환된 질소 원자 또는 황원자를 나타낸다].

#### 청구항 10

제 3 항에 있어서, 화학식 (15)로 표시되는 화합물이 화학식 (16)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 유기 전 계발광 소자:

[화학식 16]

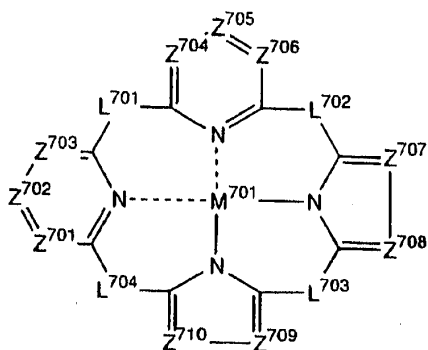


[화학식 (16)중,  $Z^{601}$ ,  $Z^{602}$ ,  $Z^{603}$ ,  $Z^{604}$ ,  $Z^{605}$ ,  $Z^{606}$ ,  $Z^{607}$ ,  $Z^{608}$ ,  $Z^{609}$ ,  $Z^{610}$ ,  $Z^{611}$  및  $Z^{612}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{601}$ ,  $L^{602}$ ,  $L^{603}$  및  $L^{604}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{601}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다].

#### 청구항 11

제 3 항에 있어서, 화학식 (15)로 표시되는 화합물이 화학식 (17)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 유기 전계발광 소자:

[화학식 17]



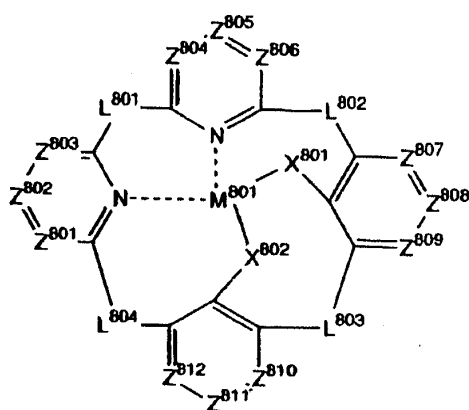
[화학식 (17)중,  $Z^{701}$ ,  $Z^{702}$ ,  $Z^{703}$ ,  $Z^{704}$ ,  $Z^{705}$ ,  $Z^{706}$ ,  $Z^{707}$ ,  $Z^{708}$ ,  $Z^{709}$  및  $Z^{710}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{701}$ ,  $L^{702}$ ,  $L^{703}$  및  $L^{704}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{701}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있다].

#### 청구항 12

제 3 항에 있어서, 화학식 (15)로 표시되는 화합물이 화학식 (18)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 유기 전계발광 소자:



[화학식 18]



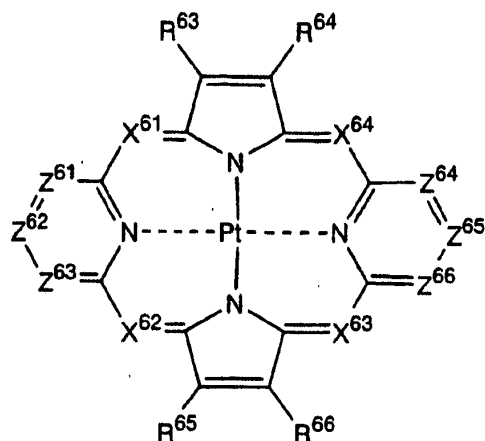
[화학식 (18)중,  $Z^{801}$ ,  $Z^{802}$ ,  $Z^{803}$ ,  $Z^{804}$ ,  $Z^{805}$ ,  $Z^{806}$ ,  $Z^{807}$ ,  $Z^{808}$ ,  $Z^{809}$ ,  $Z^{810}$ ,  $Z^{811}$  및  $Z^{812}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{801}$ ,  $L^{802}$ ,  $L^{803}$  및  $L^{804}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{801}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 하나 이상의 리간드를 가질 수 있고;  $X^{801}$  및  $X^{802}$ 는 각 산소 원자, 치환 또는 비 치환된 질소 원자 또는 황원자를 나타낸다].

### 청구항 13

제 1 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서, 유기층이 하나 이상의 발광 층 및 정공 주입층인 유기 전계발광 소자.

### 청구항 14

화학식 (6)으로 표시되는 화합물:



[화학식 (6)중,  $R^{63}$ ,  $R^{64}$ ,  $R^{65}$  및  $R^{66}$ 는 각각 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;  $X^{61}$ ,  $X^{62}$ ,  $X^{63}$  및  $X^{64}$ 는 각각 독립적으로 CR (여기서, R 은 치환기), CH 또는 N 을 나타내고;  $Z^{61}$ ,  $Z^{62}$ ,  $Z^{63}$ ,  $Z^{64}$ ,  $Z^{65}$  및  $Z^{66}$ 은 각각 독립적으로 CR (여기서, R 은 치환기), CH 또는 N 을 나타내되, 단,  $Z^{61}$ ,  $Z^{62}$  및  $Z^{63}$  중 하나 이상은 질소 원자이고,  $Z^{64}$ ,  $Z^{65}$  및  $Z^{66}$  중 하나 이상은 질소 원자이다].

### 청구항 15

제 1 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (1) 내지 (5) 및 (11) 내지 (18) 중 어느 하나로 표시

되는 화합물이 인광을 방출하는 유기 전계발광 소자.

#### 청구항 16

제 1 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서, 발광층이 하나 이상의 기지 재료(host material), 및 화학식 (1) 내지 (5) 및 (11) 내지 (18) 중 어느 하나로 표시되는 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자.

#### 청구항 17

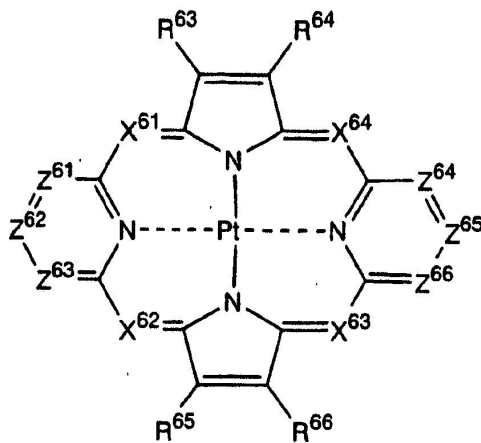
제 16 항에 있어서, 발광층 내의 기지 재료가 착물인 유기 전계발광 소자.

#### 청구항 18

제 16 항에 있어서, 발광층이 두 개 이상의 기지 재료를 포함하는 유기 전계발광 소자.

#### 청구항 19

하기의 화학식으로 표시되는 화합물:



[식 중,  $R^{63}$ ,  $R^{64}$ ,  $R^{65}$  및  $R^{66}$ 는 각각 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;  $X^{61}$ ,  $X^{62}$ ,  $X^{63}$  및  $X^{64}$ 는 각각 독립적으로 CR (여기서, R 은 치환기) 또는 CH 을 나타내고;  $Z^{61}$ ,  $Z^{62}$ ,  $Z^{63}$ ,  $Z^{64}$ ,  $Z^{65}$  및  $Z^{66}$ 은 각각 독립적으로 CR (여기서, R 은 치환기), CH 또는 N 을 나타낸다].

### 명세서

#### 기술분야

[0001] 본 발명은 발광 소자, 특히 유기 전계발광 소자(이후 때로는 EL 소자라고 지칭) 및 발광 소자에 유용한 백금 화합물에 관련된 것이다.

#### 배경기술

[0002] 최근, 다양한 타입의 표시(display) 소자가 활발하게 연구 및 개발되고 있다. 이 중, 많은 관심이 유기 전계발광 (EL) 소자에 집중되고 있다. 유기 EL 소자는 낮은 공급전압(applied voltage)하에서도 높은 휘도의 빛을 발할 수 있는 유망한 표시 소자이기 때문이다. 유기 EL 소자의 중요한 특징은 수명(내구력) 등이고, 유기 EL 소자의 수명을 추가적으로 연장시키는 연구가 진행되어 왔다. 수명을 연장시키는 수단으로, CuPc (구리 프탈로시아닌)를 포함하는 정공주입층으로 이루어진 타입의 발광 소자가 공지되어 있다(예를 들어, JP-A-57-51781("JP-A"는 미심사 공개된 일본 특허 출원을 의미) 및 Applied Physics Letters, 15, 69, 1996에 기재된 바와 같이). 그러나, 이러한 발광 소자에서의 양자 효율은 아직 낮다. 따라서, 추가적으로 개선된 소자에 대한 수요가 존재한다.

[0003] 반면, 최근 유기 EL 소자의 개발을 위해, 다양한 연구들이 소자의 외부 양자 효율을 개선하는 것을 목표로 삼아

왔다. 특히, 관측은 인광 물질, 예컨대 트리스-페닐피리딘 이리듐 착물(WO 00/070655 참고) 및 테트라덴테이트 백금 착물(예를 들어, 옥타에틸포르피린 백금 착물)(미국 특허 제 6,303,238 B1 및 제 6,653,564 B1 참고)을 함유하는 발광 소자에 초점을 두고 있으며, 그 이유는 이러한 소자들로부터 높은-외부 양자 효율을 얻을 수 있기 때문이다. 그러나, 이러한 인광 재료 및 인광 물질을 포함하는 소자들의 수명 연장이 요구되어 왔다. 또한, 통상적인 테트라덴테이트 백금 착물(미국 특허 제 6,303,238 B1 및 제 6,653,564 B1)은 빛 방출이 주황색에서 붉은색까지의 색 범위에 한정된다는 문제점을 갖고, 이로 인해 완전색 및 다색의 표시 사용에 필요한 청색에서 녹색범위의 단파에서의 빛 방출을 얻기 힘들다.

### 발명의 상세한 설명

[0004]

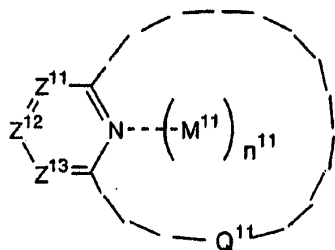
본 발명에 따르면, 하기와 같은 수단이 제공되어 있다:

[0005]

(1) 한 쌍의 전극 및 전극 사이에 발광 층을 포함하는 하나 이상의 유기층으로 이루어지며, 이 유기층은 화학식 (1)로 표시되는 하나 이상의 화합물을 포함하는, 유기 전계발광 소자:

### 화학식 1

[0006]



[0007]

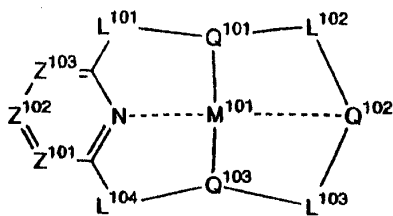
[화학식 (1)중, Q<sup>11</sup>는 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 원자단; Z<sup>11</sup>, Z<sup>12</sup> 및 Z<sup>13</sup>은 각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자; n<sup>11</sup>은 0 또는 1; M<sup>11</sup>은 금속 이온 또는 붕소 이온을 나타내며, 각 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다].

[0008]

(2) 화학식 (1)로 표시되는 화합물이 화학식 (11)로 표시되는 화합물인 항목 (1)에서 설명한 유기 전계발광 소자:

### 화학식 11

[0009]



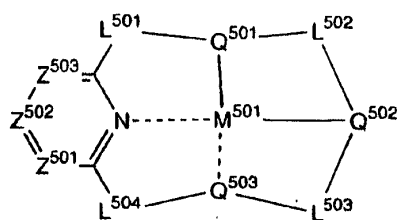
[0010]

[화학식 (11)중, Z<sup>101</sup>, Z<sup>102</sup> 및 Z<sup>103</sup>은 각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자; L<sup>101</sup>, L<sup>102</sup>, L<sup>103</sup> 및 L<sup>104</sup>는 각 단일 결합 또는 연결기; Q<sup>101</sup> 및 Q<sup>103</sup>은 각 탄소, 질소, 인, 산소 또는 황원자를 각각 M<sup>101</sup>의 배위 원자로 포함하는 기를 나타내고; M<sup>101</sup>은 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다].

[0011]

(3) 화학식 (1)로 표시되는 화합물이 화학식 (15)로 표시되는 화합물인 항목 (1)에서 설명된 유기 전계발광 소자:

# 화학식 15



[0012]

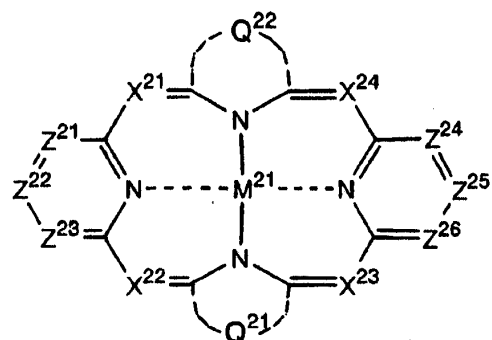
[0013]

[화학식 (15)중,  $Z^{501}$ ,  $Z^{502}$  및  $Z^{503}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{501}$ ,  $L^{502}$ ,  $L^{503}$  및  $L^{504}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기;  $Q^{501}$  및  $Q^{502}$ 은 각 탄소, 질소, 인, 산소 또는 황원자를 각각  $M^{501}$ 의 배위 원자로 포함하는 기;  $Q^{503}$ 은 질소, 인, 산소 또는 황원자를  $M^{501}$ 의 배위 원자로 포함하는 기를 나타내고;  $M^{501}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다].

[0014]

(4) 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 화학식 (2) 또는 (3)으로 표시되는 화합물인 항목 (2)에 설명된 유기 전 계발광 소자:

# 화학식 2

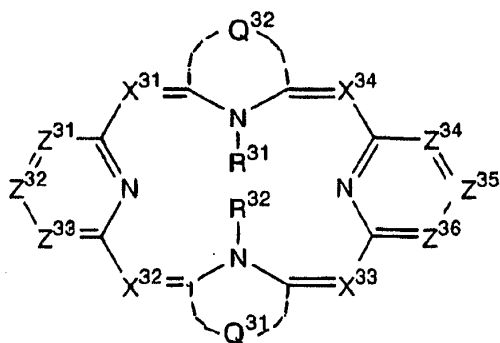


[0015]

[0016]

[화학식 (2)중,  $Q^{21}$  및  $Q^{22}$ 는 각각 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 원자단;  $X^{21}$ ,  $X^{22}$ ,  $X^{23}$  및  $X^{24}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{21}$ ,  $Z^{22}$ ,  $Z^{23}$ ,  $Z^{24}$ ,  $Z^{25}$  및  $Z^{26}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $M^{21}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다];

### 화학식 3

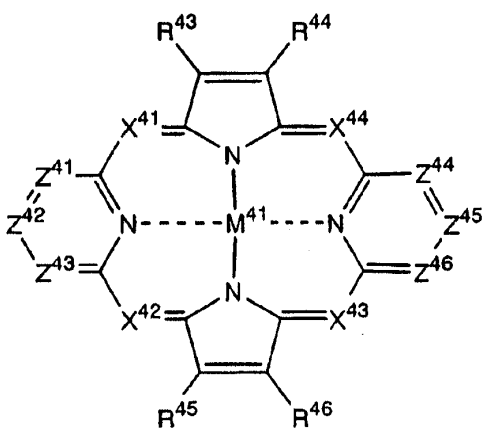


[0017]

[0018] [화학식 (3)중,  $R^{31}$  및  $R^{32}$ 는 각 수소 원자 또는 치환기;  $Q^{31}$  및  $Q^{32}$ 는 각각 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 원자단;  $X^{31}$ ,  $X^{32}$ ,  $X^{33}$  및  $X^{34}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{31}$ ,  $Z^{32}$ ,  $Z^{33}$ ,  $Z^{34}$ ,  $Z^{35}$  및  $Z^{36}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다].

[0019] (5) 화학식 (2)로 표시되는 화합물이 화학식 (4)로 표시되는 화합물인 항목 (4)에 설명된 유기 전계발광 소자:

### 화학식 4

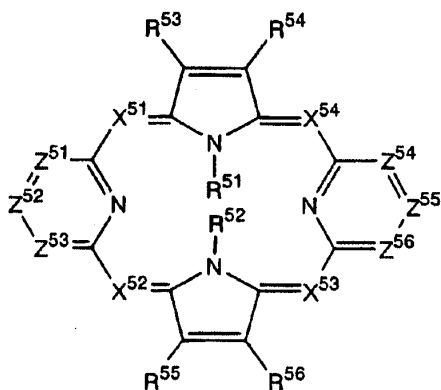


[0020]

[0021] [화학식 (4)중,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$ 는 각 수소 원자 또는 치환기;  $X^{41}$ ,  $X^{42}$ ,  $X^{43}$  및  $X^{44}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{41}$ ,  $Z^{42}$ ,  $Z^{43}$ ,  $Z^{44}$ ,  $Z^{45}$  및  $Z^{46}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $M^{41}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다].

[0022] (6) 화학식 (3)로 표시되는 화합물이 화학식 (5)로 표시되는 화합물인 항목 (4)에 설명된 유기 전계발광 소자:

## 화학식 5



[0023]

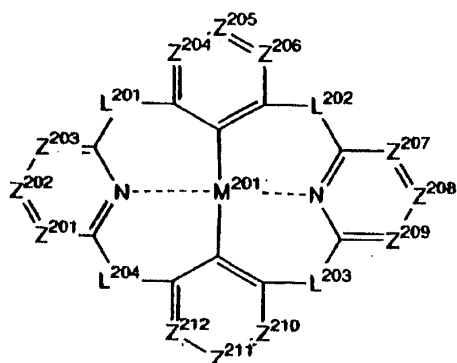
[0024]

[화학식 (5)중,  $R^{51}$ ,  $R^{52}$ ,  $R^{53}$ ,  $R^{54}$ ,  $R^{55}$  및  $R^{56}$ 는 각 수소 원자 또는 치환기;  $X^{51}$ ,  $X^{52}$ ,  $X^{53}$  및  $X^{54}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{51}$ ,  $Z^{52}$ ,  $Z^{53}$ ,  $Z^{54}$ ,  $Z^{55}$  및  $Z^{56}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다].

[0025]

(7) 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 화학식 (12)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 항목 (2)에 설명된 유기 전계발광 소자:

## 화학식 12



[0026]

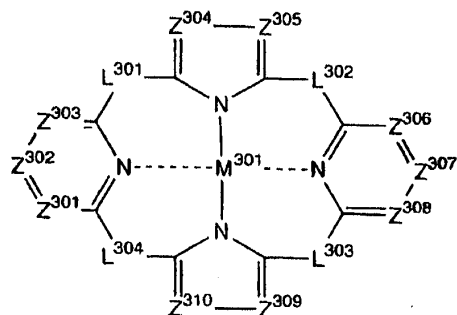
[0027]

[화학식 (12)중,  $Z^{201}$ ,  $Z^{202}$ ,  $Z^{203}$ ,  $Z^{204}$ ,  $Z^{205}$ ,  $Z^{206}$ ,  $Z^{207}$ ,  $Z^{208}$ ,  $Z^{209}$ ,  $Z^{210}$ ,  $Z^{211}$  및  $Z^{212}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{201}$ ,  $L^{202}$ ,  $L^{203}$  및  $L^{204}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{201}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다].

[0028]

(8) 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 화학식 (13)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 항목 (2)에 설명된 유기 전계발광 소자:

### 화학식 13



[0029]

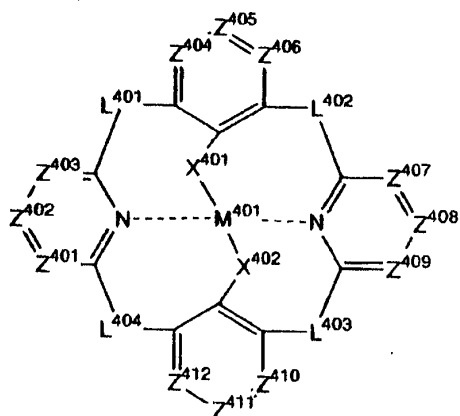
[0030]

[화학식 (13)중,  $Z^{301}$ ,  $Z^{302}$ ,  $Z^{303}$ ,  $Z^{304}$ ,  $Z^{305}$ ,  $Z^{306}$ ,  $Z^{307}$ ,  $Z^{308}$ ,  $Z^{309}$  및  $Z^{310}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{301}$ ,  $L^{302}$ ,  $L^{303}$  및  $L^{304}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{301}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다].

[0031]

(9) 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 화학식 (14)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 항목 (2)에 설명된 유기 전계발광 소자:

### 화학식 14



[0032]

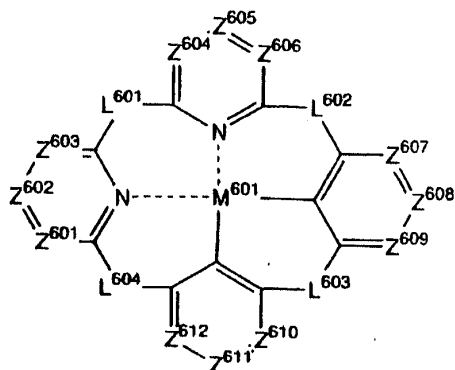
[0033]

[화학식 (14)중,  $Z^{401}$ ,  $Z^{402}$ ,  $Z^{403}$ ,  $Z^{404}$ ,  $Z^{405}$ ,  $Z^{406}$ ,  $Z^{407}$ ,  $Z^{408}$ ,  $Z^{409}$ ,  $Z^{410}$ ,  $Z^{411}$  및  $Z^{412}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{401}$ ,  $L^{402}$ ,  $L^{403}$  및  $L^{404}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{401}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다;  $X^{401}$  및  $X^{402}$ 는 각 산소 원자, 치환 또는 비 치환된 질소 원자 또는 황원자를 나타낸다].

[0034]

(10) 화학식 (15)로 표시되는 화합물이 화학식 (16)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 항목 (3)에 설명된 유기 전계발광 소자:

## 화학식 16



[0035]

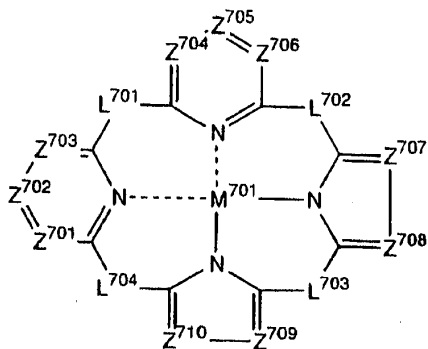
[0036]

[화학식 (16)중,  $Z^{601}$ ,  $Z^{602}$ ,  $Z^{603}$ ,  $Z^{604}$ ,  $Z^{605}$ ,  $Z^{606}$ ,  $Z^{607}$ ,  $Z^{608}$ ,  $Z^{609}$ ,  $Z^{610}$ ,  $Z^{611}$  및  $Z^{612}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{601}$ ,  $L^{602}$ ,  $L^{603}$  및  $L^{604}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{601}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다].

[0037]

(11) 화학식 (15)로 표시되는 화합물이 화학식 (17)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 항목 (3)에 설명된 유기 전계발광 소자:

## 화학식 17



[0038]

[0039]

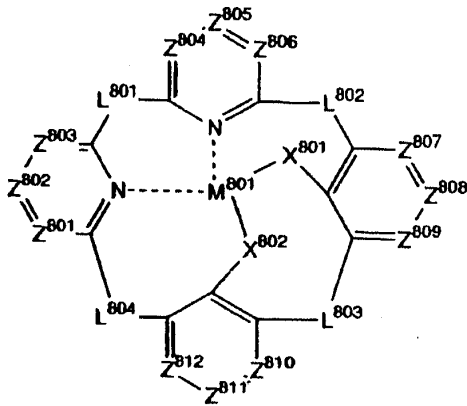
[화학식 (17)중,  $Z^{701}$ ,  $Z^{702}$ ,  $Z^{703}$ ,  $Z^{704}$ ,  $Z^{705}$ ,  $Z^{706}$ ,  $Z^{707}$ ,  $Z^{708}$ ,  $Z^{709}$  및  $Z^{710}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{701}$ ,  $L^{702}$ ,  $L^{703}$  및  $L^{704}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{701}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다].

[0040]

(12) 화학식 (15)로 표시되는 화합물이 화학식 (18)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머인 항목 (3)에 설명된 유기 전계발광 소자:



화학식 18

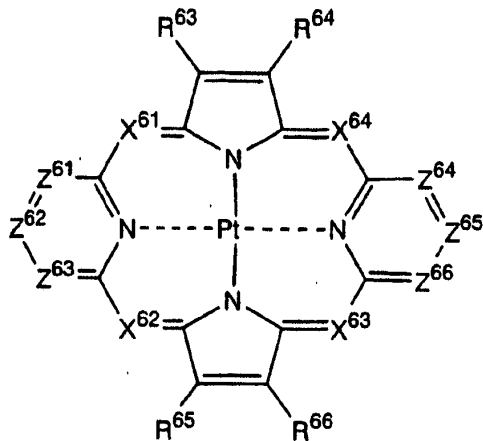


[화학식 (18)중,  $Z^{801}$ ,  $Z^{802}$ ,  $Z^{803}$ ,  $Z^{804}$ ,  $Z^{805}$ ,  $Z^{806}$ ,  $Z^{807}$ ,  $Z^{808}$ ,  $Z^{809}$ ,  $Z^{810}$ ,  $Z^{811}$  및  $Z^{812}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $L^{801}$ ,  $L^{802}$ ,  $L^{803}$  및  $L^{804}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타내고;  $M^{801}$ 는 금속 이온을 나타내며 추가적으로 리간드(들)를 가질 수 있다;  $X^{801}$  및  $X^{802}$ 는 각 산소 원자, 치환 또는 비 치환 질소 원자 또는 황원자를 나타낸다].

(13) 유기층이 하나 이상의 발광층 및 양공 주입층인 항목 (1) 내지 (12)중 어느 하나에서 설명된 유기 전계발광 소자.

(14) 화학식 (6)으로 표시되는 화합물:

화학식 6



[화학식 (6)중,  $R^{63}$ ,  $R^{64}$ ,  $R^{65}$  및  $R^{66}$ 는 각 수소 원자 또는 치환기;  $X^{61}$ ,  $X^{62}$ ,  $X^{63}$  및  $X^{64}$ 는 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자;  $Z^{61}$ ,  $Z^{62}$ ,  $Z^{63}$ ,  $Z^{64}$ ,  $Z^{65}$  및  $Z^{66}$ 은 각 치환 또는 비 치환 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다].

(15) 화학식 (1) 내지 (17)로 표시되는 화합물이 인광을 방출하는, 항목 (1) 내지 (13)중 어느 하나에서 설명된 유기 전계발광 소자.

(16) 발광(빛-방출)층이 하나 이상의 기지 재료(host material) 및 화학식 (1) 내지 (13)중 어느 하나로 표시되는 하나 이상의 화합물을 포함하는, 항목 (1) 내지 (13) 및 (15)중 어느 하나에서 설명된 유기 전계발광 소자.

(17) 빛-방출층 내의 기지 재료가 착물인, 항목 (16)에서 설명된 유기 전계발광 소자.

- [0050] (18) 빛-방출층이 두 개 이상의 기지 재료를 포함하는, 항목 (16) 또는 (17)에서 설명된 유기 전계발광 소자.
- [0051] 본 발명의 기타 및 추가적 특징 및 장점은 하기 명세서에 더 완전히 나타날 것이다.
- [0052] 본 발명의 수행을 위한 최량의 형태
- [0053] 본 발명은 하기에 자세히 설명될 것이다.
- [0054] 첫 번째로 화학식 (1)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0055]  $Q^{11}$ 은  $Q^{11}$ 에 연결된 두 탄소 원자 및 이 탄소 원자에 직접 연결된 질소 원자와 함께 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 원자군을 나타낸다.  $Q^{11}$ 으로 형성된 질소-포함 헤테로 고리의 고리 원(member)의 수는 특별히 제한되지 않지만, 바람직하게 12 - 20범위, 더 바람직하게 14 - 16범위, 가장 바람직하게 16이다.
- [0056]  $Z^{11}$ ,  $Z^{12}$  및  $Z^{13}$ 은 각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다.  $Z^{11}$ ,  $Z^{12}$  및  $Z^{13}$ 의 조합으로써,  $Z^{11}$ ,  $Z^{12}$  및  $Z^{13}$ 중 하나 이상이 질소 원자인 것이 바람직하다. 탄소 원자에 대한 치환기의 예는 알킬기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 10 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 메틸, 에틸, 이소-프로필, tert-부틸, n-옥틸, n-데실, n-헥사데실, 시클로프로필, 시클로펜틸, 시클로헥실), 알케닐기(바람직하게 2 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 2 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 2 - 10 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 비닐, 알릴, 2-부테닐, 3-펜티닐), 알키닐기(바람직하게 2 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 2 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 2 - 10 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 프로파길, 3-펜티닐), 아릴기(바람직하게 6 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 6 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 6 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 페닐, p-메틸페닐, 나프틸, 안트라닐), 아미노기(바람직하게 0 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 0 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 0 - 10 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 아미노, 메틸아미노, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 디벤질아미노, 디페닐아미노, 디톨릴아미노), 알콕시기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 10 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 메톡시, 에톡시, 부톡시, 2-에틸헥실옥시), 아릴옥시기(바람직하게 6 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 6 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 6 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 페닐옥시, 1-나프틸옥시, 2-나프틸옥시), 헤테로 고리 옥시기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 피리딜옥시, 피라질옥시, 피리미딜옥시, 퀴놀릴옥시), 아실기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 아세틸, 벤조일, 포르밀, 피발로일), 알콕시카르보닐기(바람직하게 2 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 2 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 2 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 메톡시카르보닐, 에톡시카르보닐), 아릴옥시카르보닐기(바람직하게 7 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 7 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 7 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 페닐옥시카르보닐), 아실옥시기(바람직하게 2 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 2 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 2 - 10 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 아세톡시, 벤조일옥시), 아실아미노기(바람직하게 2 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 2 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 2 - 10 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 아세틸아미노, 벤조일아미노), 알콕시카르보닐아미노기(바람직하게 2 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 2 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 2 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 메톡시카르보닐아미노), 아릴옥시카르보닐기(바람직하게 7 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 7 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 7 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 페닐옥시카르보닐아미노), 설포닐아미노기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 메탄설포닐아미노, 벤젠설포닐아미노), 설파모일기(바람직하게 0 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 0 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 0 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 설파모일, 메틸설파모일, 디메틸설파모일, 페닐설파모일), 카바모일기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 카바모일, 메틸카바모일, 디에틸카바모일, 페닐카바모일), 알킬 티오기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 메틸 티오, 에틸티오), 아릴 티오기(바람직하게 6 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 6 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 6 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 페닐티오), 헤테로 고리 티오기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 피리딜 티오, 2-벤즈이미다졸릴 티오, 2-벤즈옥사졸릴 티오, 2-벤즈티아졸릴 티오), 설포닐기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 메실, 토실), 설피닐기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 메탄설피닐, 벤젠설피닐), 우레이도기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바

람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 우레이도, 메틸우레이도, 페닐우레이도), 인산 아미도기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 20 탄소 원자, 가장 바람직하게 1 - 12 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 디에틸 포스포아미도, 페닐 포스포아미도), 히드록시기, 머캡토기, 할로겐 원자(예를 들어, 불소, 염소, 브롬, 요오드), 시아노기, 설포기, 카르복시기, 니트로기, 히드록사민산, 설피노기, 히드라지노기, 이미노기, 헤테로시클릭기(바람직하게 1 - 30 탄소 원자, 더 바람직하게 1 - 12 탄소 원자 및 질소, 산소 및 황과 같은 헤테로 원자를 포함하는, 바람직하게 헤테로 아릴기인, 특히 예를 들어, 이미다졸릴, 피리딜, 퀴놀린, 푸릴, 티에닐, 피페리딜, 모폴리노, 벤즈옥사졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈티아졸릴, 카바졸릴, 아제피닐인 헤테로 아릴기), 실릴기(바람직하게 3 - 40 탄소 원자, 더 바람직하게 3 - 30 탄소 원자, 가장 바람직하게 3 - 24 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 트리메틸실릴, 트리페닐실릴), 및 실릴옥시기(바람직하게 3 - 40 탄소 원자, 더 바람직하게 3 - 30 탄소 원자, 가장 바람직하게 3 - 24 탄소 원자를 갖는, 예를 들어 트리메틸실릴옥시, 트리페닐실릴옥시)를 포함한다. 이러한 치환기들은 추가적으로, 예를 들어 상기한 탄소에 대한 치환기들로 치환될 수 있다.

[0057] 질소 원자에 대한 치환기의 예는 각각 탄소에 대한 치환기로 예시된 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아실기(예를 들어, 아세틸, 벤조일, 트리프로우로아세틸) 및 설포닐기(예를 들어, 메탄설포닐, 펜타플루오로벤젠설포닐)을 포함한다. 이러한 치환기들은 추가적인 치환기(예를 들어, 상기한 탄소 원자에 대한 치환기들)들을 가질 수 있다.

[0058]  $M^{11}$ 는 금속이온 또는 붕소 이온을 나타내며, 이것은 각각 추가적인 리간드(들)를 가질 수 있다.  $M^{11}$ 는 바람직하게 추가적으로 리간드를 가질 수 있는 금속 이온, 더 바람직하게 추가적인 리간드를 갖지 않는 금속 이온이다. 금속이온은 특별히 제한되지 않으나, 2가 또는 3가 금속이온이 바람직하다. 2가 또는 3가 금속이온으로는, 바람직하게 코발트, 마그네슘, 아연, 팔라듐, 니켈, 구리, 백금, 납, 알루미늄, 이리듐, 유로피움, 레늄, 로듐 및 루테튬 이온이다. 이 중, 더 바람직한것은 코발트, 마그네슘, 아연, 팔라듐, 니켈, 구리, 백금 및 납, 이보다 더 바람직하게 구리 및 백금 이온이다. 백금 이온이 가장 바람직하다.  $n^{11}$ 이 1일 때,  $M^{11}$ 는  $Q^{11}$ 에 포함된 원자(들)에 연결될 수도 또는 안 될 수도 있으나, 바람직하게  $M^{11}$ 는 상기 원자(들)에 연결된다.

[0059] 상기한 (추가적인) 리간드는  $M^{11}$ 에 의해서 추가적으로 반대될 수 있고, 특별히 제한되지는 않는다, 그러나 바람직하게 모노덴테이트 또는 비(bi)덴테이트 리간드, 더 바람직하게 비덴테이트 리간드이다. 배위 원자는 특별히 제한되지 않으나, 바람직하게 산소, 황, 질소, 탄소 및 인 원자, 더 바람직하게 산소, 질소 및 탄소 원자, 가장 바람직하게 산소 및 질소 원자이다.

[0060]  $n^{11}$ 은 바람직하게 0 또는 1이고, 더 바람직하게 1이다.

[0061] 화학식 (1)로 표시되는 화합물들은 바람직하게 화학식 (2) 또는 (3)으로 표시되는 것, 또는 그 토토머(화학식 (2)로 표시되는 것 또는 그 토토머들이 더 바람직하다); 더 바람직하게 화학식 (4) 또는 (5)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머들(화학식 (4)로 표시되는 것 또는 그 토토머들이 더 바람직하다)이다.

[0062] 추가적으로, 화학식 (1)로 표시되는 화합물로서, 화학식 (11) 또는 (15)로 표시되는 화합물 또한 바람직하다. 화학식 (11)로 표시되는 화합물로서, 화학식 (12)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머, 화학식 (13)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머, 화학식 (14)로 표시되는 화합물이 바람직하다고 예시되었다; 더 바람직하게 화학식 (12)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머 및 화학식 (13)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머이다; 가장 바람직하게 화학식 (12)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머이다.

[0063] 화학식 (15)로 표시되는 화합물로서, 화학식 (16)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머, 화학식 (17)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머, 화학식 (18)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머가 바람직하다고 설명되었다; 더 바람직하게 화학식 (16)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머, 화학식 (17)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머이다; 가장 바람직하게 화학식 (16)로 표시되는 화합물 또는 그 토토머이다.

[0064] 다음, 화학식 (2)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.

[0065]  $Z^{21}$ ,  $Z^{22}$ ,  $Z^{23}$ ,  $Z^{24}$ ,  $Z^{25}$ ,  $Z^{26}$  및  $M^{21}$ 은 상기한  $Z^{11}$ ,  $Z^{12}$ ,  $Z^{13}$ ,  $Z^{11}$ ,  $Z^{12}$ ,  $Z^{13}$  및  $M^{11}$ 과 각각, 같은 바람직한 범위에서, 같은 의미를 가진다.

- [0066]  $Q^{21}$  및  $Q^{22}$ 는 질소-포함 헤테로 고리를 형성하는 기를 나타낸다.  $Q^{21}$  및  $Q^{22}$ 로 형성된 질소-포함 헤테로 고리는 특별히 제한되지 않으나, 바람직하게 피롤 고리, 이미다졸 고리, 트리아졸 고리, 이 고리 중 하나 이상을 포함하는 축합 고리(예를 들어, 벤조피롤) 및 그 토토머(예를 들어, 하기에서 설명될 바와 같이 화학식 (4)에서,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$ 를 갖는 질소-포함 5원 고리가 피롤의 토토머라고 정의되어 있다), 더 바람직하게 피롤 고리 및 피롤 고리를 포함하는 축합 고리(예를 들어 벤조피롤)이다.
- [0067]  $X^{21}$ ,  $X^{22}$ ,  $X^{23}$  및  $X^{24}$ 는 각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자이고, 바람직하게 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자이고, 더 바람직하게 비 치환된 질소 원자이다.
- [0068] 다음, 화학식 (3)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0069]  $Q^{31}$ ,  $Q^{32}$ ,  $Z^{31}$ ,  $Z^{32}$ ,  $Z^{33}$ ,  $Z^{34}$ ,  $Z^{35}$ ,  $Z^{36}$ ,  $X^{31}$ ,  $X^{32}$ ,  $X^{33}$  및  $X^{34}$ 는 화학식 (2)내의 상기한  $Q^{21}$ ,  $Q^{22}$ ,  $Z^{21}$ ,  $Z^{22}$ ,  $Z^{23}$ ,  $Z^{24}$ ,  $Z^{25}$ ,  $Z^{26}$ ,  $X^{21}$ ,  $X^{22}$ ,  $X^{23}$  및  $X^{24}$ 와 각각, 같은 바람직한 범위에서 같은 정의를 가진다.
- [0070]  $R^{31}$  및  $R^{32}$ 는 각 수소 원자 또는 치환기이며, 수소 원자가 바람직하다. 치환기로는, 예를 들어, 상기한 화학식 (1)내의  $Z^{11}$ ,  $Z^{12}$  및  $Z^{13}$ 가 탄소 원자 일 때, 탄소에 대한 치환기의 예로써 예시되어 있는 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아실기 (예를 들어, 아세틸, 벤조일, 트리플루오로아세틸) 및 설폰닐기(예를 들어, 메탄 설폰닐, 펜타플루오로벤젠설폰닐)가 설명되어 있다. 이러한 치환기들은 각각 추가적으로 치환기(들)를 가질 수 있다(예를 들어, 상기한 탄소에 대한 치환기들중 임의의 것).
- [0071] 다음, 화학식 (4)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0072]  $Z^{41}$ ,  $Z^{42}$ ,  $Z^{43}$ ,  $Z^{44}$ ,  $Z^{45}$ ,  $Z^{46}$ ,  $X^{41}$ ,  $X^{42}$ ,  $X^{43}$ ,  $X^{44}$  및  $M^{41}$ 는 화학식 (2)의 상기한  $Z^{21}$ ,  $Z^{22}$ ,  $Z^{23}$ ,  $Z^{24}$ ,  $Z^{25}$ ,  $Z^{26}$ ,  $X^{21}$ ,  $X^{22}$ ,  $X^{23}$ ,  $X^{24}$  및  $M^{21}$ 와 각각, 같은 바람직한 범위에서 같은 정의를 가진다.
- [0073]  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$ 는 각각 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기로는, 상기한 화학식 (1)에서  $Z^{11}$  또는  $Z^{12}$ 와 관련하여, 탄소 원자에 대한 치환기로 예시한 기들을 언급할 수 있다.
- [0074]  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$ 는 각각 바람직하게 수소 원자 또는 상기한 화학식 (1)에서  $Z^{11}$ ,  $Z^{12}$ 에 대한 치환기로 예시한 알킬기 또는 아릴기, 또는  $R^{43}$  및  $R^{44}$  또는  $R^{45}$  및  $R^{46}$ 가 서로 결합 될 때 고리 구조를 형성하는 기(예를 들어, 벤젠-축합 고리, 피리딘-축합 고리); 더 바람직하게 알킬기, 아릴기 또는  $R^{43}$  및  $R^{44}$  또는  $R^{45}$  및  $R^{46}$ 가 서로 결합 될 때 고리 구조를 형성하는 기; 가장 바람직하게  $R^{43}$  및  $R^{44}$  또는  $R^{45}$  및  $R^{46}$ 가 서로 결합 될 때 고리 구조를 형성하는 기(예를 들어 벤젠-축합 고리, 피리딘-축합 고리)이다.
- [0075] 다음, 화학식 (5)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0076]  $R^{51}$ ,  $R^{52}$ ,  $R^{53}$ ,  $R^{54}$ ,  $R^{55}$ ,  $R^{56}$ ,  $Z^{51}$ ,  $Z^{52}$ ,  $Z^{53}$ ,  $Z^{54}$ ,  $Z^{55}$ ,  $Z^{56}$ ,  $X^{51}$ ,  $X^{52}$ ,  $X^{53}$  및  $X^{54}$ 는 화학식 (3) 및 (4)내의 상기한  $R^{31}$ ,  $R^{32}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$ ,  $Z^{41}$ ,  $Z^{42}$ ,  $Z^{43}$ ,  $Z^{44}$ ,  $Z^{45}$ ,  $Z^{46}$ ,  $X^{41}$ ,  $X^{42}$ ,  $X^{43}$  및  $X^{44}$ 와 각각, 같은 바람직한 범위에서 같은 정의를 가진다.
- [0077] 다음, 화학식 (6)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0078]  $R^{63}$ ,  $R^{64}$ ,  $R^{65}$ ,  $R^{66}$ ,  $Z^{61}$ ,  $Z^{62}$ ,  $Z^{63}$ ,  $Z^{64}$ ,  $Z^{65}$ ,  $Z^{66}$ ,  $X^{61}$ ,  $X^{62}$ ,  $X^{63}$  및  $X^{64}$ 는 화학식 (4)내의 상기한  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$ ,  $Z^{41}$ ,  $Z^{42}$ ,  $Z^{43}$ ,  $Z^{44}$ ,  $Z^{45}$ ,  $Z^{46}$ ,  $X^{41}$ ,  $X^{42}$ ,  $X^{43}$  및  $X^{44}$ 와 각각, 같은 바람직한 범위에서 같은 정의를 가진다.
- [0079] 다음, 화학식 (11)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0080]  $Z^{101}$ ,  $Z^{102}$  및  $Z^{103}$ 은 각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다. 바람직하게  $Z^{101}$ ,  $Z^{102}$  및  $Z^{103}$ 중 하나 이상은 질소 원자이다.
- [0081]  $L^{101}$ ,  $L^{102}$ ,  $L^{103}$  및  $L^{104}$ 는 각 단일 결합 또는 연결기를 나타낸다. 연결기는 특별히 제한되지 않는다. 연

결기의 예는 카르보닐-연결기, 알킬렌-연결기, 알케닐렌-연결기, 아릴렌기, 헤테로 아릴렌기, 질소-포함 헤테로 고리-연결기, 산소 원자-연결기, 아미노-연결기, 이미노-연결기, 및 이러한 연결기 중 임의의 두 개 이상의 조합을 포함한다.

- [0082]  $L^{101}$ ,  $L^{102}$ ,  $L^{103}$  및  $L^{104}$ 로는, 바람직하게 단일 결합, 알킬렌기, 알케닐렌기, 산소 원자-연결기, 아미노-연결기 및 이미노-연결기, 더 바람직하게 단일 결합, 알킬렌 연결기, 알케닐렌 연결기 및 이미노-연결기, 가장 바람직하게 단일 결합 및 알킬렌-연결기가 예시된다.
- [0083]  $Q^{101}$  및  $Q^{103}$ 은 각 탄소, 질소, 인, 산소 또는 황원자를 각각  $M^{101}$ 의 배위 원자로 포함하는 기를 나타낸다.
- [0084] 탄소 원자를 배위 원자로 포함하는 기로는, 바람직하게 각 탄소 원자를 배위 원자로 포함하는 아릴기, 5-원 헤테로 아릴기 및 6-원 헤테로 아릴기, 더 바람직하게 각 탄소 원자를 배위 원자로 포함하는 아릴기, 5-원 질소-포함 헤테로 아릴기 및 6-원 질소-포함 헤테로 아릴기, 가장 바람직하게 탄소 원자를 배위 원자로 포함하는 아릴기가 예시된다.
- [0085] 질소 원자를 배위 원자로 포함하는 기로는, 바람직하게 각 질소 원자를 배위 원자로 포함하는 5-원 질소-포함 헤테로 아릴기 및 6-원 질소-포함 헤테로 아릴기, 더 바람직하게 질소 원자를 배위 원자로 포함하는 6-원 질소-포함 헤테로 아릴기가 예시된다.
- [0086] 인 원자를 배위 원자로 포함하는 기로는, 바람직하게 각 인 원자를 배위 원자로 포함하는 알킬포스핀기, 아릴포스핀기, 알콕시포스핀기, 아릴옥시포스핀기, 헤테로 아리옥시포스핀기, 포스피닌기, 및 포스폴기, 더 바람직하게 각 인 원자를 배위 원자로 포함하는 알킬포스핀기 및 아릴포스핀기가 예시된다.
- [0087] 산소 원자를 배위 원자로 포함하는 기로는, 바람직하게 산소 원자를 배위 원자로 포함하는 옥시기, 카르복시기, 더 바람직하게 옥시기가 예시된다.
- [0088] 황 원자를 배위 원자로 포함하는 기로는, 바람직하게 황 원자를 배위 원자로 포함하는 설피도기, 티오펜기 및 티아졸기, 더 바람직하게 티오펜기가 예시된다.
- [0089]  $Q^{101}$  및  $Q^{103}$ 은 각 탄소, 질소 또는 산소 원자를  $M^{101}$ 의 배위 원자로 포함하는 기; 더 바람직하게 탄소 또는 질소 원자를 배위 원자로 포함하는 기, 가장 바람직하게 탄소 원자를  $M^{101}$ 의 배위 원자로 포함하는 기를 나타낸다.
- [0090]  $Q^{102}$ 는 질소, 인, 산소 또는 황 원자를 각각  $M^{101}$ 의 배위 원자로 포함하는 기를 나타낸다. 질소 원자를 배위 원자로 포함하는 기는  $Q^{102}$ 로 바람직하다.
- [0091]  $M^{101}$ 는 상기한  $M^{11}$ 과 같은 바람직한 범위에서 같은 의미를 가진다.
- [0092] 다음, 화학식 (15)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0093]  $Z^{501}$ ,  $Z^{502}$ ,  $Z^{503}$ ,  $L^{501}$ ,  $L^{502}$ ,  $L^{503}$ ,  $L^{504}$ ,  $Q^{501}$ ,  $Q^{502}$ ,  $Q^{503}$  및  $M^{501}$ 는 상기한  $L^{101}$ ,  $Z^{102}$ ,  $Z^{103}$ ,  $L^{101}$ ,  $L^{102}$ ,  $L^{103}$ ,  $L^{104}$ ,  $Q^{101}$ ,  $Q^{102}$ ,  $Q^{103}$  및  $M^{101}$ 와 각각 같은 바람직한 범위에서 같은 의미를 가진다.
- [0094] 다음, 화학식 (12)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0095]  $Z^{201}$ ,  $Z^{202}$ ,  $Z^{203}$ ,  $Z^{207}$ ,  $Z^{208}$ ,  $Z^{209}$ ,  $L^{201}$ ,  $L^{202}$ ,  $L^{203}$ ,  $L^{204}$  및  $M^{201}$ 는 상기한  $Z^{101}$ ,  $Z^{102}$ ,  $Z^{103}$ ,  $Z^{101}$ ,  $Z^{102}$ ,  $Z^{103}$ ,  $L^{101}$ ,  $L^{102}$ ,  $L^{103}$ ,  $L^{104}$  및  $M^{101}$ 과 각각 같은 바람직한 범위에서 같은 의미를 가진다.  $Z^{204}$ ,  $Z^{205}$ ,  $Z^{206}$ ,  $Z^{210}$ ,  $Z^{211}$  및  $Z^{212}$ 는 각각 치환 또는 비 치환된 탄소 원자 또는 질소 원자이고, 치환 또는 비 치환된 탄소 원자가 바람직하다.
- [0096]  $L^{201}$ ,  $L^{202}$ ,  $L^{203}$  및  $L^{204}$ 의 조합은 바람직하게  $L^{201}$ ,  $L^{202}$ ,  $L^{203}$  및  $L^{204}$ 이 각각 알킬렌기; 더 바람직하게  $L^{201}$  및  $L^{203}$ 이 각각 단일 결합, 및  $L^{202}$  및  $L^{204}$ 가 각각 알킬렌기이다.  $Z^{204}$ ,  $Z^{206}$ ,  $Z^{210}$  및  $Z^{212}$ 의 조합은 바람직하게  $Z^{204}$ ,  $Z^{206}$ ,  $Z^{210}$  및  $Z^{212}$ 중 하나 이상이 불소로 치환된 탄소 원자; 더 바람직하게  $Z^{204}$ ,  $Z^{206}$ ,  $Z^{210}$  및  $Z^{212}$ 가 각각 불소로 치환된 탄소 원자이다.  $Z^{202}$  및  $Z^{208}$ 이 알킬기, 알콕시기 또는 디(di)알킬아미노기 중 임의의 것으로 치환된 각각 독립적인 탄소 원자인 것이 바람직하다.

- [0097] 다음, 화학식 (13)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0098]  $Z^{301}, Z^{302}, Z^{303}, Z^{304}, Z^{305}, Z^{306}, Z^{307}, Z^{308}, Z^{309}, Z^{310}, L^{301}, L^{302}, L^{303}, L^{304}$  및  $M^{301}$ 은 상기한  $Z^{201}, Z^{202}, Z^{203}, Z^{204}, Z^{206}, Z^{207}, Z^{208}, Z^{209}, Z^{210}, Z^{212}, L^{101}, L^{102}, L^{103}, L^{104}$  및  $M^{101}$ 와 각각, 같은 바람직한 범위에서 같은 의미를 가진다.
- [0099]  $L^{301}, L^{302}, L^{303}$  및  $L^{304}$ 의 조합은 바람직하게  $L^{301}, L^{302}, L^{303}$  및  $L^{304}$ 이 각각 알킬렌기; 더 바람직하게  $L^{301}$  및  $L^{303}$ 이 각각 단일 결합, 및  $L^{302}$  및  $L^{304}$ 가 각각 알킬렌기이다.  $Z^{304}, Z^{305}, Z^{309}$  및  $Z^{310}$ 의 조합은 바람직하게  $Z^{304}, Z^{305}, Z^{309}$  및  $Z^{310}$ 중 두 개 이상이 각각 질소 원자이다.  $Z^{302}$  및  $Z^{307}$ 는 바람직하게 알킬기, 알콕시기 또는 디(di)알킬아미노기 중 임의의 것으로 치환된 각각 독립적인 탄소 원자이다.
- [0100] 다음, 화학식 (14)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0101]  $Z^{401}, Z^{402}, Z^{403}, Z^{404}, Z^{405}, Z^{406}, Z^{407}, Z^{408}, Z^{409}, Z^{410}, Z^{411}, Z^{412}, L^{401}, L^{402}, L^{403}, L^{404}$  및  $M^{401}$ 은 상기한  $Z^{201}, Z^{202}, Z^{203}, Z^{204}, Z^{205}, Z^{206}, Z^{207}, Z^{208}, Z^{209}, Z^{210}, Z^{211}, Z^{212}, L^{101}, L^{102}, L^{103}, L^{104}$  및  $M^{101}$ 와 각각 같은 바람직한 범위에서 같은 의미를 가진다.
- [0102]  $X^{401}$  및  $X^{402}$ 는 각 산소 원자, 치환 또는 비 치환된 질소 원자 또는 황원자, 바람직하게 산소 원자 또는 치환된 질소 원자, 더 바람직하게 산소 원자이다.
- [0103]  $L^{401}, L^{402}, L^{403}$  및  $L^{404}$ 의 조합은 바람직하게  $L^{401}, L^{402}, L^{403}$  및  $L^{404}$ 이 각각 알킬렌기; 더 바람직하게  $L^{401}$  및  $L^{403}$ 가 각각 단일 결합, 및  $L^{402}$  및  $L^{404}$ 는 각각 알킬렌기이다.  $Z^{404}, Z^{406}, Z^{410}$  및  $Z^{412}$ 의 조합은 바람직하게  $Z^{404}, Z^{406}, Z^{410}$  및  $Z^{412}$ 중 하나 이상이 불소 원자로 치환된 탄소 원자; 더 바람직하게  $Z^{404}, Z^{406}, Z^{410}$  및  $Z^{412}$ 가 각각 불소 원자로 치환된 탄소 원자 이다.  $Z^{402}$  및  $Z^{408}$ 이 알킬기, 알콕시기 또는 디(di)알킬아미노기 중 임의의 것으로 치환된 각각 독립적인 탄소 원자인 것이 바람직하다.
- [0104] 다음, 화학식 (16)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0105]  $Z^{601}, Z^{602}, Z^{603}, Z^{604}, Z^{605}, Z^{606}, Z^{607}, Z^{608}, Z^{609}, Z^{610}, Z^{611}, Z^{612}, L^{601}, L^{602}, L^{603}, L^{604}$  및  $M^{601}$ 은 상기한  $Z^{201}, Z^{202}, Z^{203}, Z^{207}, Z^{208}, Z^{209}, Z^{204}, Z^{205}, Z^{206}, Z^{210}, Z^{211}, Z^{212}, L^{101}, L^{102}, L^{103}, L^{104}$  및  $M^{101}$ 와 각각 같은 바람직한 범위에서 같은 의미를 가진다.
- [0106]  $L^{601}, L^{602}, L^{603}$  및  $L^{604}$ 의 조합은 바람직하게  $L^{601}, L^{602}, L^{603}$  및  $L^{604}$ 가 각각 알킬렌기; 더 바람직하게  $L^{601}$  및  $L^{603}$ 는 각각 단일 결합, 및  $L^{602}$  및  $L^{604}$ 는 각각 알킬렌기이다.  $Z^{607}, Z^{609}, Z^{610}$  및  $Z^{612}$ 의 조합은 바람직하게  $Z^{607}, Z^{609}, Z^{610}$  및  $Z^{612}$ 중 하나 이상이 불소 원자로 치환된 탄소 원자; 더 바람직하게  $Z^{607}, Z^{609}, Z^{610}$  및  $Z^{612}$ 가 각각 불소 원자로 치환된 탄소 원자이다.  $Z^{602}$  및  $Z^{605}$ 이 알킬기, 알콕시기 또는 디(di)알킬아미노기중 임의의 것으로 치환된 각각 독립적인 탄소 원자인 것이 바람직하다.
- [0107] 다음, 화학식 (17)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.
- [0108]  $Z^{701}, Z^{702}, Z^{703}, Z^{704}, Z^{705}, Z^{706}, Z^{707}, Z^{708}, Z^{709}, Z^{710}, L^{701}, L^{702}, L^{703}, L^{704}$  및  $M^{701}$ 은 상기한  $Z^{201}, Z^{202}, Z^{203}, Z^{207}, Z^{208}, Z^{209}, Z^{204}, Z^{206}, Z^{210}, Z^{212}, L^{101}, L^{102}, L^{103}, L^{104}$  및  $M^{101}$ 와 각각 같은 바람직한 범위에서 같은 의미를 가진다.
- [0109]  $L^{701}, L^{702}, L^{703}$  및  $L^{704}$ 의 조합은 바람직하게  $L^{701}, L^{702}, L^{703}$  및  $L^{704}$ 가 각각 알킬렌기; 더 바람직하게  $L^{701}$  및  $L^{703}$ 는 각각 단일 결합, 및  $L^{702}$  및  $L^{704}$ 는 각각 알킬렌기이다.  $Z^{707}, Z^{708}, Z^{709}$  및  $Z^{710}$ 의 조합은 바람직하게  $Z^{707}, Z^{708}, Z^{709}$  및  $Z^{710}$ 중 2 이상이 각각 질소 원자이다.  $Z^{702}$  및  $Z^{705}$ 가 알킬기, 알콕시기 또는 디알킬아미노기 중 임의의 것으로 치환된 각각 독립적인 탄소 원자인 것이 바람직하다.
- [0110] 다음, 화학식 (18)로 표시되는 화합물이 설명될 것이다.



[0111]  $Z^{801}$ ,  $Z^{802}$ ,  $Z^{803}$ ,  $Z^{804}$ ,  $Z^{805}$ ,  $Z^{806}$ ,  $Z^{807}$ ,  $Z^{808}$ ,  $Z^{809}$ ,  $Z^{810}$ ,  $Z^{811}$ ,  $Z^{812}$ ,  $L^{801}$ ,  $L^{802}$ ,  $L^{803}$ ,  $L^{804}$ ,  $M^{801}$ ,  $X^{801}$  및  $X^{802}$ 는 상기한  $Z^{201}$ ,  $Z^{202}$ ,  $Z^{203}$ ,  $Z^{207}$ ,  $Z^{208}$ ,  $Z^{209}$ ,  $Z^{204}$ ,  $Z^{205}$ ,  $Z^{206}$ ,  $Z^{210}$ ,  $Z^{211}$ ,  $Z^{212}$ ,  $L^{101}$ ,  $L^{102}$ ,  $L^{103}$ ,  $L^{104}$ ,  $M^{101}$ ,  $X^{401}$  및  $X^{402}$ 와 각각 같은 바람직한 범위에서 같은 의미를 가진다.

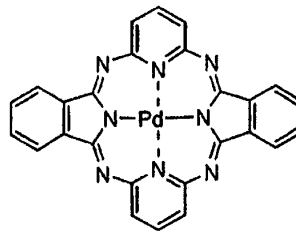
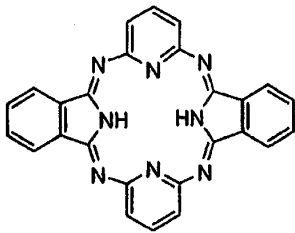
[0112]  $L^{801}$ ,  $L^{802}$ ,  $L^{803}$  및  $L^{804}$ 의 조합은 바람직하게  $L^{801}$ ,  $L^{802}$ ,  $L^{803}$  및  $L^{804}$ 가 각각 알킬렌기; 더 바람직하게  $L^{801}$  및  $L^{803}$ 가 각각 단일 결합, 및  $L^{802}$  및  $L^{804}$ 가 각각 알킬렌기이다.  $Z^{807}$ ,  $Z^{809}$ ,  $Z^{810}$  및  $Z^{812}$ 의 조합은 바람직하게  $Z^{807}$ ,  $Z^{809}$ ,  $Z^{810}$  및  $Z^{812}$ 중 하나 이상이 불소 원자로 치환된 탄소 원자; 더 바람직하게  $Z^{807}$ ,  $Z^{809}$ ,  $Z^{810}$  및  $Z^{812}$ 가 각각 불소 원자로 치환된 탄소 원자이다.  $Z^{802}$  및  $Z^{805}$ 이 독립적으로 알킬기, 알콕시기 또는 디(di)알킬아미노기 중 임의의 것으로 치환된 각각 독립적인 탄소 원자인 것이 바람직하다.

[0113] 본 발명의 화합물은 저분자 화합물, 또는 소중합체 화합물 또는 중합체 화합물일 수 있으며, 이는 바람직하게 1,000 - 5,000,000 범위 내, 더 바람직하게 2,000 - 1,000,000 범위 내, 가장 바람직하게 3,000 - 100,000 범위 내의 폴리스티렌으로 계산한 무게-평균 분자량을 갖는 중합체이다. 중합체 화합물과 관련하여, 예컨대 화학식 (1)으로 표시된 구조가 중합체의 주쇄 또는 측쇄 내에 포함될 수 있다. 추가적으로, 중합체 화합물은 단일중합체 또는 공중합체일 수 있다. 본 발명의 화합물은 바람직하게 저분자 화합물이다.

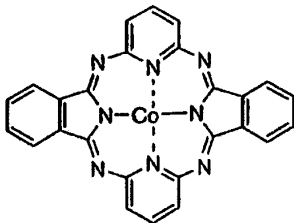
[0114] 본 발명의 화합물의 상세한 예는 하기에 보여지나, 본 발명이 이러한 화합물에 제한되는 것은 아니다.

화합물 (5)

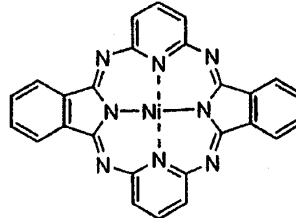
화합물 (1)



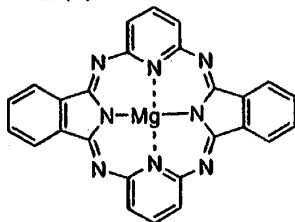
화합물 (2)



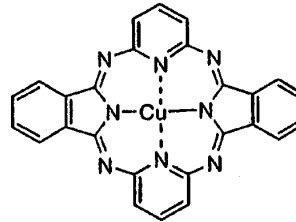
화합물 (6)



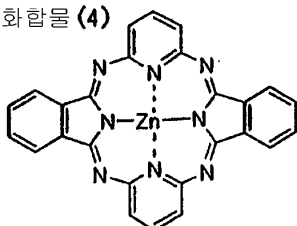
화합물 (3)



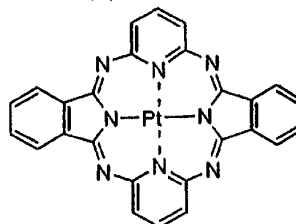
화합물 (7)



화합물 (4)

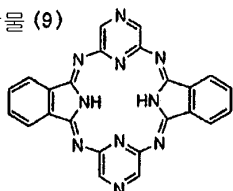


화합물 (8)

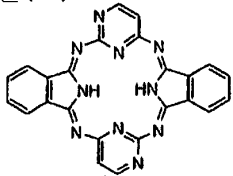


[0115]

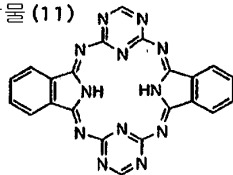
화합물 (9)



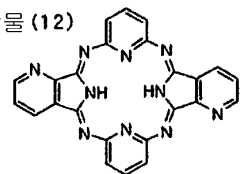
화합물 (10)



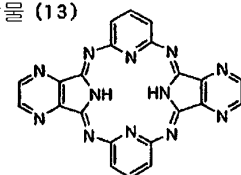
화합물 (11)



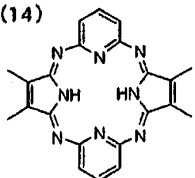
화합물 (12)



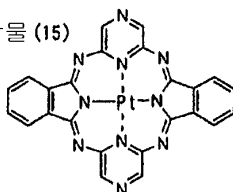
화합물 (13)



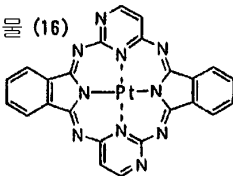
화합물 (14)



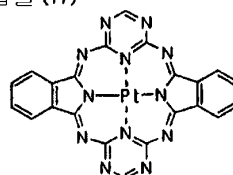
화합물 (15)



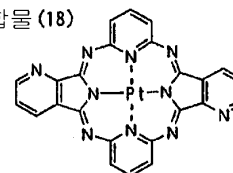
화합물 (16)



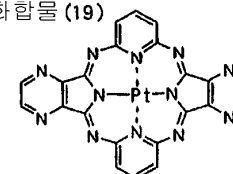
화합물 (17)



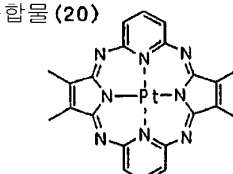
화합물 (18)



화합물 (19)

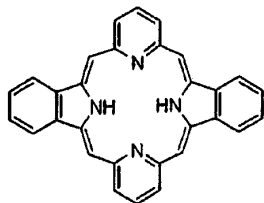


화합물 (20)

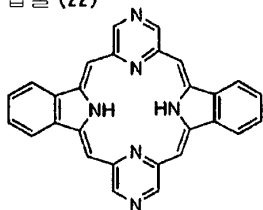




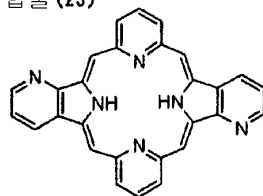
화합물 (21)



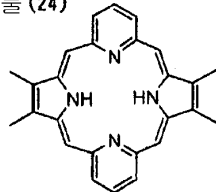
화합물 (22)



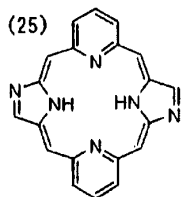
화합물 (23)



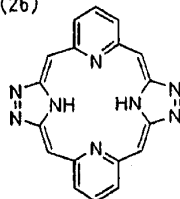
화합물 (24)



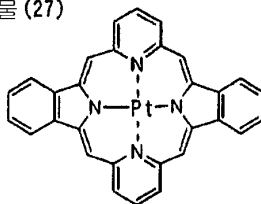
화합물 (25)



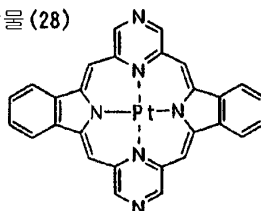
화합물 (26)



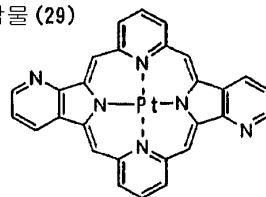
화합물 (27)



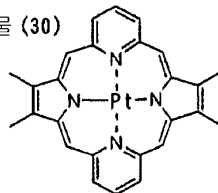
화합물 (28)



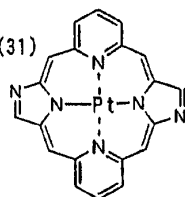
화합물 (29)



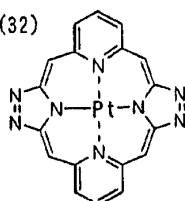
화합물 (30)



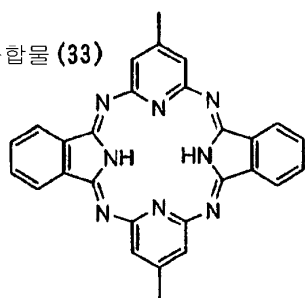
화합물 (31)



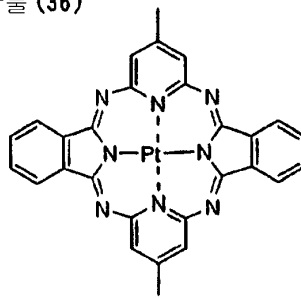
화합물 (32)



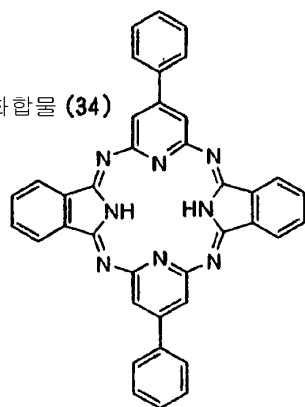
화합물 (33)



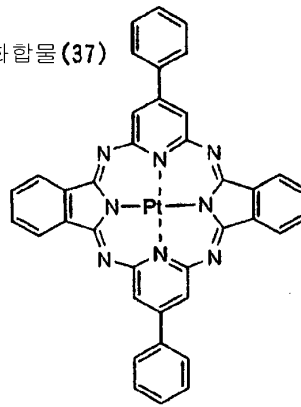
화합물 (36)



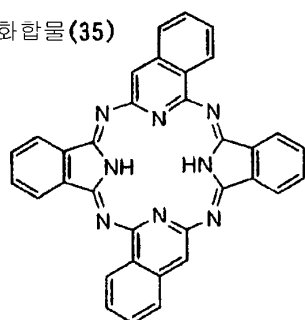
화합물 (34)



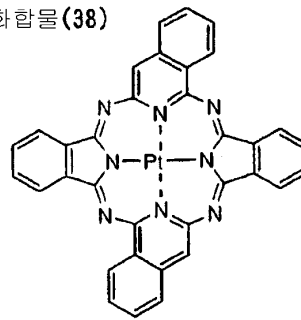
화합물 (37)



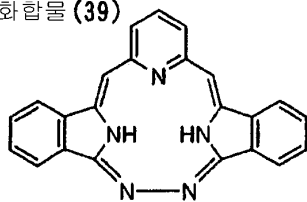
화합물 (35)



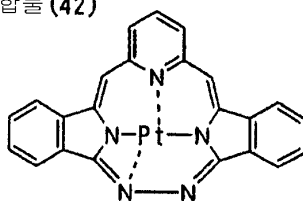
화합물 (38)



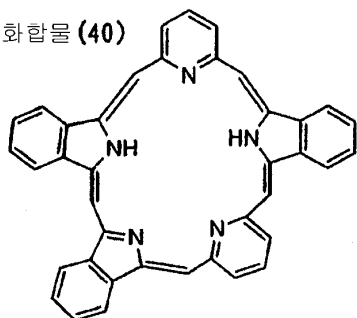
화합물 (39)



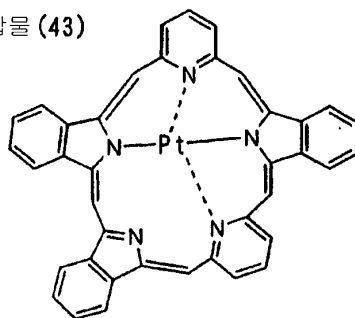
화합물 (42)



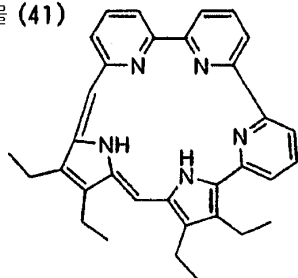
화합물 (40)



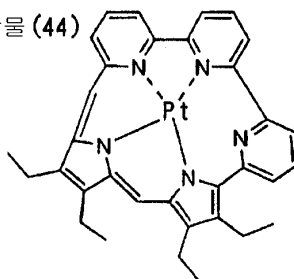
화합물 (43)



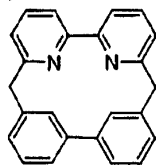
화합물 (41)



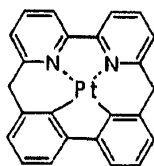
화합물 (44)



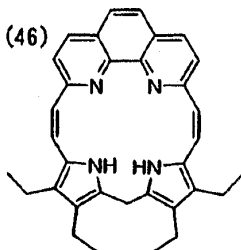
화합물 (45)



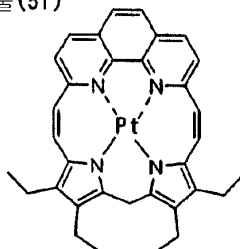
화합물 (50)



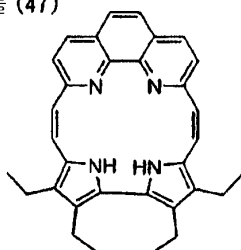
화합물 (46)



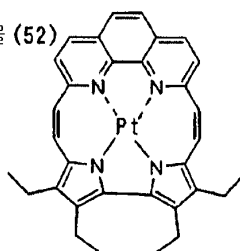
화합물 (51)



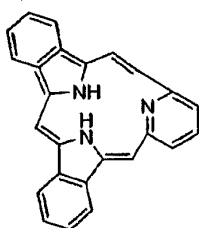
화합물 (47)



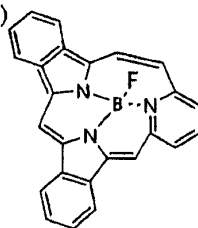
화합물 (52)



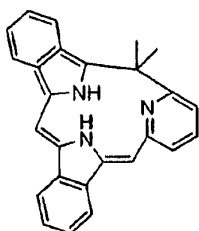
화합물 (48)



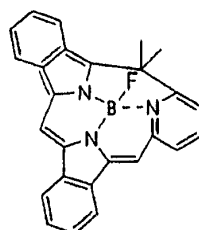
(53)



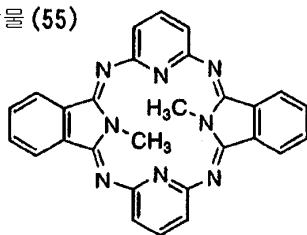
화합물 (49)



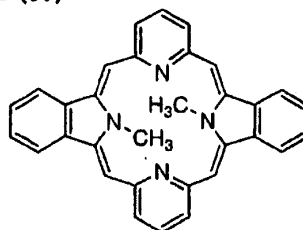
화합물 (54)



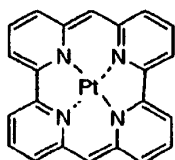
화합물 (55)



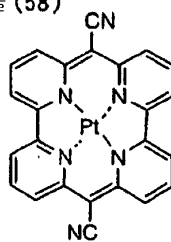
화합물 (56)



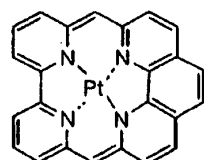
화합물 (57)



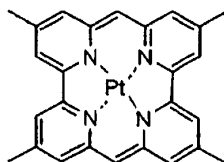
화합물 (58)



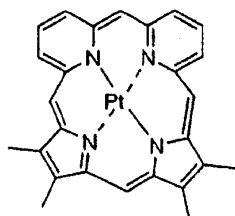
화합물 (59)



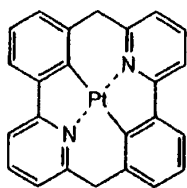
화합물 (60)



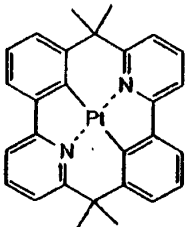
화합물 (61)



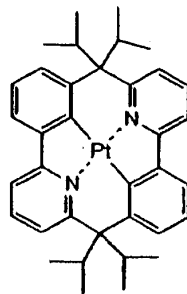
화합물 (62)



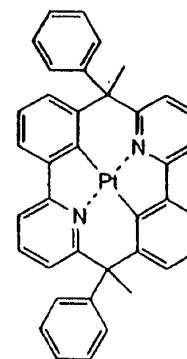
화합물 (64)



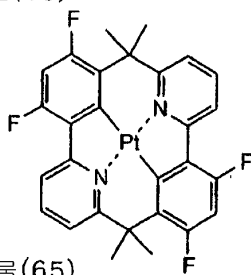
화합물 (66)



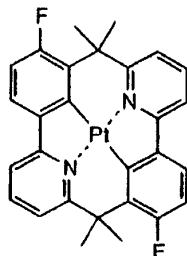
화합물 (68)



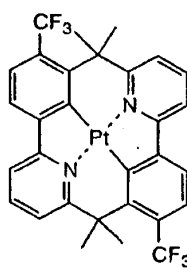
화합물 (63)



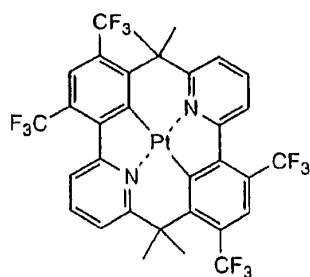
화합물 (65)



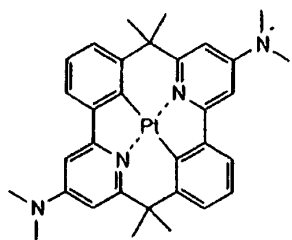
화합물 (67)



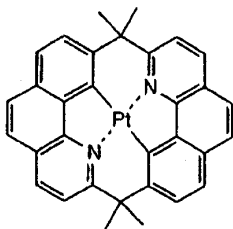
화합물 (69)



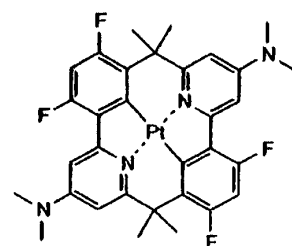
화합물 (70)



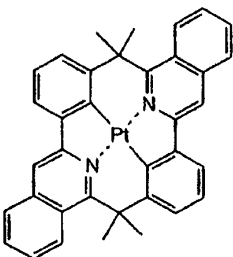
화합물 (71)



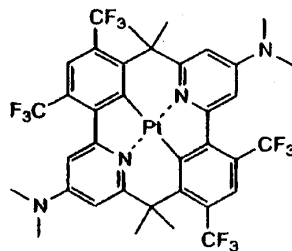
화합물 (72)



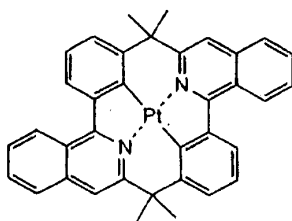
화합물 (73)



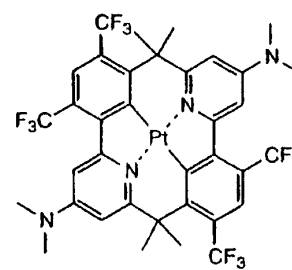
화합물 (74)



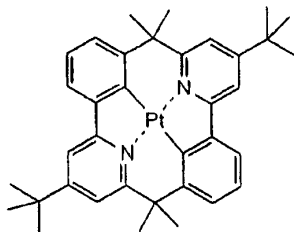
화합물 (75)



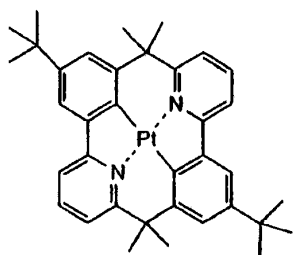
화합물 (76)



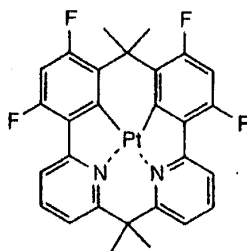
화합물 (77)



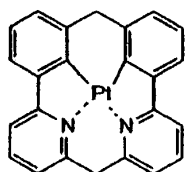
화합물 (78)



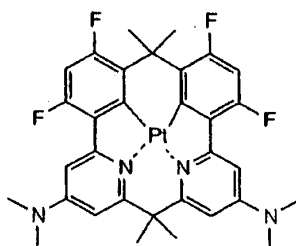
화합물 (79)



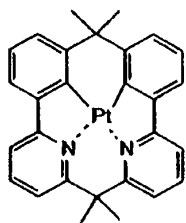
화합물 (80)



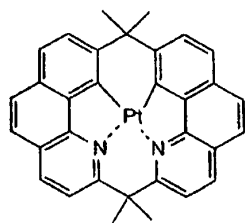
화합물 (81)



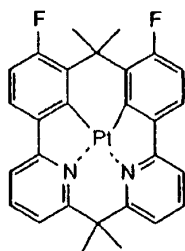
화합물 (82)



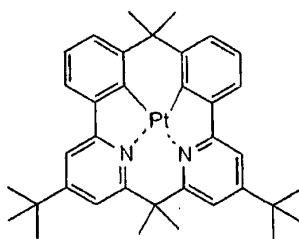
화합물 (83)



화합물 (84)

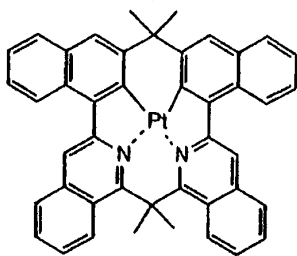


화합물 (85)

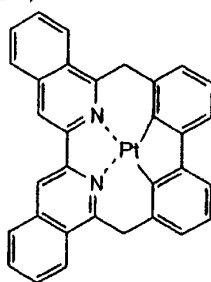




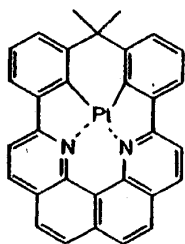
화합물 (86)



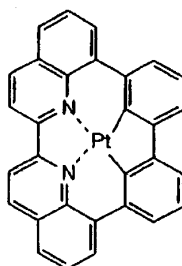
화합물 (87)



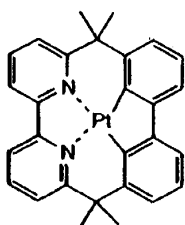
화합물 (88)



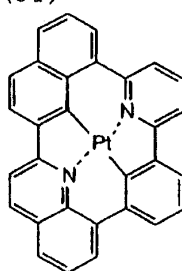
화합물 (89)



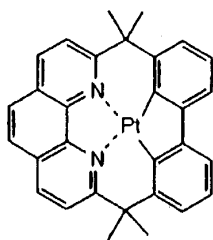
화합물 (90)



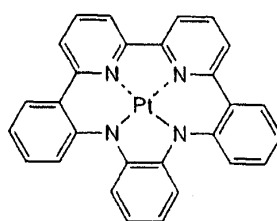
화합물 (91)



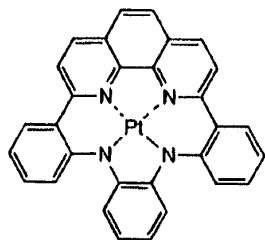
화합물 (92)



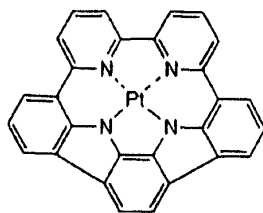
화합물 (93)



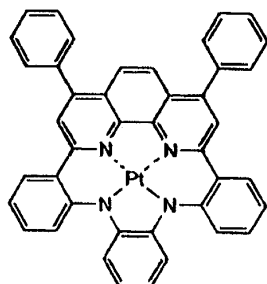
화합물 (94)



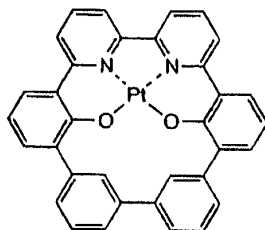
화합물 (95)



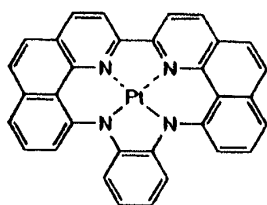
화합물 (96)



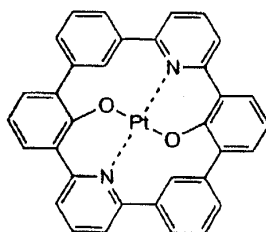
화합물 (97)



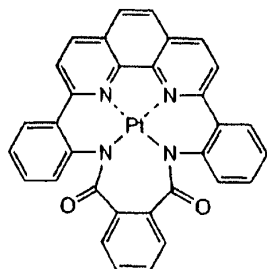
화합물 (98)



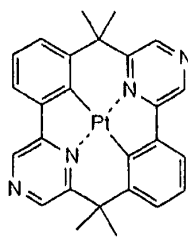
화합물 (99)



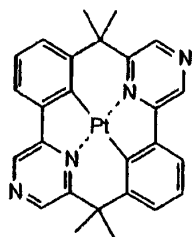
화합물 (100)



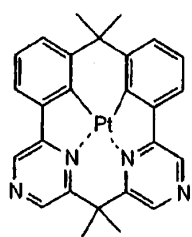
화합물 (101)



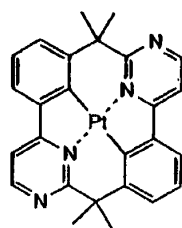
화합물 (102)



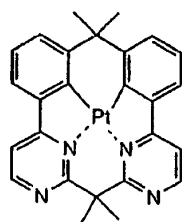
화합물 (103)



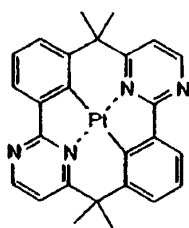
화합물 (104)



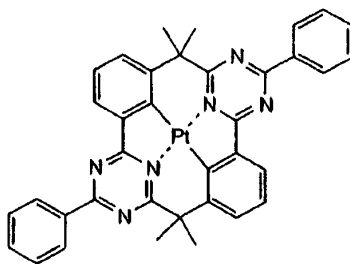
화합물 (105)



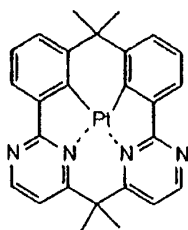
화합물 (106)



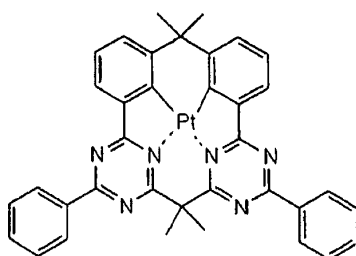
화합물 (107)



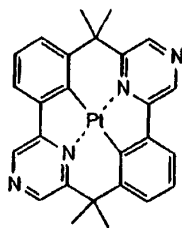
화합물 (108)



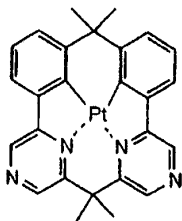
화합물 (109)



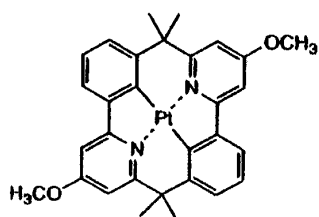
화합물 (110)



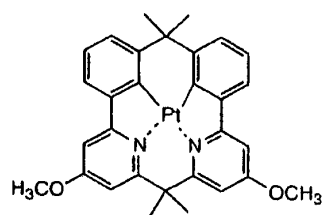
화합물 (111)



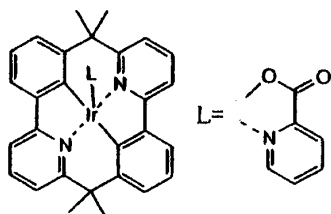
화합물 (112)



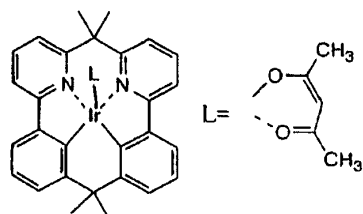
화합물 (113)



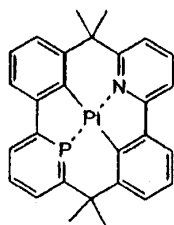
화합물 (114)



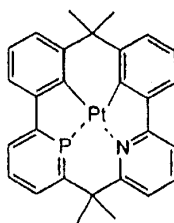
화합물 (115)



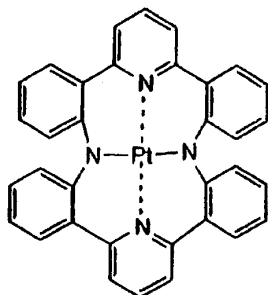
화합물 (116)



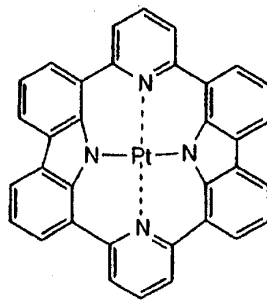
화합물 (117)



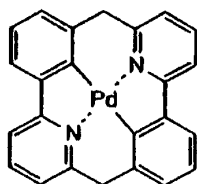
Compound (118)



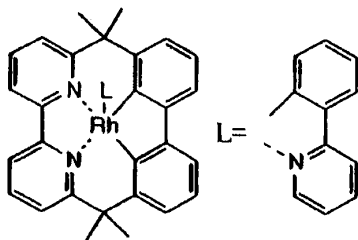
Compound (119)



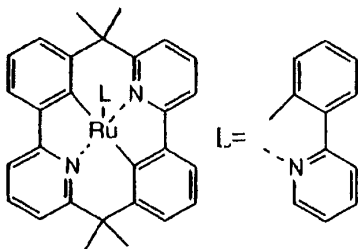
Compound (120)



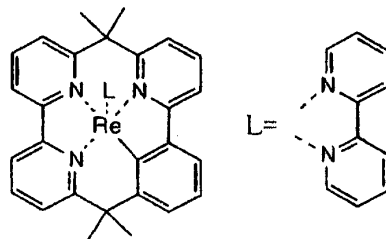
화합물 (122)



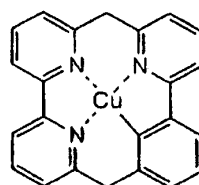
화합물 (124)



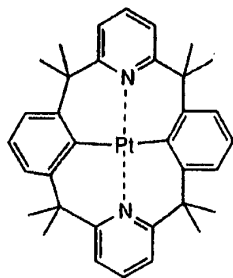
화합물 (121)



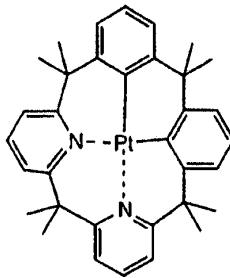
화합물 (123)



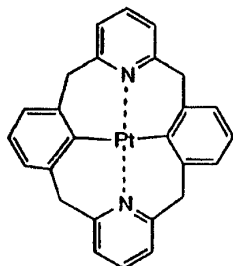
화합물 (125)



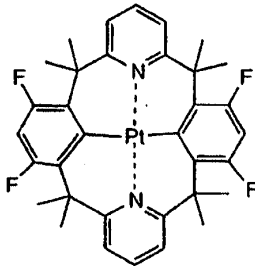
화합물 (126)



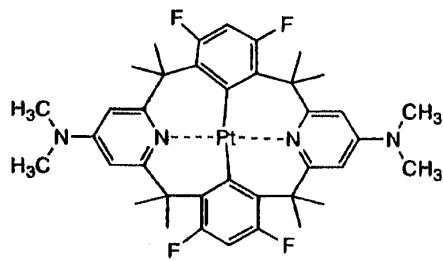
화합물 (127)



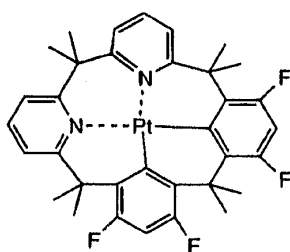
화합물 (128)



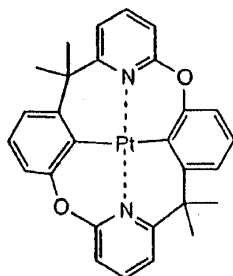
화합물 (129)



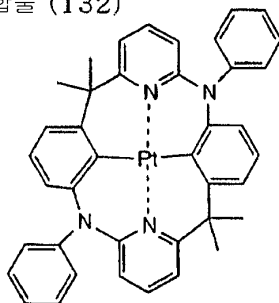
화합물 (130)



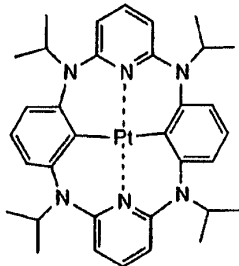
화합물 (131)



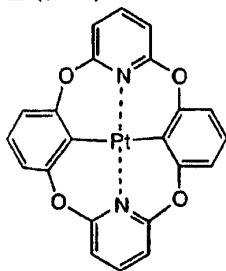
화합물 (132)



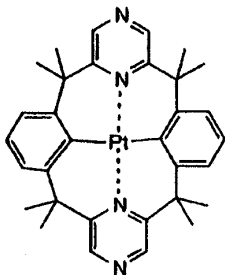
화합물 (133)



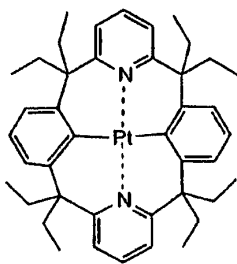
화합물 (134)



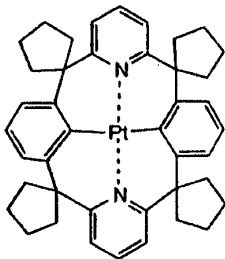
화합물 (135)



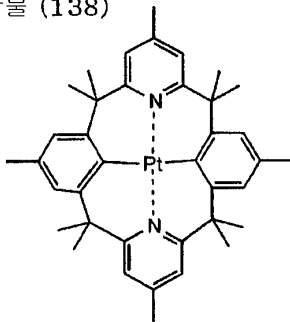
화합물 (136)



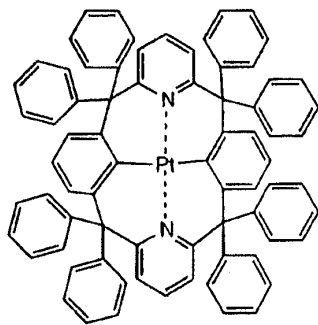
화합물 (137)



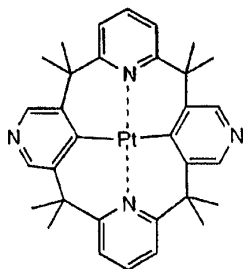
화합물 (138)



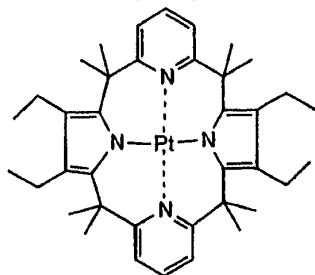
화합물 (139)



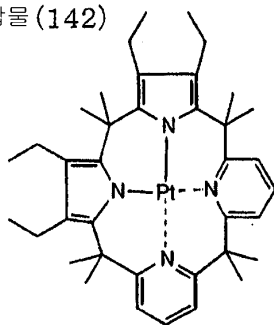
화합물 (140)



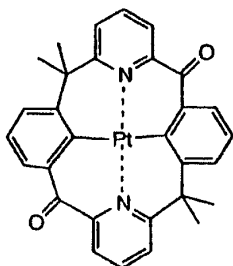
화합물 (141)



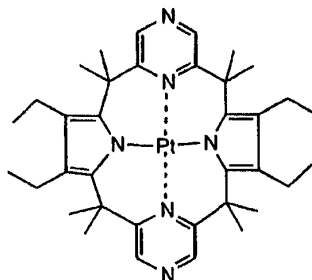
화합물 (142)



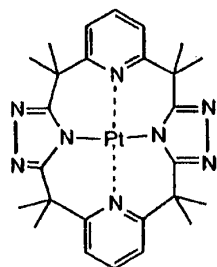
화합물 (143)



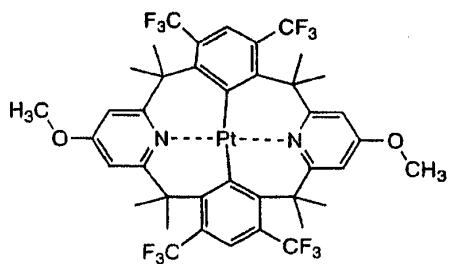
화합물 (144)



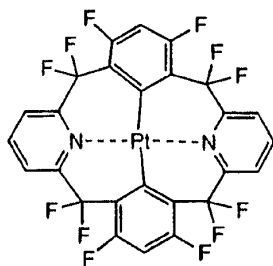
화합물 (145)



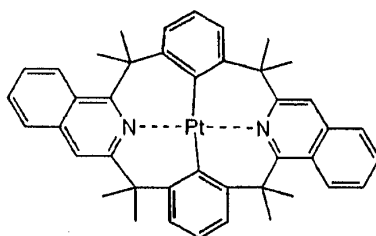
화합물 (146)



화합물 (147)

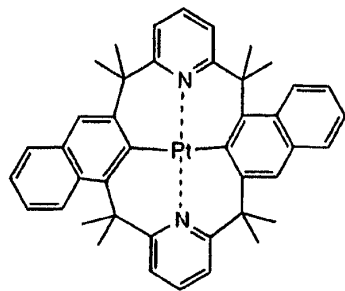


화합물 (148)

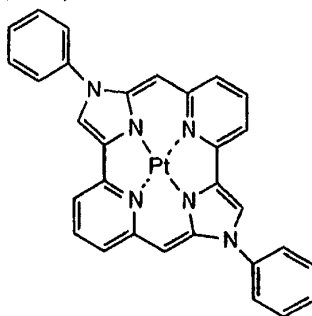




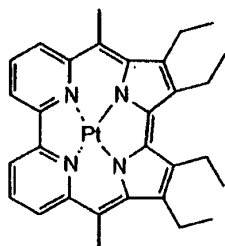
화합물 (149)



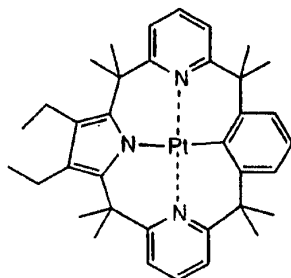
화합물 (150)



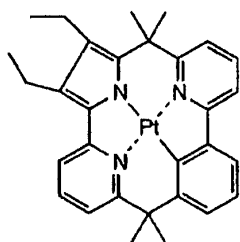
화합물 (151)



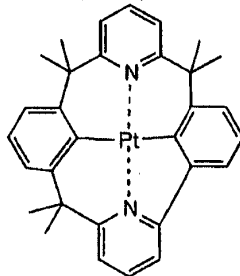
화합물 (152)



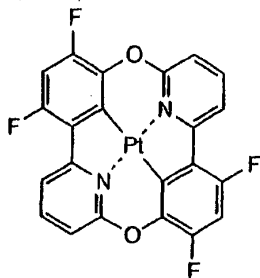
화합물 (153)



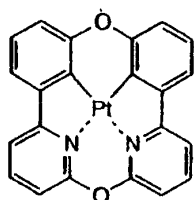
화합물 (154)



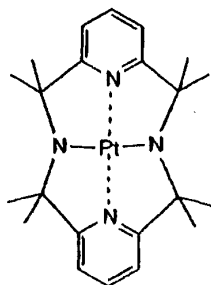
화합물 (155)



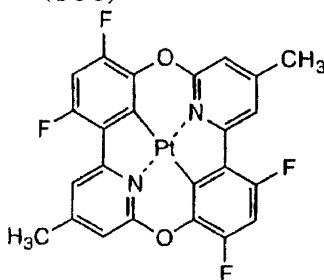
화합물 (157)



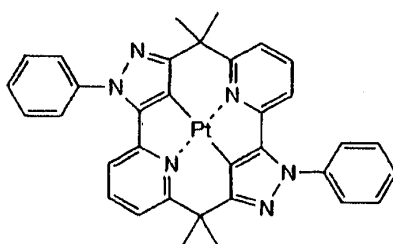
화합물 (159)



화합물 (156)



화합물 (158)



[0116] 화학식 (1)로 표시되는 본 발명의 화합물은, 예를 들어 Journal of Chemical Society, 5008 (1952)에 설명된 방법에 따라 또는 하기에 설명될 합성 방법에 따라 합성될 수 있다.

[0117] 화학식 (1)( $n=1$ )로 표시되는 본 발명의 화합물은 다양한 방법에 따라 합성 될 수 있다. 예를 들어, 화합물은 리간드 또는 그것의 분리된 생성물을  $M^{II}$ 을 포함하는 화합물과 반응시킴으로써 수득할 수 있으며, 이것은 용매의 존재 하에서(예를 들어, 할로젠-시리즈 용매, 알코올-시리즈 용매, 에테르-시리즈 용매, 에스테르-시리즈 용매, 케톤-시리즈 용매, 니트릴-시리즈 용매, 아미드-시리즈 용매, 설펜-시리즈 용매, 설폭시드-시리즈 용매 및 물) 또는 용매의 부재 하에서, 염기의 존재하에서(다양한 무기 또는 유기 염기, 예컨대 소듐 메톡시드, 포타슘 t-부톡시드, 트리에틸아민 및 포타슘 카보네이트), 또는 염기의 부재 하에서, 실온 이하, 또는 대안적으로 가열하면서(보통 가열에 추가적으로 마이크로파를 이용한 가열도 효과적이다) 반응시킬 수 있다.

[0118]  $M^{II}$ 을 포함하는 화합물로부터, 화학식 (1)( $n=1$ )로 표시되는 본 발명의 화합물을 합성하는데 적용되는 반응 시간은 반응 활성에 따라 다양하며, 반응 시간에 특별한 제한은 없으나, 반응 시간은 바람직하게 1분 - 5일 범위 내, 더 바람직하게 5분 - 3일 범위 내, 가장 바람직하게 10분 - 1일 범위 내이다.

[0119]  $M^{II}$ 을 포함하는 화합물로부터, 화학식 (1)( $n=1$ )로 표시되는 본 발명의 화합물을 합성하는데 적용되는 반응 온도는 반응 활성에 따라 다양하며, 반응 온도에 특별한 제한은 없으나, 반응 온도는 바람직하게  $0^{\circ}\text{C}$  -  $300^{\circ}\text{C}$  범위 내, 더 바람직하게  $5^{\circ}\text{C}$  -  $250^{\circ}\text{C}$  범위 내, 가장 바람직하게  $10^{\circ}\text{C}$  -  $200^{\circ}\text{C}$  범위 내이다.

[0120] 화학식 (1)( $n=1$ )로 표시되는 본 발명의 화합물은, 목적하는 착물(예를 들어, 화합물 (8)의 합성에서 화합물 (1))의 부분적인 구조를 갖는 리간드를 금속 화합물에 대해 각각 바람직하게 0.1 - 10 당량 이내, 더 바람직하게 0.3 - 6 당량 이내, 가장 바람직하게 0.5 - 4 당량 이내로 첨가함으로써 합성될 수 있다.

[0121] 상기한 금속 화합물로는, 금속 할로겐화물(예를 들어, 백금 염화물), 금속 아세테이트(예를 들어, 팔라듐 아세

테이트), 아세틸아세토나토-금속(예를 들어, 아세틸아세토나토유로피움), 및 이 화합물들의 수화물이 예시된다.

화학식 (6)으로 표시되는 본 발명의 화합물은 화학식 (6)의 부분적인 구조를 갖는 리간드(예를 들어, 화합물 (1), 화합물 (9), 화합물 (14), 화합물 (21), 화합물 (24))를 백금 화합물(예를 들어,  $\text{PtCl}_2$ ,  $\text{K}_2\text{PtCl}_4$ ,  $\text{Pt}(\text{acac})_2$ )과 반응시킴으로써 수득할 수 있다. 화학식 (1)( $n=1$ )로 표시되는 본 발명의 화합물은 또한 화학식 (6)으로 표시되는 화합물과 같은 방식으로 합성될 수 있다. 화학식 (6)으로 표시되는 화합물은 상기한 화합물 (1)로 표시되는 화합물의 합성 방법에 따라 합성될 수 있다.

[0122] 다음, 본 발명의 화합물을 포함하는 발광 소자가 하기에 설명된다.

[0123] 본 발명의 발광 소자는, 만약 소자가 본 발명의 화합물을 사용하는 경우, 통상적인 발광 시스템, 운영 방법 및 사용 형태를 적용할 수 있다. 예를 들어, 화학식 (1)로 표시되는 화합물은 바람직하게 발광 재료 또는 정공 주입 재료/정공 수송 재료로 사용된다. 사용되는 발광 재료는 자외선 방출 또는 적외선 방출, 또는 형광 방출 또는 인광을 방출할 수 있다. 통상적인 발광 소자로서, 유기 EL(전계발광)소자가 있다.

[0124] 본 발명의 발광 소자의 광학 출력 효율은 다양한 공지된 방법에 따라 개선될 수 있다. 예를 들어, 광학 출력 효율은 기관의 표면 모양(예를 들어, 미세하게 고르지 못한 패턴의 구조)을 가공, 기관, ITO층 및 유기층(들) 사이의 굴절률 조절함으로써, 또는 기관, ITO층 및 유기층(들) 사이의 두께를 조절함으로써 개선될 수 있다. 따라서 외부 양자 효율이 개선될 수 있다.

[0125] 본 발명의 발광 소자는, 예를 들어, JP-A-2003-208109, JP-A-2003-248441, JP-A-2003-257651 및 JP-A-2003-282261에 기재된 바와 같이, 양극 쪽에서 빛 방출 출력을 하는 소위, 소자의 상부 발광(top emission) 시스템일 수 있다.

[0126] 본 발명의 발광 소자에 사용될 수 있는 기관은 특별히 제한되지 않는다. 기관의 예는 무기 재료, 예컨대 지르코니아-안정화 이트륨 및 유리; 폴리에스테르, 예컨대 폴리에틸렌 테레프탈레이트, 폴리부틸렌 테레프탈레이트 및 폴리에틸렌 나프탈레이트; 및 고분자량 재료, 예컨대 폴리에틸렌, 폴리카보네이트, 폴리테트라플루오로에틸렌, 알릴디글리콜카보네이트, 폴리이미드, 폴리시클로올레핀, 노르보넨 수지, 폴리(클로로트리플루오로에틸렌), 폴리테트라플루오로에틸렌 (Teflon<sup>®</sup>) 및 폴리테트라플루오로에틸렌/폴리에틸렌 공중합체를 포함한다.

[0127] 본 발명의 유기 전계발광 소자는 청색-형광 화합물을 포함할 수 있다. 대안적으로, 청색 형광 화합물을 포함하는 청색 발광 소자 및 본 발명의 발광소자와 같이 사용되어, 다색 빛-방출 소자 또는 완전 색 빛-방출 소자를 제조할 수 있다.

[0128] 본 발명의 발광 소자용도의 기지 재료는 한 가지 종류, 또는 두 가지 이상의 종류 일 수 있다. 기지 재료로는, 바람직하게 아릴아민 유도체(예를 들어, 트리페닐아민 유도체, 벤지딘 유도체), 방향족 탄화수소 화합물(예를 들어, 트리페닐벤젠 유도체, 트리페닐렌 유도체, 펜안트렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 테트라페닐렌 유도체), 방향족 질소-포함 헤테로시클릭 화합물(예를 들어, 피리딘 유도체, 피라진 유도체, 피리미딘 유도체, 트리아진 유도체, 피라졸 유도체, 이미다졸 유도체, 옥사졸 유도체, 피롤 유도체) 및 금속 착물(예를 들어, 아연 착물, 알루미늄 착물, 갈륨 착물)이 있다.

[0129] 본 발명의 발광 소자는 음극과 발광층 사이에, 바람직하게 5.9 eV 이상 (더 바람직하게 6.0 eV 이상)의 이온화 포텐셜을 갖는 화합물을 포함하는 층을, 더 바람직하게 5.9 eV 이상의 이온화포텐셜을 갖는 전자 수송층을 가진다.

[0130] 본 발명의 화합물을 포함하는 발광 소자의 유기층을 형성하는 방법은 특별히 제한되지 않는다. 이러한 방법으로, 다양한 방법, 예컨대 저항 가열식 증착법(resistance heating-utilizing vapor deposition method), 전자선 조사법, 스퍼터링(sputtering method), 분자 적층법(molecular lamination method), 코팅법(예를 들어, 분사코팅법, 침지코팅법, 침지법, 롤(roll)코팅법, 그라비아(gravure)코팅법, 역상코팅법, 롤 브러쉬법, 에어 나이프(air knife)코팅법, 커튼(curtain)코팅법, 회전코팅법, 플로(flow)코팅법, 바(bar)코팅법, 마이크로 그라비아(micro gravure)코팅법, 에어닥터(air doctor)코팅법, 블레이드(blade)코팅법, 스퀴즈(squeeze)코팅법, 트랜스퍼 롤(transfer roll)코팅법, 키스(kiss)코팅법, 캐스트(cast)코팅법, 압출 코팅법, 와이어 바(wire bar)코팅법 및 스크린(screen) 코팅법), 잉크젯(inkjet)법, 프린팅(printing)법, 트랜스퍼(transfer)법이 사용될 수 있다. 특성 및 생산의 관점에서, 저항 가열식 증착법, 코팅법 및 트랜스퍼법이 바람직하다. 본 발명의 화합물의 층은, 상기한 임의의 방법으로 기관 위에 형성될 수 있다. 이 층은 그 두께에 있어서 특별한 제한

은 없으나, 층 두께는 바람직하게 10 nm 이상, 더 바람직하게 50 nm - 5  $\mu$ m의 범위 내이다.

- [0131] 본 발명의 발광 소자는 발광층 또는 한 쌍의 전극, 예를 들어 양극(애노드;anode)과 음극(캐소드;cathod)사이에 발광 층이 형성된 두 개 이상의 유기 화합물의 박막 필름층을 가진다. 발광 소자가 발광 층이외에 추가적으로 가질 수 있는 박막(들)의 예는 정공 주입층, 정공 수송층, 전자선 주입층, 전자 수송층, 보호층 등을 포함한다. 추가적으로, 이러한 층들은 각각 다른 기능을 가질 수 있다. 각 층의 형성을 위하여, 다양한 종류의 재료가 사용될 수 있다.
- [0132] 양극은 양공(positive hole)을 양공 주입층, 양공 수송층, 발광층 등에 공급하고, 금속, 합금, 금속 산화물, 전기 전도성 화합물, 또는 이들의 혼합물이 사용되며, 4 eV이상의 일 함수를 갖는 재료가 바람직하게 사용된다. 재료의 상세한 예로는 전기 전도성 금속 산화물, 예컨대 주석 산화물, 아연 산화물, 인듐 산화물 및 인듐 주석 산화물(ITO); 금속, 예컨대 금, 은, 크롬 및 니켈; 이러한 금속들과 전기 전도성 금속 산화물과의 혼합물 또는 적층물; 무기 전기 전도성 물질, 예컨대 구리 요오드화물, 구리 황화물; 유기 전기 전도성 물질, 예컨대 폴리아닐린, 폴리티오펜 및 폴리피롤; 및 이러한 재료들과 ITO의 적층물이 포함된다. 전기 전도성 금속산화물이 바람직하게 사용되고, 생산성, 높은 전도성 및 투명성의 관점에서 ITO가 더 바람직하다. 양극의 필름 두께는 사용되는 재료에 따라서 임의적으로 선택될 수 있으나, 일반적으로 바람직하게 10 nm - 5  $\mu$ m, 더 바람직하게 50 nm - 1  $\mu$ m, 가장 바람직하게 100 nm - 500 nm이다.
- [0133] 양극은 일반적으로 소다-라임 유리, 비-알칼리 유리 또는 투명 수지 기판 위에 형성된 층(들)을 포함한다. 유리 기판이 사용될 때, 유리로부터의 이온들의 용리를 줄이기 위해 비-알칼리 유리가 바람직하게 사용된다. 또한, 소다-라임 유리가 사용될 때, 실리카와 같은 중도용 코트(barrier coat)를 제공하는 것이 바람직하다. 기판의 두께는 기계적인 강도를 충분히 견딜 수 있는 한 특별히 제한되지 않는다. 유리가 사용될 때, 두께는 일반적으로 0.2 mm 이상, 바람직하게 0.7 mm 이상이다.
- [0134] 사용되는 재료에 따라 양극의 생산에 다양한 방법이 사용된다. ITO를 사용하는 경우, 예를 들어 박막층 필름(들)은 전자빔(electron beam)공법, 스퍼터공법, 저항 가열 증착공법, 화학 반응 공법(예를 들어, 졸-겔 공법(sol-gel)), 또는 인듐 주석 산화물의 분산액을 코팅하는 공법에 의해 형성된다.
- [0135] 양극의 세척과 같은 공정을 통해 소자 또는 요소의 운전 전압을 감소시키거나 발광 효율을 증가시키는 것이 가능하다. ITO를 사용하는 경우, 예를 들어, UV-오존 공정 또는 플라즈마(plasma) 처리가 효과적이다.
- [0136] 음극은 전자를 전자 주입층, 전자 수송층, 발광층 등에 공급하고, 음극은 전자 주입층, 전자 수송층 또는 발광층과 같은 음극 주변의 층과의 부착; 이온화포텐셜 및 안정성을 고려하여 선택된다. 음극의 재료로써, 금속, 합금, 금속 할로겐화물, 금속 산화물, 전기 전도성 화합물 또는 이러한 재료의 혼합물들이 사용될 수 있다. 상세한 예로는 알칼리 금속(예를 들어, Li, Na, K) 또는 그 불소화물 또는 산화물, 알칼리 토금속(예를 들어, Mg, Ca) 또는 불소화물 또는 산화물, 금, 은, 납, 알루미늄, 소듐-포타슘 합금 또는 그 금속들의 혼합물, 리튬-알루미늄 합금 또는 그 혼합된 금속, 마그네슘-은 합금 또는 그 금속들의 혼합물 및 희귀 토금속, 예컨대 인듐, 이테르븀 등; 바람직하게 4 eV 이하의 일 함수를 갖는 재료, 더 바람직하게 알루미늄, 리튬-알루미늄 합금 또는 이 금속들의 혼합물, 마그네슘-은 합금 또는 이 금속들의 혼합물이 포함된다. 음극 구조는 상기한 화합물 또는 그 혼합물의 단일층 뿐 아니라, 상기한 화합물 또는 그 혼합물을 포함하는 적층물일 수도 있다. 예를 들어, 알루미늄/리튬 불소화물, 또는 알루미늄/리튬 산화물의 적층 구조가 바람직하다. 음극의 필름 두께는 사용되는 재료에 따라서 임의적으로 선택될 수 있지만, 일반적으로 바람직하게 10 nm - 5  $\mu$ m, 더 바람직하게 50 nm - 1  $\mu$ m, 가장 바람직하게 100 nm - 1  $\mu$ m이다.
- [0137] 전자빔 공법, 스퍼터 공법, 저항 가열 증착법, 코팅 공법 및 트랜스퍼법과 같은 공법이 음극의 생산에 사용되고, 단일 금속이 증착 또는 두 개 이상의 요소가 동시에 증착될 수 있다. 추가적으로, 복수의 금속이 동시에 증착되어 합금 전극을 형성할 수 있고, 대안적으로 이전에 제조한 합금이 증착될 수 있다.
- [0138] 양극 및 음극의 표면 저항이 낮은 것이 바람직하고, 바람직하게 몇백  $\Omega/\square$ 이하이다.
- [0139] 발광층의 재료는 다음과 같은 기능을 하는 층을 이루는 것이 가능한 어떤 재료도 될 수 있으며, 이것은 양극, 정공 주입층 또는 정공 수송층으로부터의 정공 주입 및 음극, 전자 주입층 또는 전기장이 적용될 때 전자 수송층으로부터의 전자 주입 둘 다를 받아들일 수 있는 층, 또는 전하를 그 안에 주입하여 트랜스퍼되게 하거나, 정공과 전자가 재조합되도록 충격을 제공하여 빛의 방출을 가능하게 하는 층이다. 본 발명의 화합물 이외에, 재료의 예는 일반적으로 벤즈옥사졸 유도체, 벤즈이미다졸 유도체, 벤조티아졸 유도체, 스티릴벤젠 유도체, 폴리페닐 유도체, 디페닐부타디엔 유도체, 테트라페닐부타디엔 유도체, 나프탈이미드 유도체, 쿠마린 유도체, 페

릴렌 유도체, 퍼리논 유도체, 옥사디아졸 유도체, 알다진 유도체, 피라리딘 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 비스스티릴안트라센 유도체, 퀴나크리돈 유도체, 피롤로피리딘 유도체, 티아디아졸로피리딘 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 스티릴아민 유도체, 방향족 디메틸리딘 화합물, 및 8-퀴놀리놀 유도체; 중합체 화합물, 예컨대 폴리티오펜, 폴리페닐렌 및 폴리페닐렌비닐렌; 유기 실란; 전이 금속 착물(예를 들어 이리듐 트리스페닐피리딘 및 백금 포르피린 및 그 유도체)의 금속 착물 또는 회귀 토(earth)착물로 예시되는 다양한 금속 착물을 포함한다.

발광층의 필름 두께는 특별히 제한되지 않으나, 일반적으로 바람직하게 1 nm - 5  $\mu$ m, 더 바람직하게 5 nm - 1  $\mu$ m, 가장 바람직하게 10 nm - 500 nm이다.

[0140] 발광(빛 방출)층을 가공하기 위한 특별히 제한된 방법은 없지만, 저항 가열 증착, 전자빔 공법, 스퍼터, 분자 적층, 코팅, 잉크젯 공법, 프린팅, LB 공법, 및 트랜스퍼 공법과 같은 방법이 사용될 수 있다. 바람직한 것은 저항 가열 증착법 및 코팅법이다.

[0141] 발광층은 단일 화합물 또는 두 가지 이상의 종류의 화합물로 형성될 수 있다. 추가로, 발광층은 단일층 구조 또는 두 개 이상의 층으로 만들어진 다층 구조로 형성될 수 있다. 각 층은 다른 형광색의 빛을 방출하여 발광층은, 예를 들어, 백색광을 낼 수 있다. 단일 발광층은 백색광을 방출할 수 있다. 발광층이 복수층일 때, 각 층은 단수의 재료 또는 두 개 이상의 화합물 또는 재료로 형성될 수 있다.

[0142] 양공 주입층 및 양공 수송층의 재료는, 양극으로부터의 양공 주입, 양공 수송 및 음극으로부터 주입된 전자를 저해하는 기능 중 임의의 기능이 있다면, 충분하다. 재료의 상세한 예로, 카르바졸 유도체, 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 폴리아릴알칸 유도체, 피라졸린 유도체, 피라졸론 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노-치환 착콘 유도체, 스티릴란트라센 유도체, 플루오레논 유도체, 히드라존 유도체, 스티벤 유도체, 실라잔 유도체, 방향족 삼차 아민 화합물, 스티릴아민 화합물, 방향족 디메틸리딘-시리즈 화합물, 포르피린-시리즈 화합물, 폴리실란-시리즈 화합물, 폴리(N-비닐카르바졸) 유도체, 아닐린-시리즈 공중합체, 전기 전도성 고분자량 소중합체, 예컨대 티오펜 소중합체 및 폴리티오펜; 유기 실란 화합물, 탄소 필름, 및 본 발명의 화합물이 포함된다. 정공 주입층의 필름 두께는 특별히 제한되지 않으나, 일반적으로, 바람직하게 1 nm - 5  $\mu$ m, 더 바람직하게 1 nm - 100 nm, 가장 바람직하게 1 nm - 10 nm이다. 정공 주입층의 필름 두께는 특별히 제한되지 않으나, 일반적으로 바람직하게 1 nm - 5  $\mu$ m, 더 바람직하게 5 nm - 1  $\mu$ m, 가장 바람직하게 10 nm - 500 nm이다. 정공 주입층 또는 정공 수송층은 상기한 재료 중 한 가지 종류 또는 두 가지 이상의 단일층 구조, 또는 대안적으로, 동일한 조성 또는 다른 조성을 갖는 복수층을 포함하는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0143] 정공 주입층 및 정공 수송층을 형성하는 방법의 예로 진공 증착법, LB법, 상기한 정공-주입/수송 재료를 용매에 용해 또는 분산시키고 코팅하는 공법; 잉크젯법, 프린팅법 및 트랜스퍼법을 포함한다. 코팅 공정의 경우, 양공 주입/수송 재료는 수지 성분과 용해 또는 분산될 수 있다. 이러한 수지의 예는 폴리피닐 염화물, 폴리카보네이트, 폴리스티렌, 폴리메틸 메트아크릴레이트, 폴리부틸 메트아크릴레이트, 폴리에스테르, 폴리설폰, 폴리페닐렌 산화물, 폴리부타디엔, 폴리(N-비닐카르바졸), 탄화수소 수지, 케톤 수지, 페녹시 수지, 폴리아미드, 에틸 셀룰로오스, 비닐 아세테이트, ABS 수지, 폴리우레탄, 멜라민 수지, 불포화 폴리에스테르 수지, 알키드 수지, 에폭시 수지, 실리콘 수지 등을 포함한다.

[0144] 전자 주입층 및 전자 수송층의 재료는, 음극으로부터의 전자 주입, 전자 수송 및 양극으로부터 주입된 양공을 저해(방벽으로)하는 기능 중 임의의 기능이 있다면 충분하다. 재료의 상세한 예로 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 플루오레논 유도체, 안트라퀴노디메탄 유도체, 안트론 유도체, 디페닐퀴논 유도체, 티오피란디옥시드 유도체, 카르보이미드 유도체, 플루오레닐리덴메탄 유도체, 디스티릴피라진 유도체, 나프탈렌 및 페틸렌과 같은 방향족 고리의 테트라카르복실산 무수물, 프탈로시아닌 유도체, 8-퀴놀리놀 유도체의 금속 착물로 표시되는 다양한 금속 착물, 벤즈옥사졸 또는 벤조티아졸 리간드를 갖는 메탈로프탈로시아닌 및 금속 착물, 오가노실란 화합물이 포함된다. 전자 주입층 및 전자 수송층의 필름 두께는 특별히 제한되지 않으나, 일반적으로 바람직하게 1 nm - 5  $\mu$ m, 더 바람직하게 5 nm - 1  $\mu$ m, 가장 바람직하게 10 nm - 500 nm이다. 전자 주입층 및 전자 수송층은 하나 또는 두 개 이상의 상기한 재료를 포함하는 단일층 구조일 수 있고, 또는 동일한 또는 다른 조성의 복수층을 포함하는 다층구조일 수 있다.

[0145] 전자 주입층 및 전자 수송층을 형성하는 방법의 예는 진공 증착법, LB법, 상기한 정공 주입/수송 재료를 용매에 용해 또는 분산시키고 코팅하는 공법; 잉크젯 법, 프린팅법 및 트랜스퍼법을 포함한다. 코팅 공법의 경우에서, 전자 주입/수송 재료는 수지 성분과 함께 용해 또는 분산될 수 있다. 수지 성분으로는, 예를 들어, 양공 주입 및 수송층에서 예시된 것들이 적용될 수 있다.

[0146] 보호층의 재료로는, 만약 소자 또는 요소의 오염을 가속시키는 물질이, 예컨대 물 또는 산소가 소자 또는 요소로 들어오는 것을 막는 기능이 있다면 충분하다. 이 재료의 상세한 예는 금속, 예컨대 In, Sn, Pb, Au, Cu, Ag, Al, Ti 및 Ni; 금속 산화물, 예컨대 MgO, SiO, SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, GeO, NiO, CaO, BaO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 및 TiO<sub>2</sub>; 금속 불소화물, 예컨대 MgF<sub>2</sub>, LiF, AlF<sub>3</sub> 및 CaF<sub>2</sub>; 금속 질소화물, 예컨대 SiN<sub>x</sub> 및 SiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub>; 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, 폴리메틸 메트아크릴레이트, 폴리이미드, 폴리우레아, 폴리테트라플루오로에틸렌, 폴리클로로트리플루오로에틸렌, 폴리디클로로디플루오로에틸렌, 클로로트리플루오로에틸렌 및 디클로로디플루오로에틸렌의 공중합체, 테트라플루오로에틸렌의 단량체 혼합물과 하나 이상의 공단량체를 공중합시켜서 제조한 공중합체, 주쇄에 고리 구조를 갖는 불소-포함 공중합체, 1 % 이상의 물 흡수율을 갖는 물-흡수 물질, 및 0.1 % 이하의 물 흡수율을 갖는 습기-방지 물질을 포함한다.

[0147] 보호층의 형성 공정 또한 특별히 제한되지 않지만 진공 증착법, 스퍼터링 공정, 반응 스퍼터링 공정, MBE(molecular beam epitaxy) 공법, 클러스터 이온 빔(cluster ion beam) 공정, 이온-플레이팅(ion-plating) 공정, 플라즈마 중합 공정(고주파 들뜸 이온-플레이팅 공정; high frequency exciting ion-plating process), 프라즈마 CVD 공정, 레이저 CVD 공정, 열 CVD 고정, 기체 원료 CVD(gas source), 코팅 공정, 프린팅 공정 및 트랜스퍼 공정이 적용될 수 있다.

[0148] 본 발명의 발광 소자는 발광 특성 및 긴 수명에서 우수하다. 또한, 본 발명의 새로운 백금 화합물은, 예를 들어 발광 소자의 생산에 바람직하다.

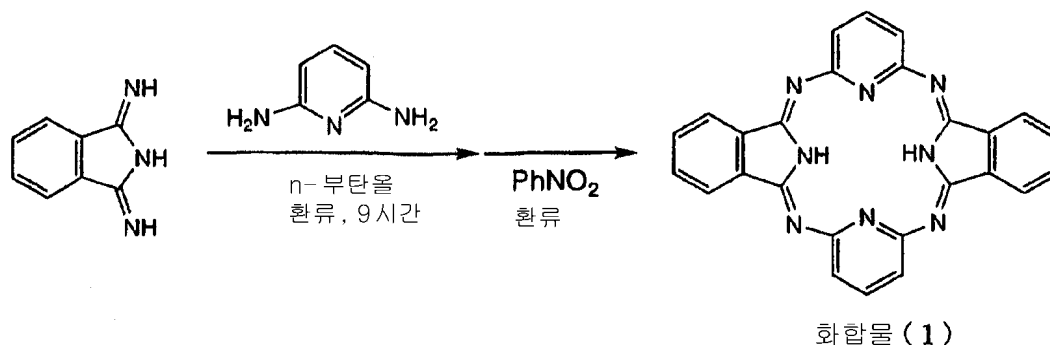
### 실시예

[0149] 본 발명이 더 상세하게 하기의 실시예와 관련하여 설명될 것이지만, 이것으로 본 발명을 수행하는 구현예가 제한되는 것으로 해석되어서는 안된다.

[0150] 화합물 (1)의 합성

[0151] 화합물 (1)은 Journal of Chemical Society, 5008 (1952)에 설명된 방법에 따라 합성되었다. 즉, 40 ml의 n-부탄올을 6 g의 1,3-다이미노인돌린 및 4.6 g의 2,6-다이미노피리딘에 첨가하고, 환류하에서 9 시간 동안 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 여과하였다. 침전물은 40 ml의 n-부탄올로 세척하였고, 50 ml의 니트로벤젠에 분산시켰다. 분산액을 환류하에서 가열한 후, 냉각을 통해 재결정화를 수행하였고, 7 g의 화합물 (1)을 수득하였다.

[0152] 이렇게 수득한 화합물과 관련하여, DP-EI-MS 측정에서 m/z=440의 피크(peak)가 감지되었다.



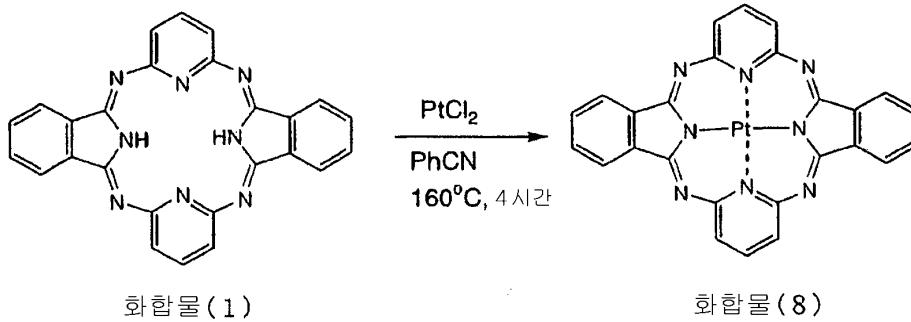
[0153]

[0154] 화합물 (8)의 합성

[0155] 0.1 g의 화합물 (1) 및 0.21 g의 PtCl<sub>2</sub>에 10 ml의 벤조니트릴을 첨가하였고, 이후 160℃의 내부 온도, 질소 대기하에서 4 시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각한 후, 반응 혼합물을 여과하였다. 침전물을 20 ml의 벤조니트릴 및 30 ml의 메탄올로 세척하여 0.05 g의 화합물 (8)을 얻었다.



[0156] 이렇게 수득한 화합물과 관련하여, DP-EI-MS 측정에서  $m/z=633$ 의 피크(peak)가 감지되었다.



[0157]

[0158] 비교예 1

[0159] 깨끗한 ITO 기판을 증착 장치에 위치시키고, 기판 위에 CuPc(구리 프탈로시아닌)을 증착시켜서 10 nm 두께의 필름을 형성하고,  $\alpha$ -NPD(4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비(bi)페닐)을 증착시켜서 40 nm 두께의 필름을 형성하고,  $Alq_3$ (트리스(8-히드록시퀴놀리나토)알루미늄 착물)을 증착시켜서 60 nm 두께의 필름을, 이 순서로 형성시켰다. 이후, 패턴 마스크(patterned mask)(각 방출 부분을 4 mm x 5 mm로 조정하기 위한)를 상기에서 수득한 유기 박막층위에 위치시키고, 그 후, 진공 증착 장치내에서 리튬 불소화물을 증착시켜서 3 nm 두께의 필름을 형성한 후, 400 nm-두께의 Al 필름을 증착시켰다. 이렇게 생산한 EL 소자는, 여기에, Toyo Technica Co., Ltd.,에서 생산한 Model 2400(상표명) 원료 측정 단위를 통해 DC 정전압을 적용함으로써, 발광 처리를 하였고, EL 소자가 보이는 발광은 Topcon Co.에서 생산한 BM-8(상표명) 발광분석기를 통해 측정하였다. 측정 결과로, EL 소자가 제공한 빛 방출은 1.1 %의 양자 효율을 갖는 200  $cd/m^2$ 의 녹색 발광이었다. EL 소자를 10 시간 동안 100  $cd/m^2$ 의 발광 처리하자 짙은 반점이 육안으로 관찰되었다.

[0160] 실시예 1

[0161] 깨끗한 ITO 기판을 증착 장치에 위치시키고, 기판위에 본 발명의 화합물 (8)을 증착시켜서 5 nm 두께의 필름을 형성하고,  $\alpha$ -NPD(4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐)을 증착시켜서 60 nm 두께의 필름을 형성하고,  $Alq_3$ (트리스(8-히드록시퀴놀리나토)알루미늄 착물)을 증착시켜서 40 nm 두께의 필름을, 이 순서로 형성시켰다. 이후, 패턴 마스크(patterned mask)(각 방출 부분을 4 mm x 5 mm로 조정하기 위한)를 상기에서 수득한 유기 박막층위에 위치시키고, 그 후, 진공 증착 장치내에서 리튬 불소화물을 증착시켜서 3 nm 두께의 필름을 형성한 후, 400 nm-두께의 Al 필름을 증착시켰다. 이렇게 생산한 EL 소자는, 여기에, Toyo Technica Co., Ltd.,에서 생산한 Model 2400 원료 측정 단위를 통해 DC 정전압을 적용함으로써, 발광 처리를 하였고, EL 소자가 보이는 발광은 Topcon Co.에서 생산한 BM-8(상표명) 발광분석기를 통해 측정하였다. 측정 결과로, EL 소자가 제공한 빛 방출은 1.4 %의 양자 효율을 갖는 200  $cd/m^2$ 의 녹색 발광이었다. EL 소자를 10 시간 동안 100  $cd/m^2$ 의 발광 처리하여도 짙은 반점이 육안으로 관찰되지 않았다.

[0162] 유사하게, 본 발명의 다른 화합물을 적용하여도, 역시 높은 발광 효율 및 긴 수명을 갖는 발광 소자를 생산할 수 있었다. 추가적으로, 본 발명의 화합물은 청색에서 녹색까지의 인광을 방출하는 것을 가능하게 하였고, 따라서 본 발명의 화합물을 포함하는 청색에서 녹색의 인광 소자를 제조할 수 있다.

### 산업상 이용 가능성

[0163] 본 발명의 발광 소자는 높은 발광 효율을 낼 수 있다. 본 발명의 발광 소자는 바람직하게 표시 소자, 디스플레이, 배광, 전자사진, 조명 광원, 레코딩(recording) 광원, 노출(exposing) 광원, 독서(reading) 광원, 사인(sign), 사인보드(signboard), 인테리어 및 광학 통신 분야에 사용될 수 있다. 추가적으로, 본 발명의 화합물은 전계발광 소자에 사용될 수 있고, 또한 의료용, 증백제(brightening agent), 광재료(photographic material), UV 흡수 재료, 레이저 염료(laser dye), 기록매체재료(recording media material), 잉크젯 안료(inkjet pigment), 색 필터 염료(color filter dye), 색 전환 필터(color conversion filter)등으로 사용될 수 있다.

[0164] 본 구현예와 관련하여 본 발명을 설명하였으나, 우리의 의도는 특별히 명시하지 않는 한, 본 발명이 명세서의 세부 내용에 제한되지 않으며, 첨부되는 청구항에 기재된 정신과 범위 내에서 넓게 해석되는 것이다.

专利名称(译)	有机电致发光器件和铂化合物		
公开(公告)号	<a href="#">KR100956051B1</a>	公开(公告)日	2010-05-06
申请号	KR1020057020614	申请日	2004-05-07
[标]申请(专利权)人(译)	富士胶片株式会社		
申请(专利权)人(译)	富士胶片有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	富士胶片有限公司		
[标]发明人	IGARASHI TATSUYA 이가라시다츠야 WATANABE KOUSUKE 와타나베고우스케 ICHIJIMA SEIJI 이치지마세이지 ISE TOSHIHIRO 이세도시히로		
发明人	이가라시다츠야 와타나베고우스케 이치지마세이지 이세도시히로		
IPC分类号	C09K11/06 H05B33/14 C07D471/22 C07D487/22 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0087 C07D471/22 C07D487/22 C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/185 H01L51/0078 H01L51/5012 H01L51/5016 H05B33/14 Y10S428/917		
优先权	2003132257 2003-05-09 JP 2004088575 2004-03-25 JP		
其他公开文献	KR1020060011979A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

一种有机电致发光器件，其具有一对电极，和至少一个在电极之间包括发光层的有机层，其中所述有机层含有至少一种式(1)的化合物：式(1)其中Q<sup>11</sup>为原子形成含氮杂环；Z<sup>11</sup>至Z<sup>13</sup>各自为取代或未取代的碳或氮原子；n<sup>11</sup>为0或1；M<sup>11</sup>是可以进一步具有配体的金属或硼离子；式(6)的化合物：式(6)其中R<sup>63</sup>至R<sup>66</sup>各自为氢原子或取代基；X<sup>61</sup>至X<sup>64</sup>和Z<sup>61</sup>至Z<sup>66</sup>各自为取代或未取代的碳或氮原子。©KIPO & WIPO 2007

