



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

(11) 공개번호 10-2009-0111779  
 (43) 공개일자 2009년10월27일

(51) Int. Cl.

*C09K 11/06* (2006.01)

(21) 출원번호 10-2009-0034194

(22) 출원일자 2009년04월20일

심사청구일자 없음

(30) 우선권주장

JP-P-2008-111799 2008년04월22일 일본(JP)

JP-P-2008-310220 2008년12월04일 일본(JP)

(71) 출원인

후지필름 가부시키키가이샤

일본 도쿄도 미나토쿠 니시 아자부 2초메 26방 30고

(72) 발명자

무라카미 다케시

일본 가나가와켄 아시가라카미군 가이세이마치 우시지마 577 후지필름 가부시키키가이샤 나이

이세 도시히로

일본 가나가와켄 아시가라카미군 가이세이마치 우시지마 577 후지필름 가부시키키가이샤 나이

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인코리아나

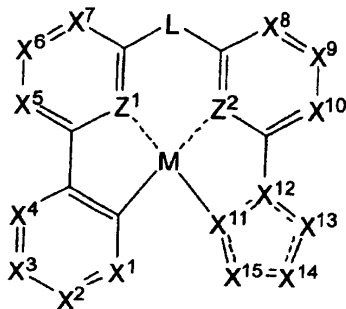
전체 청구항 수 : 총 15 항

**(54) 유기 전계발광 소자, 신규 플레티늄 착물 화합물 및 이의 리간드일 수 있는 신규 화합물**

**(57) 요약**

유기 전계발광 소자는 한 쌍의 전극; 및 한 쌍의 전극 사이에 제공되는 발광층을 포함하는 하나 이상의 유기층을 포함하고, 상기 하나 이상의 유기층 중 하나 이상의 층은 본 명세서에서 정의되는 화학식 (1) 로 나타내는 화합물을 함유한다.

[화학식 1]



(72) 발명자

**기노시타 이쿠오**

일본 가나가와켄 아시가라카미군 가이세이마치 우  
시지마 577 후지필름 가부시키키가이샤 나이

**다카다 사키**

일본 가나가와켄 아시가라카미군 가이세이마치 우  
시지마 577 후지필름 가부시키키가이샤 나이

**다케다 아키라**

일본 가나가와켄 아시가라카미군 가이세이마치 우  
시지마 577 후지필름 가부시키키가이샤 나이

**다키자와 히로오**

일본 가나가와켄 아시가라카미군 가이세이마치 우  
시지마 577 후지필름 가부시키키가이샤 나이

---

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

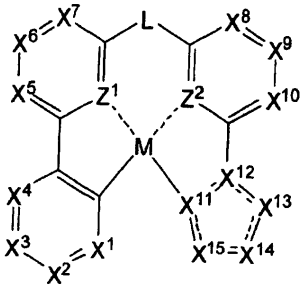
하기를 포함하는 유기 전계발광 소자:

한 쌍의 전극; 및

한 쌍의 전극 사이에 제공되는 발광층을 포함하는 하나 이상의 유기층

{여기서, 하나 이상의 유기층 중 하나 이상의 층은 하기 화학식 (1) 에 의해 나타내는 화합물을 함유함:

[화학식 1]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;

$X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이고;

$Z^1$  및  $Z^2$  각각은 독립적으로 질소 원자 또는 인 원자를 나타내고;

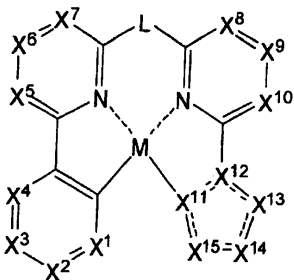
L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타내며;

M 은 2 가 금속 이온을 나타냄}).

**청구항 2**

제 1 항에 있어서, 화학식 (1) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (2) 로 나타내는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 2]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;

$X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이고;

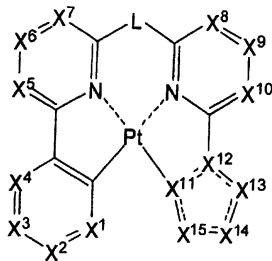
L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타내며;

M 은 2 가 금속 이온을 나타냄).

### 청구항 3

제 2 항에 있어서, 화학식 (2) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (3) 으로 나타내는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 3]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;

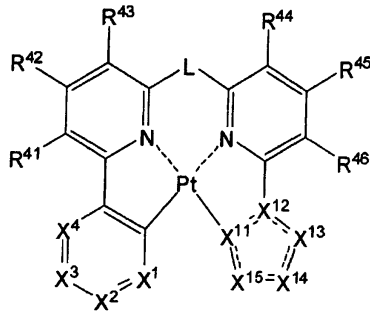
$X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

### 청구항 4

제 3 항에 있어서, 화학식 (3) 으로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4) 로 나타내는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 4]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

$X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;

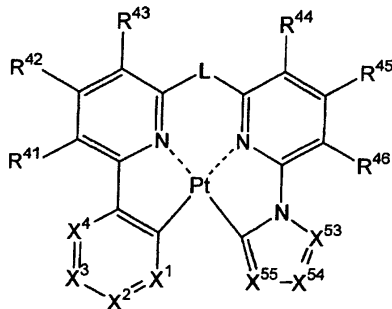
$X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

#### 청구항 5

제 4 항에 있어서, 화학식 (4) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4a-1) 로 나타내는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 4a-1]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

$X^{53}$ ,  $X^{54}$  및  $X^{55}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{53}$ ,  $X^{54}$  및  $X^{55}$  를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이며;

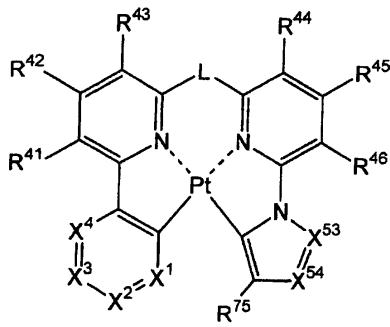
L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

#### 청구항 6

제 5 항에 있어서, 화학식 (4a-1) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4a-2) 로 나타내는 화합물인 유기 전계발

광 소자:

[화학식 4a-2]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

$X^{53}$  및  $X^{54}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{53}$  및  $X^{54}$  를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이고;

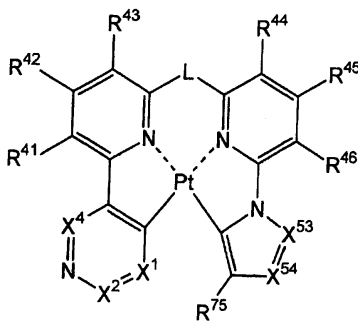
$R^{75}$  는 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

#### 청구항 7

제 6 항에 있어서, 화학식 (4a-2) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4a-3) 으로 나타내는 화합물인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 4a-3]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

$X^{53}$  및  $X^{54}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{53}$  및  $X^{54}$  를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이고;

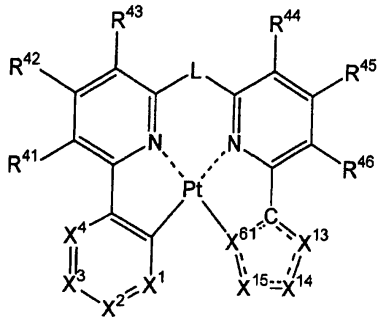
$R^{75}$  는 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

청구항 8

제 4 항에 있어서, 화학식 (4) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4b-1) 로 나타내는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 4b-1]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

$X^{61}$  은 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;

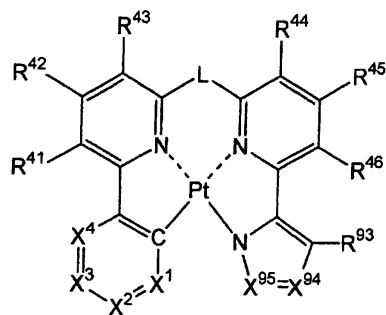
$X^{61}$ , 탄소 원자,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

청구항 9

제 8 항에 있어서, 화학식 (4b-1) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4b-2) 로 나타내는 화합물인 유기 전계발광 소자:

[화학식 4b-2]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

$X^{94}$  및  $X^{95}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{94}$  및  $X^{95}$  중 하나 이상은 탄소 원자를 나타내고;

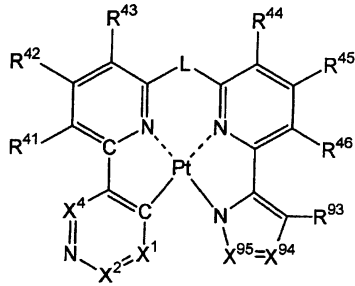
$R^{93}$  은 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

**청구항 10**

제 9 항에 있어서, 화학식 (4b-2) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4b-3) 으로 나타내는 화합물인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 4b-3]



(식 중,  $X^1$ ,  $X^2$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^1$ ,  $X^2$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

$R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

$X^{94}$  및  $X^{95}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

$X^{94}$  및  $X^{95}$  중 하나 이상은 탄소 원자를 나타내고;

$R^{93}$  은 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

**청구항 11**

제 1 항에 있어서, 발광층이 화학식 (1) 로 나타내는 화합물 하나 이상을 함유하는 유기 전계발광 소자.

**청구항 12**

제 1 항에 있어서, 하나 이상의 유기층 중 하나 이상의 층이 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 재료를 함유하는 유기 전계발광 소자.

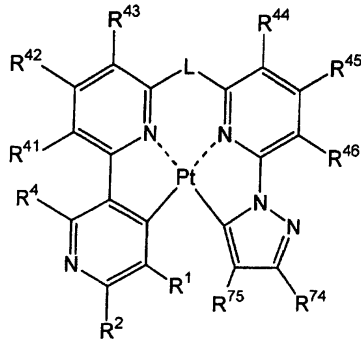
**청구항 13**

제 12 항에 있어서, 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 재료가 하나 이상의 중수소 원자를 각각 갖는 카르바졸 구조 및 인돌 구조 중 어느 하나를 함유하는 재료인 유기 전계발광 소자.

**청구항 14**

하기 화학식 (4a-4) 로 나타내는 화합물:

[화학식 4a-4]



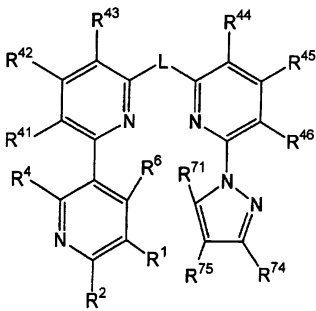
(식 중, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup>, R<sup>74</sup> 및 R<sup>75</sup> 각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

**청구항 15**

하기 화학식 (4a-4') 로 나타내는 화합물:

[화학식 4a-4']



(식 중, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup>, R<sup>71</sup>, R<sup>74</sup> 및 R<sup>75</sup> 각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

**명세서**

**발명의 상세한 설명**

**기술분야**

<1> 본 발명은 유기 전계발광 소자 (이후 "소자" 또는 "유기 EL 소자" 로도 칭함) 에 관한 것이다. 특히, 본 발명은 고휘도에서 내구성이 우수한 유기 전계발광 소자에 관한 것이다.

**배경기술**

<2> 최근, 유기 전계발광 소자 (유기 EL 소자) 는, 고휘도의 발광이 저전압 구동에 의해 수득되기 때문에, 활발히 연구되고 개발되고 있다. 일반적으로, 유기 EL 소자는 발광층을 포함하는 유기층 및 한 쌍의 전극 사이에 유기층을 갖는 한 쌍의 전극으로 구성되고, 캐소드로부터 주입된 전자와 애노드로부터 주입된 정공이 발광층에서 서로 재결합하고 형성된 여기 에너지가 사용되는 소자이다.

<3> 최근, 인광 재료를 이용함으로써 소자의 고효율을 상승시키고 있다. 인광 발광 재료로서 이리듐 착물, 플레티늄 착물 등이 알려져 있다 (예를 들어, JP-A-2005-220136 참조).

- <4> 네자리 리간드를 갖는 플래티늄 착물을 사용함으로써 유기 EL 소자의 내구성 및 발광 효율을 강화시키는 기술이 공지되어 있다 (예를 들어, WO 04/108857 참조). 이러한 플래티늄 착물 중에서, 피리딜피리딘 구조를 갖는 착물은 페닐피리딘 구조를 갖는 착물에 대해 방출 파장을 짧게 할 수 있고, 담청색 내지 청색 발광 재료로서 기대되고 있다. 그러나, 내구성이 우수한 발광 재료는 보고되어 있지 않다.
- <5> 또한, 피리딜피리딘 구조를 갖는 발광 재료 및 이를 사용하는 유기 EL 소자가 공지되어 있다 (JP-A-2006-261623 참조). JP-A-2006-261623 에는 방출 휘도가 높고 발광 효율이 높으며 내구성이 높은 유기 EL 소자가 수득된다고 기재되어 있다.

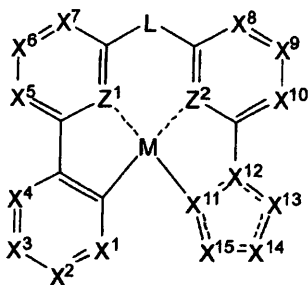
**발명의 내용**

**해결 하고자하는 과제**

- <6> 그러나, 특히 고휘도에서 사용시 높은 효율성 및 내구성을 모두 충족시킬 수 있는 소자는 아직 개발되지 않고 있다. 디스플레이 또는 조명 기기를 위한 유기 EL 소자의 개발을 고려하는 경우, 고휘도에서 이를 이용하는 것이 필요하다. 따라서, 고휘도에서 내구성이 우수한 발광 재료를 개발하는 것이 바람직하다.
- <7> 본 발명의 목적은 고휘도에서 사용시 내구성이 우수한 유기 전계발광 소자를 제공하는 것이다.
- <8> 또한, 본 발명의 또다른 목적은 고휘도에서 사용시 우수한 내구성을 실현시킬 수 있는 발광 재료를 제공하는 것이다.

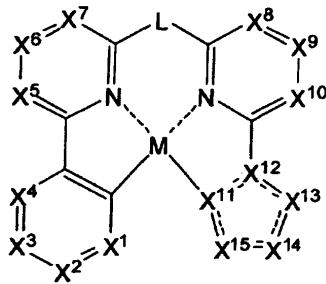
**과제 해결수단**

- <9> 상기 문제점을 해결하기 위해, 본 발명자들은 광범위한 연구를 하였다. 그 결과, 본 발명자들은 플래티늄에 대한 결합이 질소-함유 헤테로시클릭 6-원 고리의 탄소 원자에서 형성되고 플래티늄에 대한 결합이 2 이하의 질소 원자를 함유하는 5-원 고리의 질소 원자 또는 탄소 원자에서 형성되는 금속 착물을 발견하였고, 추가로 유기층에 상기 금속 착물을 첨가함으로써, 유기 EL 소자의 내구성이 공지된 발광 재료와 비교하여 고휘도에서 사용시 강화된다는 것을 발견하였다.
- <10> 또한, 유기층에 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 재료를 사용함으로써, 내구성이 더욱 강화된다는 것을 발견하였다.
- <11> 즉, 상기 문제점을 다음과 같은 수단으로 해결할 수 있다.
- <12> [1] 하기를 포함하는 유기 전계발광 소자:
- <13> 한 쌍의 전극; 및
- <14> 한 쌍의 전극 사이에 제공되는 발광층을 포함하는 하나 이상의 유기층
- <15> {여기서, 하나 이상의 유기층 중 하나 이상의 층은 하기 화학식 (1) 에 의해 나타내는 화합물을 함유함:
- <16> [화학식 1]

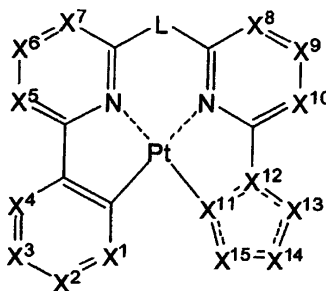


- <17>
- <18> (식 중, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <19> X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;
- <20> X<sup>5</sup>, X<sup>6</sup>, X<sup>7</sup>, X<sup>8</sup>, X<sup>9</sup> 및 X<sup>10</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

- <21>  $X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <22>  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;
- <23>  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이고;
- <24>  $Z^1$  및  $Z^2$  각각은 독립적으로 질소 원자 또는 인 원자를 나타내고;
- <25> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타내며;
- <26> M 은 2 가 금속 이온을 나타냄}.
- <27> [2] 상기 화학식 (1) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (2) 로 나타내는 화합물인, 상기 [1] 에 기재된 유기 전계발광 소자:
- <28> [화학식 2]

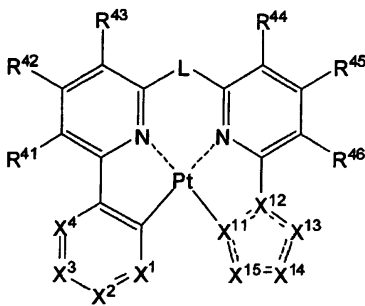


- <29>
- <30> (식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <31>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;
- <32>  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <33>  $X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <34>  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;
- <35>  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이고;
- <36> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타내며;
- <37> M 은 2 가 금속 이온을 나타냄).
- <38> [3] 상기 화학식 (2) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (3) 으로 나타내는 화합물인, 상기 [2] 에 기재된 유기 전계발광 소자:
- <39> [화학식 3]

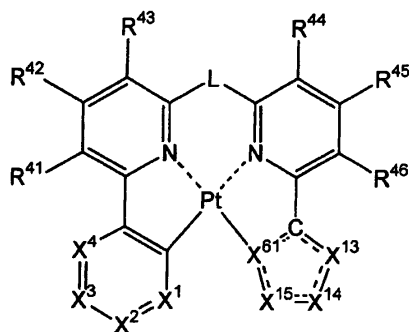


- <40>
- <41> (식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

- <42>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;
- <43>  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <44>  $X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <45>  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;
- <46>  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며;
- <47> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).
- <48> [4] 상기 화학식 (3) 으로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4) 로 나타내는 화합물인, 상기 [3] 에 기재된 유기 전계발광 소자:
- <49> [화학식 4]

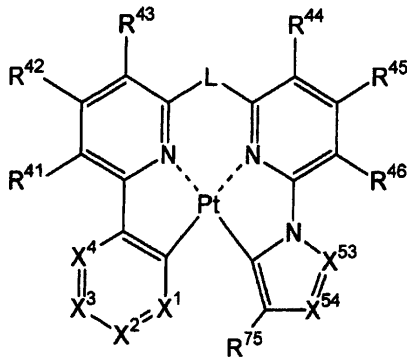


- <50>
- <51> (식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <52>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;
- <53>  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;
- <54>  $X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <55>  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;
- <56>  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며;
- <57> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).
- <58> [5] 상기 화학식 (4) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4a-1) 로 나타내는 화합물인, 상기 [4] 에 기재된 유기 전계발광 소자:
- <59> [화학식 4a-1]

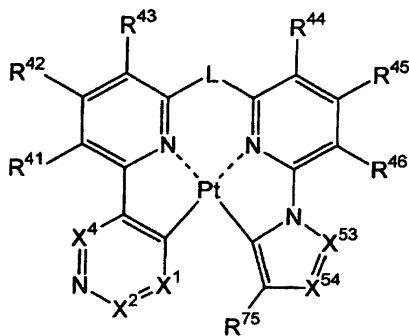


- <60>
- <61> (식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

- <62>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;
- <63>  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;
- <64>  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  및  $X^{55}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <65>  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  및  $X^{55}$  를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이며;
- <66> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).
- <67> [6] 상기 화학식 (4a-1) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4a-2) 로 나타내는 화합물인, 상기 [5] 에 기재된 유기 전계발광 소자:
- <68> [화학식 4a-2]



- <69>
- <70> (식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <71>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;
- <72>  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;
- <73>  $X^{53}$  및  $X^{54}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;
- <74>  $X^{53}$  및  $X^{54}$  를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이고;
- <75>  $R^{75}$  는 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;
- <76> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).
- <77> [7] 상기 화학식 (4a-2) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4a-3) 으로 나타내는 화합물인, 상기 [6] 에 기재된 유기 전계발광 소자:
- <78> [화학식 4a-3]



- <79>
- <80> (식 중,  $X^1$ ,  $X^2$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

<81>  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

<82>  $X^{53}$  및  $X^{54}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

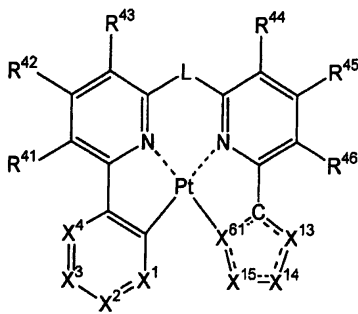
<83>  $X^{53}$  및  $X^{54}$  를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이고;

<84>  $R^{75}$  는 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

<85> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

<86> [8] 상기 화학식 (4) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4b-1) 로 나타내는 화합물인, 상기 [4] 에 기재된 유기 전계발광 소자:

<87> [화학식 4b-1]



<88>

<89> (식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

<90>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;

<91>  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

<92>  $X^{61}$  은 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

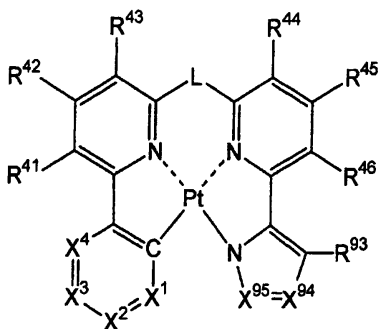
<93>  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;

<94>  $X^{61}$ , 탄소 원자,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며;

<95> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

<96> [9] 상기 화학식 (4b-1) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (4b-2) 로 나타내는 화합물인, 상기 [8] 에 기재된 유기 전계발광 소자:

<97> [화학식 4b-2]



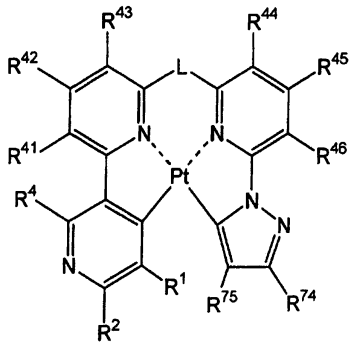
<98>

<99> (식 중,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;

<100>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;



<120> [화학식 4a-4]



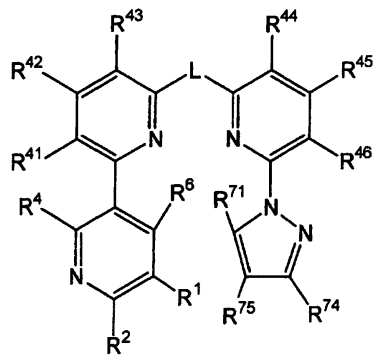
<121>

<122> (식 중, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup>, R<sup>74</sup> 및 R<sup>75</sup> 각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

<123> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

<124> [15] 하기 화학식 (4a-4') 로 나타내는 화합물:

<125> [화학식 4a-4']



<126>

<127> (식 중, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup>, R<sup>71</sup>, R<sup>74</sup> 및 R<sup>75</sup> 각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내며;

<128> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타냄).

### 효과

<129> 본 발명에 따르면, 상기 화학식 (1) 로 나타내는 화합물을 유기층에 함유함으로써, 특히 고휘도에서 사용시 내구성이 우수한 유기 전계발광 소자를 제공할 수 있다.

<130> 또한, 화학식 (4a-4) 로 나타내는 화합물 및 본 발명에 따른 화학식 (4a-4') 로 나타내는 화합물에 따르면, 고 휘도에서 사용시 우수한 내구성을 실현시킬 수 있는 발광 재료를 제공할 수 있다.

### 발명의 실시를 위한 구체적인 내용

<131> 본 발명에 따른 유기 EL 소자의 바람직한 구현예는 이하에 기재된다.

<132> 본 명세서에서, 치환기 B 는 다음과 같이 정의된다.

<133> (치환기 B)

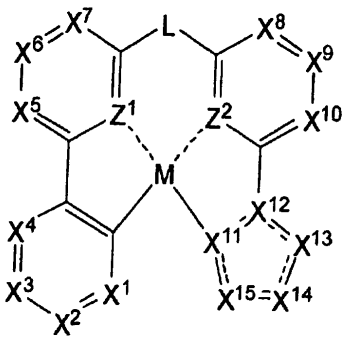
<134> 치환기 B 의 예에는 알킬기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 알킬기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 알킬기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 10 의 알킬기; 예를 들어, 메틸, 에틸, 이소프로필, tert-부틸, n-옥틸, n-데실, n-헥사데실, 시클로프로필, 시클로헥틸, 시클로헥실 등), 알케닐기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30 의 알케닐기, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20 의 알케닐기, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 의 알케닐기; 예를 들어, 비닐, 알릴, 2-부테닐, 3-펜테닐 등), 알킬닐기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30 의 알킬

닐기, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20 의 알킬닐기, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 의 알킬닐기; 예를 들어, 프로파르길, 3-펜틸닐 등), 아릴기 (바람직하게는 탄소수 6 내지 30 의 아릴기, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20 의 아릴기, 특히 바람직하게는 탄소수 6 내지 12 의 아릴기; 예를 들어, 페닐, p-메틸페닐, 나프틸, 안트라닐 등), 아미노기 (바람직하게는 탄소수 0 내지 30 의 아미노기, 더욱 바람직하게는 탄소수 0 내지 20 의 아미노기, 특히 바람직하게는 탄소수 0 내지 10 의 아미노기; 예를 들어, 아미노, 메틸아미노, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 디벤질아미노, 디페닐아미노, 디톨릴아미노 등); 알콕시기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 알콕시기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 알콕시기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 10 의 알콕시기; 예를 들어, 메톡시, 에톡시, 부톡시, 2-에틸헥실옥시 등), 아릴옥시기 (바람직하게는 탄소수 6 내지 30 의 아릴옥시기, 탄소수 6 내지 20 의 아릴옥시기, 특히 바람직하게는 탄소수 6 내지 12 의 아릴옥시기; 예를 들어, 페녹시, 1-나프톡시, 2-나프톡시 등), 헤테로시클릭 옥시기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 헤테로시클릭 옥시기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 헤테로시클릭 옥시기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 헤테로시클릭 옥시기; 예를 들어, 피리딜옥시, 피라질옥시, 피리미딜옥시, 퀴놀릴옥시 등), 아실기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 아실기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 아실기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 아실기; 예를 들어, 아세틸, 벤조일, 포르밀, 피발로일 등), 알콕시카르보닐기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30 의 알콕시카르보닐기, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20 의 알콕시카르보닐기, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 12 의 알콕시카르보닐기; 예를 들어, 메톡시카르보닐, 에톡시카르보닐 등), 아릴옥시카르보닐기 (바람직하게는 탄소수 7 내지 30 의 아릴옥시카르보닐기, 더욱 바람직하게는 탄소수 7 내지 20 의 아릴옥시카르보닐기, 특히 바람직하게는 탄소수 7 내지 12 의 아릴옥시카르보닐기; 예를 들어, 페닐옥시카르보닐 등), 아실옥시기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30 의 아실옥시기, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20 의 아실옥시기, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 의 아실옥시기; 예를 들어, 아세톡시, 벤조일옥시 등), 아실아미노기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30 의 아실아미노기, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20 의 아실아미노기, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 의 아실아미노기; 예를 들어, 아세틸아미노, 벤조일아미노 등), 알콕시카르보닐아미노기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30 의 알콕시카르보닐아미노기, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20 의 알콕시카르보닐아미노기, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 12 의 알콕시카르보닐아미노기; 예를 들어, 메톡시카르보닐아미노 등), 아릴옥시카르보닐아미노기 (바람직하게는 탄소수 7 내지 30 의 아릴옥시카르보닐아미노기, 더욱 바람직하게는 탄소수 7 내지 20 의 아릴옥시카르보닐아미노기, 특히 바람직하게는 탄소수 7 내지 12 의 아릴옥시카르보닐아미노기; 예를 들어, 페닐옥시카르보닐아미노 등), 설폰닐아미노기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 설폰닐아미노기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 설폰닐아미노기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 설폰닐아미노기; 예를 들어, 메탄설폰닐아미노, 벤젠설폰닐아미노 등), 설파모일기 (바람직하게는 탄소수 0 내지 30 의 설파모일기, 더욱 바람직하게는 탄소수 0 내지 20 의 설파모일기, 특히 바람직하게는 탄소수 0 내지 12 의 설파모일기; 예를 들어, 설파모일, 메틸설파모일, 디메틸설파모일, 페닐설파모일 등), 카르바모일기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 카르바모일기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 카르바모일기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 카르바모일기; 예를 들어, 카르바모일, 메틸카르바모일, 디에틸카르바모일, 페닐카르바모일 등), 알킬티오기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 알킬티오기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 알킬티오기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 알킬티오기; 예를 들어, 메틸티오, 에틸티오 등), 아릴티오기 (바람직하게는 탄소수 6 내지 30 의 아릴티오기, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20 의 아릴티오기, 특히 바람직하게는 탄소수 6 내지 12 의 아릴티오기; 예를 들어, 페닐티오 등), 헤테로시클릭 티오기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 헤테로시클릭 티오기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 헤테로시클릭 티오기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 헤테로시클릭 티오기; 예를 들어, 피리딜티오, 2-벤즈이미졸릴티오, 2-벤즈옥사조일티오, 2-벤즈티아조일티오 등), 설폰닐기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 설폰닐기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 설폰닐기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 설폰닐기; 예를 들어, 메실, 토실 등), 설피닐기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 설피닐기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 설피닐기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 설피닐기; 예를 들어, 메탄설피닐, 벤젠설피닐 등), 우레이도기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 우레이도기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 우레이도기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 우레이도기; 예를 들어, 우레이도, 메틸우레이도, 페닐우레이도 등), 인산 아미드기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 인산 아미드기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20 의 인산 아미드기, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 인산 아미드기; 예를 들어, 디에틸인산 아미드, 페닐인산 아미드 등), 히드록실기, 메르캅토기, 할로젠 원자 (예를 들어, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자), 시아노기, 설피노기, 카르복실기, 니트로기, 히드록삼산기, 설피노기, 히드라지노기, 이미노기, 헤테로시클릭 (헤테로아릴) 기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30 의 헤테로시클릭기, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 의 헤테로시클릭기; 헤테로 원자의 예에는 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자가

포함되고; 헥테로시클릭기의 특정 예에는 이미다졸릴, 피리딜, 퀴놀릴, 푸릴, 티에닐, 피페리딜, 모르폴리노, 벤즈옥사졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈티아졸릴, 카바졸릴 및 아제피닐), 실릴기 (바람직하게는 탄소수 3 내지 40 의 실릴기, 더욱 바람직하게는 탄소수 3 내지 30 의 실릴기, 특히 바람직하게는 탄소수 3 내지 24 의 실릴기; 예를 들어, 트리메틸실릴, 트리페닐실릴 등) 및 실릴옥시기 (바람직하게는 탄소수 3 내지 40 의 실릴옥시기, 더욱 바람직하게는 탄소수 3 내지 30 의 실릴옥시기, 특히 바람직하게는 탄소수 3 내지 24 의 실릴옥시기; 예를 들어, 트리메틸실릴옥시, 트리페닐실릴옥시 등) 가 포함된다. 이러한 치환기는 추가로 치환될 수 있다. 추가 치환기로서, 상기 치환기 B 중에서 선택된 기가 예시될 수 있다.

- <135> 본 발명에 따른 유기 EL 소자는 하나 이상의 발광층을 포함하는 유기층을 한 쌍의 전극 사이에 갖는 한 쌍의 전극을 포함하는 것이다. 발광층 이외에, 유기층은 유기층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 차단층, 전자 차단층, 엑시톤 차단층 등을 포함할 수 있다. 각 층은 또한 다른 기능을 수행할 수 있다. 또한, 각 층은 복수의 제 2 층으로 분리될 수 있다.
- <136> 유기층의 적층의 구현예로서, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층이 애노드 측면으로부터 적층되어 있는 것이 바람직하다. 더욱이, 전하 차단층 등은 정공 수송층과 발광층 사이에서, 및/또는 발광층과 전자 수송층 사이에서 제공될 수 있다. 정공 주입층은 애노드와 정공 수송층 사이에서 제공될 수 있고; 전자 주입층은 캐소드와 전자 수송층 사이에서 제공될 수 있다.
- <137> 하나 이상의 임의의 유기층은 특정 구조를 갖는 금속 착물을 함유하고, 이 금속 착물은 상기 화학식 (1) 내지 (4), (4a-1) 내지 (4a-4) 및 (4b-1) 내지 (4b-3) 중 임의의 하나로 나타낸다 (금속 착물은 이후 일반적으로 "특정 구조를 갖는 금속 착물"로서 칭함).
- <138> 특정 구조를 갖는 금속 착물은 이의 기능에 대해 제한되지 않지만, 발광 재료, 호스트 재료, 엑시톤 차단 재료, 전하 차단 재료 또는 전하 수송 재료로서 이용될 수 있다. 특히, 발광 재료, 호스트 재료 또는 전하 수송 재료로서 특정 구조를 갖는 금속 착물을 이용하는 경우가 더욱 바람직하고; 발광 재료 또는 호스트 재료로서 특정 구조를 갖는 금속 착물을 이용하는 경우가 훨씬 바람직하며; 발광 재료로서 특정 구조를 갖는 금속 착물을 이용하는 경우가 가장 바람직하다.
- <139> 또한, 특정 구조를 갖는 금속 착물은 임의의 상기 유기층에 함유될 수 있다. 특정 구조를 갖는 금속 착물은 바람직하게는 발광층에 함유되고, 더욱 바람직하게는 발광 재료 또는 호스트 재료로서 발광층에 함유되고, 훨씬 바람직하게는 발광 재료로서 발광층에 함유되며, 특히 바람직하게는 하나 이상의 종류의 호스트 재료와 함께 발광층에 함유된다.
- <140> 특정 구조를 갖는 금속 착물이 발광층에 발광 재료로서 함유되는 경우, 이의 함량은 발광층의 총 질량에 대해 바람직하게는 0.1 질량% 이상 내지 60 질량% 이하의 범위, 더욱 바람직하게는 0.2 질량% 이상 내지 50 질량% 이하의 범위, 훨씬 바람직하게는 0.3 질량% 이상 내지 40 질량% 이하의 범위, 가장 바람직하게는 0.5 질량% 이상 내지 30 질량% 이하의 범위이다. (본 명세서에서, 질량비는 중량비와 동일함).
- <141> 또한, 특정 구조를 갖는 금속 착물이 다른 발광 재료와 함께 사용되는 경우, 특정 구조를 갖는 금속 착물의 함량은 전체 발광 재료의 질량에 대해 바람직하게는 0.1 질량% 이상 내지 60 질량% 이하의 범위, 더욱 바람직하게는 0.2 질량% 이상 내지 50 질량% 이하의 범위, 훨씬 바람직하게는 0.3 질량% 이상 내지 40 질량% 이하의 범위, 가장 바람직하게는 0.5 질량% 이상 내지 35 질량% 이하의 범위이다.
- <142> 특정 구조를 갖는 금속 착물이 발광층 이외의 다른 층 (예를 들어, 전하 수송층 등) 에 사용되는 경우, 특정 구조를 갖는 금속 착물은 해당 층에 바람직하게는 10 질량% 내지 100 질량%의 양, 더욱 바람직하게는 30 질량% 내지 100 질량%의 양으로 함유된다.
- <143> 특정 구조를 갖는 금속 착물은 이하에 기재된다.
- <144> 화학식 (1) 내지 (4), (4a-1) 내지 (4a-4), (4b-1) 내지 (4b-3) 및 (4a-4') 에서, 수소 원자는 또한 동위원소 (예를 들어, 중수소 등) 를 포함하고; 치환기를 구성하는 원자는 또한 이의 동위원소를 포함한다.
- <145> 또한, 상기 화학식에서, 배위 결합은 중성 원자의 고립 전자쌍이 금속에 배위 결합될 때 형성된 결합이고, 본 명세서에서 점선으로 표현된다. 또한, 공유 결합은 1 가 음이온이 금속에서 배위 결합될 때 형성된 결합이고, 본 명세서에서 실선으로 표현된다.
- <146> 하기 화학식 (1) 로 나타내는 금속 착물이 기재된다.

<147> [화학식 1]



<148>

<149> 상기 화학식에서,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이고;  $Z^1$  및  $Z^2$  각각은 독립적으로 질소 원자 또는 인 원자를 나타내고; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타내며; M 은 2 가 금속 이온을 나타낸다.

<150>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각이 추가로 치환될 수 있는 경우,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 치환기를 가질 수 있다.  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  가 치환기를 갖는 경우, 치환기의 예에는 상기 치환기 B 로 나타내는 것이 포함된다. 치환기로서, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 방향족 헤테로시클릭기, 디알킬아미노기, 디아릴아미노기, 알킬옥시기, 시아노기 및 할로젠 원자가 바람직하고; 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 디알킬아미노기, 시아노기 및 불소 원자가 더욱 바람직하며; 알킬기, 트리플루오로메틸기 및 불소 원자가 훨씬 바람직하다. 또한, 가능하다면, 치환기는 서로 연결되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있다.

<151>  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 임의의 하나 이상은 질소 원자를 나타낸다. 질소 원자의 수는 바람직하게는 1 내지 2 이고, 더욱 바람직하게는 1 이다.

<152> 질소 원자는  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 임의에 위치할 수 있다.  $X^2$  또는  $X^3$  이 질소 원자인 것이 바람직하고,  $X^3$  이 질소 원자인 것이 더욱 바람직하다.

<153> 화학식 (1) 에서, 2 개의 탄소 원자,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  로부터 형성된 6-원 고리의 예에는 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리, 피리다진 고리 및 트리아진 고리가 포함된다. 이 중에서, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리 및 피리다진 고리가 더욱 바람직하고; 피리딘 고리가 특히 바람직하다.  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  로부터 형성된 6-원 고리가 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리 또는 피리다진 고리 (특히 바람직하게는 피리딘 고리) 인 경우, 금속-탄소 결합이 형성되는 위치에서 존재하는 수소 원자의 산성도는 벤젠 고리와 비교하여 증가되고, 금속 착물은 더욱 용이하게 형성된다. 따라서, 이러한 점이 유리하다.

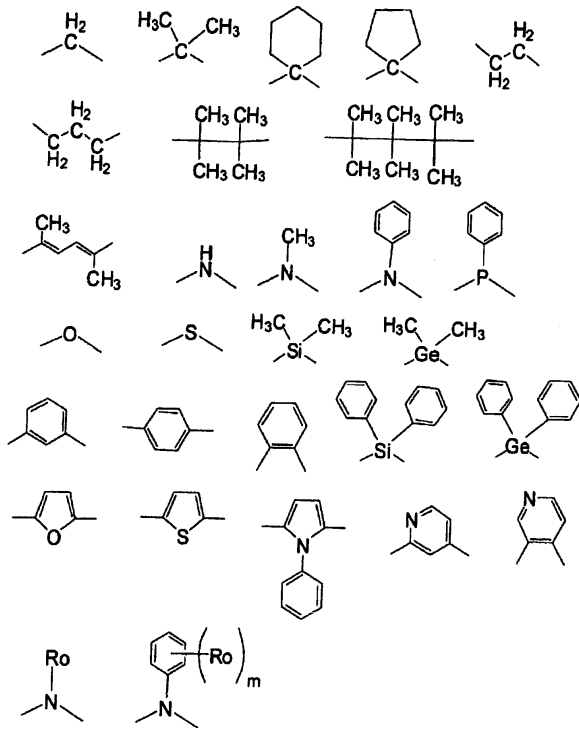
<154>  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 바람직하게는 탄소 원자를 나타낸다.

<155>  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각이 추가로 치환될 수 있는 경우,  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 치환기를 가질 수 있다.  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  및  $X^{10}$  각각이 치환기를 갖는 경우, 치환기의 예에는 상기 치환기 B 로 나타내는 것이 포함된다. 치환기로서, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 방향족 헤테로시클릭기, 디알킬아미노기, 디아릴아미노기, 알킬옥시기, 시아노기 및 할로젠 원자가 바람직하고; 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 디알킬아미노기, 시아노기 및 불소 원자가 더욱 바람직하며; 알킬기, 디알킬아미노기, 트리플루오로메틸기 및 불소 원자가 훨씬 바람직하다. 또한, 가능하다면, 치환기는 서로 연결되어 축합

고리 구조를 형성할 수 있다.

- <156>  $X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^{11}$  또는  $X^{12}$  중 하나가 탄소 원자이고, 나머지가 질소 원자인 것이 바람직하다.
- <157>  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고, 더욱 바람직하게는 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다.
- <158>  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하 (0, 1 또는 2) 이고, 바람직하게는 1 또는 2, 더욱 바람직하게는 2 이다.
- <159>  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각이 추가로 치환될 수 있는 경우,  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 치환기를 가질 수 있다.  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각이 치환기를 갖는 경우, 치환기의 예에는 상기 치환기 B 로 나타내는 것이 포함된다. 치환기로서, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 방향족 헤테로시클릭기, 디알킬아미노기, 디아릴아미노기, 알킬옥시기, 시아노기 및 할로젠 원자가 바람직하고; 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 디알킬아미노기, 시아노기 및 불소 원자가 더욱 바람직하며; 알킬기, 시아노기, 트리플루오로메틸기 및 불소 원자가 훨씬 바람직하다. 또한, 가능하다면, 치환기는 서로 연결되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있다.
- <160>  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조 내 결합은 단일 결합 및 이중 결합의 임의의 조합일 수 있다.  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로부터 형성된 5-원 고리의 예에는 피롤 고리, 피라졸 고리, 이미다졸 고리, 푸란 고리 및 티오펜 고리가 포함된다. 이 중에서, 피롤 고리, 피라졸 고리 및 이미다졸 고리가 더욱 바람직하고; 피롤 고리 및 피라졸 고리가 훨씬 바람직하다.  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로부터 형성된 5-원 고리가 피롤 고리, 피라졸 고리 또는 이미다졸 고리 (훨씬 바람직하게는 피롤 고리 또는 피라졸 고리) 인 경우, 금속 착물의 안정성은 강화되고, 따라서 이러한 점이 유리하다.
- <161>  $Z^1$  및  $Z^2$  각각은 독립적으로 질소 원자 또는 인 원자를 나타내고, 바람직하게는 질소 원자를 나타낸다. 화학식 (1) 에서,  $Z^1$ , 탄소 원자,  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$  및 탄소 원자로부터 형성된 6-원 고리와  $Z^2$ , 탄소 원자,  $X^8$ ,  $X^9$ ,  $X^{10}$  및 탄소 원자로부터 형성된 6-원 고리 각각의 예에는 포스포닌 고리, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리, 피리다진기 및 트리아진 고리가 포함된다. 이 중에서, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리 및 피리다진 고리가 더욱 바람직하고; 피리딘 고리가 특히 바람직하다. 이러한 6-원 고리가 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리 또는 피리다진 고리 (특히 바람직하게는 피리딘 고리) 인 경우, 금속에 대해 안정한 배위 결합이 형성되고, 금속 착물의 안정성이 강화된다. 특히, 피리딘 고리에서, 금속 상의 배위 결합 부분은 단일 질소 원자이다. 따라서, 각각 분자에 복수의 질소 원자를 갖는 피라진 고리 또는 피리미딘 고리와 비교하여, 피리딘 고리는, 금속 착물의 합성 동안 부반응이 억제될 수 있고 금속 착물이 고수율로 제조될 수 있기 때문에, 유리하다.
- <162> L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다. L 로 나타내는 2 가 연결기의 예에는 알킬렌기 (예를 들어, 메틸렌, 에틸렌, 프로필렌 등), 아릴렌기 (예를 들어, 페닐렌, 나프탈렌디일 등), 헤테로아릴렌기 (예를 들어, 피리딘디일, 티오펜디일 등), 이미노기 (-NR-) (예를 들어, 페닐이미노기 등), 옥시기 (-O-), 티오기 (-S-), 포스포니텐기 (-PR-) (예를 들어, 페닐포스포니텐기 등), 실릴렌기 (-SiRR') (예를 들어, 디메틸실릴렌기, 디페닐실릴렌기 등) 및 이들의 조합이 포함된다. 이러한 연결기는 추가로 치환기를 가질 수 있다. 이러한 연결기가 치환기를 갖는 경우, 치환기의 예에는 상기 치환기 B 로 나타내는 것이 포함된다.
- <163> L 은 바람직하게는 단일 결합, 알킬렌기, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 이미노기, 옥시기, 티오기 또는 실릴렌기 이고; 더욱 바람직하게는 단일 결합, 알킬렌기, 아릴렌기 또는 이미노기이고; 훨씬 바람직하게는 단일 결합, 알킬렌기 또는 아릴렌기이고; 더욱더 바람직하게는 단일 결합, 메틸렌기 또는 페닐렌기이고; 훨씬더 바람직하게는 단일 결합 또는 이-치환 메틸렌기이고; 훨씬 더욱더 바람직하게는 단일 결합, 디메틸메틸렌기, 디에틸메틸렌기, 디이소부틸메틸렌기, 디벤질메틸렌기, 에틸메틸메틸렌기, 메틸프로필메틸렌기, 이소부틸메틸메틸렌기, 디페닐메틸렌기, 메틸페닐메틸렌기, 시클로hex산디일기, 시클로헥탄디일기, 플루오렌디일기 또는 플루오로메틸메틸렌기이고; 특히 바람직하게는 단일 결합, 디메틸메틸렌기, 디페닐메틸렌기 또는 시클로hex산디일기이며; 가장 바람직하게는 디메틸메틸렌기 또는 디페닐메틸렌기이다.

<164> 2 가 연결기의 특징 예는 하기 제공될 것이나, 본 발명이 여기에 제한된다고 해석되어서는 안된다.



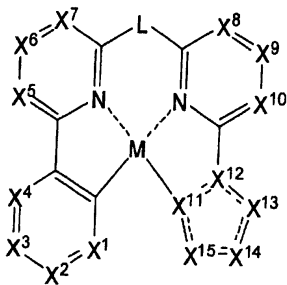
<165>

<166> 상기에서, Ro 는 상기 치환기 B 의 것으로부터 선택된 치환기를 나타낸다. Ro 는 바람직하게는 알킬기이고, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 6 의 알킬기이다. m 은 1 내지 5 의 정수를 나타낸다. m 은 바람직하게는 2 내지 5 이고, 더욱 바람직하게는 2 내지 3 이다.

<167> M 은 2 가 금속 이온을 나타낸다. 금속 종의 예에는 아연 이온, 구리 이온, 니켈 이온, 팔라듐 이온 및 플래티늄 이온이 포함된다. 이 중에서, 구리 이온, 팔라듐 이온 및 플래티늄 이온이 더욱 바람직하고; 팔라듐 이온 및 플래티늄 이온이 훨씬 바람직하고; 플래티늄 이온이 특히 바람직하다.

<168> 화학식 (1) 로 나타내는 금속 착물은 바람직하게는 하기 화학식 (2) 로 나타내는 금속 착물이다.

<169> [화학식 2]



<170>

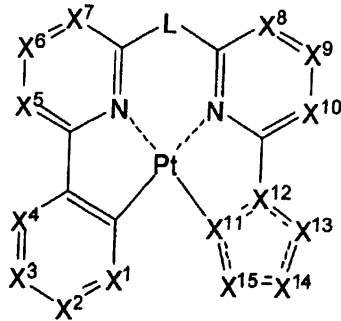
<171> 상기 화학식에서, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고; X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고; X<sup>5</sup>, X<sup>6</sup>, X<sup>7</sup>, X<sup>8</sup>, X<sup>9</sup> 및 X<sup>10</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고; X<sup>11</sup> 및 X<sup>12</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고; X<sup>13</sup>, X<sup>14</sup> 및 X<sup>15</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고; X<sup>11</sup>, X<sup>12</sup>, X<sup>13</sup>, X<sup>14</sup> 및 X<sup>15</sup> 로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이고; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타내며; M 은 2 가 금속 이온을 나타낸다.

<172> 화학식 (2) 에서, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup>, X<sup>4</sup>, X<sup>5</sup>, X<sup>6</sup>, X<sup>7</sup>, X<sup>8</sup>, X<sup>9</sup>, X<sup>10</sup>, X<sup>11</sup>, X<sup>12</sup>, X<sup>13</sup>, X<sup>14</sup>, X<sup>15</sup>, L 및 M 은 화학식 (1) 의 X<sup>1</sup>,

$X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}$ , L 및 M 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<173> 화학식 (2) 로 나타내는 금속 착물은 바람직하게는 하기 화학식 (3) 으로 나타내는 플래티늄 착물이다.

<174> [화학식 3]



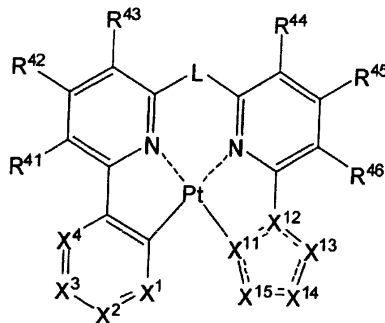
<175>

<176> 상기 화학식에서,  $X^1, X^2, X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^1, X^2, X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  및  $X^{10}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{13}, X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<177> 화학식 (3) 에서,  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}$  및 L 은 화학식 (2) 의  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}$  및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<178> 화학식 (3) 으로 나타내는 플래티늄 착물은 바람직하게는 하기 화학식 (4) 로 나타내는 플래티늄 착물이다.

<179> [화학식 4]



<180>

<181> 상기 화학식에서,  $X^1, X^2, X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^1, X^2, X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;  $X^{11}$  및  $X^{12}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{13}, X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<182> 화학식 (4) 에서,  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}$  및 L 은 화학식 (2) 의  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}$  및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<183> 화학식 (4) 에서,  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}$  및  $R^{46}$  으로 나타내는 치환기는 치환기 B 와 동일하다. 가능하다면,  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}$

및 R<sup>46</sup> 은 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.

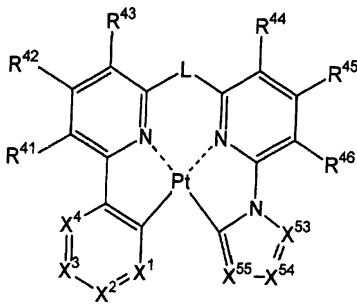
<184> R<sup>41</sup> 및 R<sup>46</sup> 은 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 아실기, 알콕시카르보닐기, 알킬티오기, 설포닐기, 히드록실기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기 또는 헤테로시클릭기이고; 더욱 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 할로젠 원자, 시아노기 또는 헤테로시클릭기이고; 훨씬 바람직하게는 수소 원자, 메틸기, t-부틸기, 트리플루오로메틸기, 페닐기, 불소 원자, 시아노기 또는 피리딜기이고; 더욱더 바람직하게는 수소 원자, 메틸기 또는 불소 원자이며; 특히 바람직하게는 수소 원자이다.

<185> R<sup>43</sup> 및 R<sup>44</sup> 의 바람직한 범위는 바람직하게는 R<sup>41</sup> 및 R<sup>46</sup> 의 범위와 동일하다.

<186> R<sup>42</sup> 및 R<sup>45</sup> 는 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알킬티오기, 아릴티오기, 할로젠 원자, 시아노기 또는 헤테로시클릭기이고; 더욱 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴티오기, 할로젠 원자 또는 헤테로시클릭기이고; 훨씬 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아미노기, 알콕시기, 할로젠 원자 또는 헤테로시클릭기이고; 더욱더 바람직하게는 수소 원자, 메틸기, t-부틸기, 디알킬아미노기, 디페닐아미노기, 메톡시기, 페녹시기, 불소 원자, 이미다졸릴기, 피롤릴기 또는 카르바졸릴기이고; 특히 바람직하게는 수소 원자, 불소 원자 또는 메틸기이며; 가장 바람직하게는 수소 원자이다.

<187> 화학식 (4) 로 나타내는 플래티늄 착물의 한 바람직한 구현예는 하기 화학식 (4a-1) 로 나타내는 플래티늄 착물이다.

<188> [화학식 4a-1]



<189>

<190> 상기 화학식에서, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고; X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고; R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 및 R<sup>46</sup> 각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고; X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup> 및 X<sup>55</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고; X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup> 및 X<sup>55</sup> 를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<191> 화학식 (4a-1) 에서, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup>, X<sup>4</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup> 및 L 은 화학식 (4) 의 X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup>, X<sup>4</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup> 및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<192> X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup> 및 X<sup>55</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타낸다. X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup> 및 X<sup>55</sup> 각각이 추가로 치환될 수 있는 경우, X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup> 및 X<sup>55</sup> 각각은 독립적으로 치환기를 가질 수 있다. X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup> 및 X<sup>55</sup> 각각이 치환기를 갖는 경우, 치환기의 예에는 상기 치환기 B 로 나타내는 것이 포함된다. 치환기로서, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 방향족 헤테로시클릭기, 디알킬아미노기, 디아릴아미노기, 알킬옥시기, 시아노기 및 할로젠 원자가 바람직하고; 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 디알킬아미노기, 시아노기 및 불소 원자가 더욱 바람직하며; 알킬기, 트리플루오로메틸기 및 불소 원자가 훨씬 바람직하다. 또한, 가능하다면, 치환기는 서로 연결되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있다.

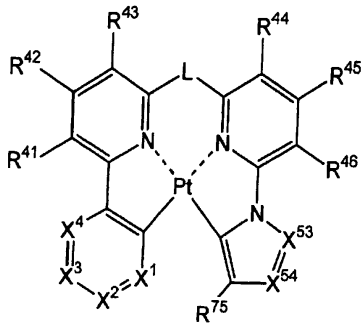
<193> 화학식 (4a-1) 에서, 탄소 원자, 질소 원자, X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup> 및 X<sup>55</sup> 로부터 형성된 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이고, 바람직하게는 2 이다.

<194> 탄소 원자, 질소 원자, X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup> 및 X<sup>55</sup> 로부터 형성된 5-원 고리 구조의 예에는 피롤 고리, 피라졸 고리 및 이미

다졸 고리가 포함된다. 이 중에서, 피롤 고리 및 피라졸 고리가 더욱 바람직하고; 피라졸 고리가 가장 바람직하다.

<195> 화학식 (4a-1) 로 나타내는 플래티늄 착물은 바람직하게는 하기 화학식 (4a-2) 로 나타내는 플래티늄 착물이다.

<196> [화학식 4a-2]



<197>

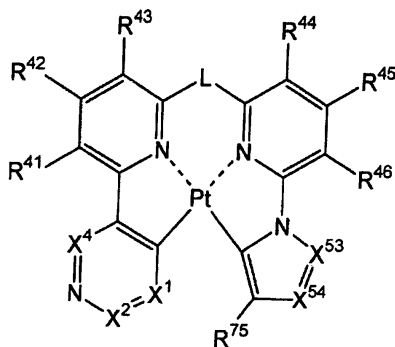
<198> 상기 화학식에서,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;  $R^{53}$  및  $R^{54}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $R^{53}$  및  $R^{54}$  를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이고;  $R^{75}$  는 수소 원자 또는 치환기를 나타내며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<199> 화학식 (4a-2) 에서,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $X^{53}$ ,  $X^{54}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  및 L 은 화학식 (4a-1) 의  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $X^{53}$ ,  $X^{54}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<200>  $R^{75}$  는 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기의 예에는 상기 치환기 B 의 것이 포함된다.  $R^{75}$  는 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 방향족 헤테로시클릭기, 디알킬아미노기, 디아릴아미노기, 알킬옥시기, 시아노기 또는 할로젠 원자이고; 더욱 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 디알킬아미노기, 시아노기 또는 불소 원자이고; 훨씬 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 트리플루오로메틸기, 시아노기 또는 불소 원자이며; 가장 바람직하게는 시아노기, 불소 원자 또는 수소 원자이다. 또한, 가능하다면,  $R^{75}$  는  $X^{54}$  또는  $X^{53}$  의 치환기와 연결되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있다.

<201> 화학식 (4a-2) 로 나타내는 플래티늄 착물은 바람직하게는 하기 화학식 (4a-3) 으로 나타내는 플래티늄 착물이다.

<202> [화학식 4a-3]



<203>

<204> 상기 화학식에서,  $X^1$ ,  $X^2$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;  $X^{53}$  및  $X^{54}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{53}$  및  $X^{54}$  를 함유하는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 1 또는 2 이고;  $R^{75}$  는

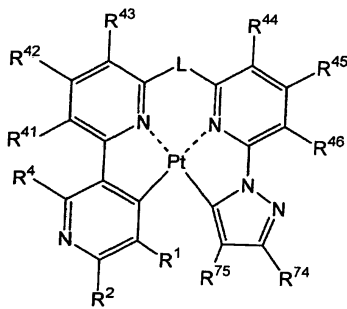
수소 원자 또는 치환기를 나타내며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<205> 화학식 (4a-3) 에서,  $X^1, X^2, X^4, X^{53}, X^{54}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{75}$  및 L 은 화학식 (4a-2) 의  $X^1, X^2, X^4, X^{53}, X^{54}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{75}$  및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<206> 화학식 (4a-3) 에서,  $X^1, X^2$ , 질소 원자,  $X^4$ , 탄소 원자 및 탄소 원자로부터 형성된 6-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 바람직하게는 1 이상 내지 3 이하이고, 더욱 바람직하게는 1 또는 2 이며, 훨씬 바람직하게는 1 이다. 6-원 고리의 특정 예에는 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리, 피리다진기 및 트리아진 고리가 포함된다. 이 중에서, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리 및 피리다진 고리가 더욱 바람직하고; 피리딘 고리, 피라진 고리 및 피리미딘 고리가 훨씬 바람직하며; 피리딘 고리가 특히 바람직하다.

<207> 화학식 (4a-3) 으로 나타내는 플래티늄 착물은 바람직하게는 하기 화학식 (4a-4) 로 나타내는 플래티늄 착물이다. 화학식 (4a-4) 로 나타내는 이 플래티늄 착물은 신규 화합물이다.

<208> [화학식 4a-4]



<209>

<210> 상기 화학식에서,  $R^1, R^2, R^4, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{74}$  및  $R^{75}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<211> 화학식 (4a-4) 에서,  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{75}$  및 L 은 화학식 (4a-3) 의  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{75}$  및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<212>  $R^1, R^2, R^4$  및  $R^{74}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기의 예에는 상기 치환기 B 의 것이 포함된다. 또한, 가능하다면,  $R^4$  와  $R^{41}$ , 및  $R^1$  과  $R^2$  에서, 치환기는 서로 연결되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있고;  $R^1$  과  $R^{75}$  에서, 치환기는 서로 연결되어 리간드 전체가 시클릭 구조를 형성할 수 있다.

<213>  $R^1$  은 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 아실기, 알콕시카르보닐기, 알킬티오기, 설폰기, 히드록실기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기 또는 헤테로시클릭기이고; 더욱 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알킬티오기, 할로젠 원자 또는 시아노기이고; 훨씬 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 할로젠 원자 또는 시아노기이고; 더욱더 바람직하게는 수소 원자, 메틸기, 트리플루오로메틸기, 불소 원자 또는 시아노기이며; 특히 바람직하게는 수소 원자, 트리플루오로메틸기, 불소 원자 또는 시아노기이다.

<214>  $R^2$  및  $R^4$  는 바람직하게는 수소 원자, 할로젠 원자, 불소 원자-치환된 페닐기, 불소 원자-치환된 알콕시기, 퍼플루오로알킬기, 시아노기, 니트로기 또는 아릴옥시기이고; 더욱 바람직하게는 수소 원자, 불소 원자, 불소 원자-치환된 페닐기, 트리플루오로메톡시기, 트리플루오로메틸기, 시아노기 또는 페녹시기이고; 훨씬 바람직하게는 수소 원자, 불소 원자, 퍼플루오로페닐기, 트리플루오로메틸기, 시아노기 또는 전자-끄는기-치환된 페녹시기이고; 특히 바람직하게는 수소 원자 또는 불소 원자이며; 가장 바람직하게는 불소 원자이다.

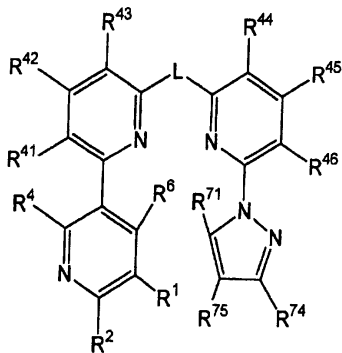
<215>  $R^{74}$  는 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 아실기, 알콕시카르보닐기, 알킬티오기, 설폰기, 히드록실기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기 또는 헤테로시클릭기이고; 더욱 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알킬티오기, 할로젠 원자 또는 시아노기이고; 훨씬 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 할로젠 원자 또는 시아노기이고; 더욱더 바람직하게

는 수소 원자, 메틸기, 트리플루오로메틸기, 불소 원자 또는 시아노기이고; 특히 바람직하게는 수소 원자, 트리플루오로메틸기, 불소 원자 또는 시아노기이며; 가장 바람직하게는 트리플루오로메틸기 또는 시아노기이다.

<216> 화학식 (4a-4) 로 나타내는 플래티늄 착물은, 유기 EL 소자에 사용될 다양한 재료 이외에, 디스플레이 소자, 디스플레이, 백라이트, 전자사진 (제로그래피, xerography), 조명 광원, 녹음 광원, 노출 광원, 기록 광원, 마커, 간판, 인테리어 등의 분야에서 적합하게 사용될 수 발광 재료, 의약적 적용, 형광 표백제, 사진 재료, UV 흡수 재료, 레이저 염료, 녹음 매체에 사용되는 재료, 잉크젯 인쇄에 사용되는 안료, 색 필터에 사용되는 염료, 색 변환 필터, 분석 적용, 태양 전지에 사용되는 재료, 유기 박막 트랜지스터에 사용되는 재료 등으로서 사용될 수 있다.

<217> 다음으로, 하기 화학식 (4a-4') 로 나타내는 화합물이 기재된다. 화학식 (4a-4') 로 나타내는 화합물은 상기 화학식 (4a-4) 로 나타내는 플래티늄 착물의 리간드일 수 있는 신규 화합물이다.

<218> [화학식 4a-4']



<219>

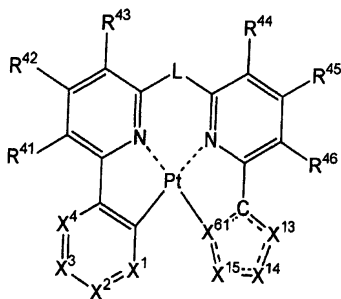
<220> 상기 화학식에서, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup>, R<sup>71</sup>, R<sup>74</sup> 및 R<sup>75</sup> 각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<221> 화학식 (4a-4') 에서, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup>, R<sup>74</sup>, R<sup>75</sup> 및 L 은 화학식 (4a-4) 의 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup>, R<sup>74</sup>, R<sup>75</sup> 및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다. R<sup>6</sup> 및 R<sup>71</sup> 각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기의 예에는 상기 치환기 B 의 것이 포함된다. R<sup>6</sup> 및 R<sup>71</sup> 은 바람직하게는 할로젠 원자 또는 수소 원자이고, 더욱 바람직하게는 수소 원자이다.

<222> 화학식 (4a-4') 로 나타내는 화합물은, 상기 화학식으로 나타내는 금속 착물의 리간드 이외에, 형광 재료, 전하 수송 재료, 약의 중간물, 농약 등으로서 사용될 수 있다.

<223> 화학식 (4) 로 나타내는 플래티늄 착물의 또다른 바람직한 구현예는 하기 화학식 (4b-1) 로 나타내는 플래티늄 착물이다.

<224> [화학식 4b-1]



<225>

<226> 상기 화학식에서, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고; X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고; R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 및 R<sup>46</sup> 각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기

를 나타내고;  $X^{61}$  은 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  각각은 독립적으로 탄소 원자, 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 나타내고;  $X^{61}$ , 탄소 원자,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로 나타내는 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 2 이하이며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<227> 화학식 (4b-1) 에서,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$ ,  $X^{15}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  및 L 은 화학식 (4) 의  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$ ,  $X^{15}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

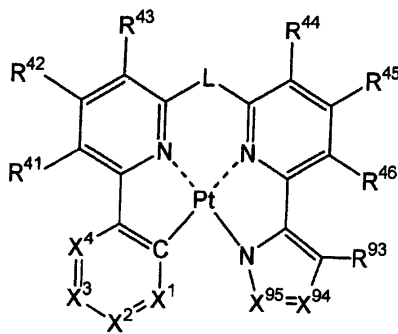
<228>  $X^{61}$  은 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고, 바람직하게는 질소 원자를 나타낸다.

<229> 화학식 (4b-1) 에서,  $X^{61}$ , 탄소 원자,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로부터 형성된 5-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 0, 1 또는 2 이고, 바람직하게는 1 또는 2 이며, 더욱 바람직하게는 2 이다.

<230>  $X^{61}$ , 탄소 원자,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로부터 형성된 5-원 고리 구조 내 결합은 단일 결합 및 이중 결합의 임의의 조합일 수 있다.  $X^{61}$ , 탄소 원자,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  및  $X^{15}$  로부터 형성된 5-원 고리의 예에는 피롤 고리, 피라졸 고리, 이미다졸 고리, 푸란 고리 및 티오펜 고리가 포함된다. 이 중에서, 피롤 고리, 피라졸 고리 및 이미다졸 고리가 더욱 바람직하고; 피라졸 고리가 훨씬 바람직하다.

<231> 화학식 (4b-1) 로 나타내는 플래티늄 착물은 바람직하게는 하기 화학식 (4b-2) 로 나타내는 플래티늄 착물이다.

<232> [화학식 4b-2]



<233>

<234> 상기 화학식에서,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;  $X^{94}$  및  $X^{95}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{94}$  및  $X^{95}$  중 하나 이상은 탄소 원자를 나타내고;  $R^{93}$  은 수소 원자 또는 치환기를 나타내며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<235> 화학식 (4b-2) 에서,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  및 L 은 화학식 (4b-1) 의  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<236>  $X^{94}$  및  $X^{95}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고, 단,  $X^{94}$  또는  $X^{95}$  중 하나는 탄소 원자를 나타낸다.  $X^{94}$  가 탄소 원자를 나타내는 반면,  $X^{95}$  가 질소 원자를 나타내는 것이 바람직하다.

<237>  $X^{94}$  및  $X^{95}$  각각이 추가로 치환될 수 있는 경우,  $X^{94}$  및  $X^{95}$  각각은 독립적으로 치환기를 가질 수 있다.  $X^{94}$  및  $X^{95}$  각각이 치환기를 갖는 경우, 치환기의 예에는 상기 치환기 B 로 나타내는 것이 포함된다. 치환기로서, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 방향족 헤테로시클릭기, 디알킬아미노기, 디아릴아미노기, 알킬옥시기, 시아노기 및 할로겐 원자가 바람직하고; 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 디알킬아미노기, 시아노기 및 불소 원자가 더욱 바람직하며; 알킬기, 트리플루오로메틸기 및 불소 원자가 훨씬 바람직하다. 또한, 가능하다면, 치환기는 서로 연결되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있다.

<238> 화학식 (4b-2) 에서, 질소 원자, 탄소 원자, 탄소 원자,  $X^{94}$  및  $X^{95}$  로부터 형성된 5-원 고리의 예에는 피롤 고

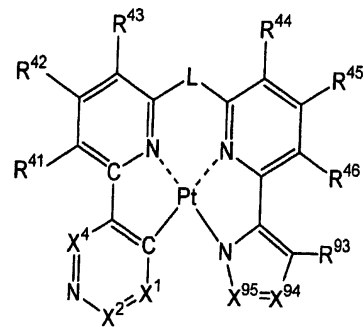
리, 피라졸 고리 및 이미다졸 고리가 포함된다. 이 중에서, 피라졸 고리 및 이미다졸 고리가 더욱 바람직하며; 피라졸 고리가 훨씬 바람직하다.

<239>  $R^{93}$  은 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기의 예에는 상기 치환기 B 로 나타내는 것이 포함된다.

$R^{93}$  은 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 방향족 헤테로시클릭기, 디알킬아미노기, 디아릴아미노기, 알킬옥시기, 시아노기 또는 할로겐 원자이고; 더욱 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 퍼플루오로알킬기, 아릴기, 디알킬아미노기, 시아노기 또는 불소 원자이고; 훨씬 바람직하게는 수소 원자, 알킬기, 트리플루오로메틸기 또는 불소 원자이며; 가장 바람직하게는 불소 원자 또는 수소 원자이다. 또한, 가능하다면,  $X^{94}$  및  $X^{95}$  는 서로 연결되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있다.

<240> 화학식 (4b-2) 로 나타내는 플래티늄 착물은 바람직하게는 하기 화학식 (4b-3) 으로 나타내는 플래티늄 착물이다.

<241> [화학식 4b-3]



<242>

<243> 상기 화학식에서,  $X^1$ ,  $X^2$  및  $X^4$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^1$ ,  $X^2$  및  $X^4$  중 하나 이상은 질소 원자를 나타내고;  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  및  $R^{46}$  각각은 독립적으로 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;  $X^{94}$  및  $X^{95}$  각각은 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고;  $X^{94}$  및  $X^{95}$  중 하나 이상은 탄소 원자를 나타내고;  $R^{93}$  은 수소 원자 또는 치환기를 나타내며; L 은 단일 결합 또는 2 가 연결기를 나타낸다.

<244> 화학식 (4b-3) 에서,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^4$ ,  $X^{94}$ ,  $X^{95}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$ ,  $R^{93}$  및 L 은 화학식 (4b-2) 의  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^4$ ,  $X^{94}$ ,  $X^{95}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$ ,  $R^{93}$  및 L 과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

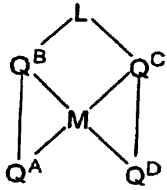
<245> 화학식 (4b-3) 에서,  $X^1$ ,  $X^2$ , 질소 원자,  $X^4$ , 탄소 원자 및 탄소 원자로부터 형성된 6-원 고리 구조에 함유된 질소 원자의 수는 바람직하게는 1 이상 내지 3 이하이고, 더욱 바람직하게는 1 또는 2 이고, 훨씬 바람직하게는 1 이다. 6-원 고리의 특정 예에는 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리, 피리다진기 및 트리아진 고리가 포함된다. 이 중에서, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리 및 피리다진 고리가 더욱 바람직하고; 피리딘 고리, 피라진 고리 및 피리미딘 고리가 훨씬 바람직하며; 피리딘 고리가 특히 바람직하다.

<246> 특정 구조를 갖는 상기 금속 착물은 저분자량 화합물일 수 있거나, 잔기 구조가 중합체 사슬에 연결되는 중합체 화합물 (바람직하게는 질량 평균 분자량이 1,000 내지 5,000,000 인 중합체 화합물, 더욱 바람직하게는 질량 평균 분자량이 5,000 내지 2,000,000 인 중합체 화합물, 훨씬 바람직하게는 질량 평균 분자량이 10,000 내지 1,000,000 인 중합체 화합물) 또는 특정 구조를 갖는 상기 금속 착물의 구조를 중합체의 주쇄에 갖는 중합체 화합물 (바람직하게는 질량 평균 분자량이 1,000 내지 5,000,000 인 중합체 화합물, 더욱 바람직하게는 질량 평균 분자량이 5,000 내지 2,000,000 인 중합체 화합물, 훨씬 바람직하게는 질량 평균 분자량이 10,000 내지 1,000,000 인 중합체 화합물) 일 수 있다. 특정 구조를 갖는 금속 착물은 바람직하게는 저분자량 화합물이다.

<247> 중합체 화합물의 경우, 중합체 화합물은 단독중합체일 수 있거나 다른 중합체와의 공중합체일 수 있다. 공중합체의 경우, 공중합체는 랜덤 공중합체일 수 있거나 블록 공중합체일 수 있다. 더욱이, 공중합체의 경우, 발광 기능을 갖는 화합물 및/또는 전하 수송 기능을 갖는 화합물이 중합체 내에 존재할 수 있다.

<248> 화학식 (1) 로 나타내는 화합물이 하기 화학식 (I) 로 표현되는 경우,  $Q^A$ ,  $Q^B$ ,  $Q^C$ ,  $Q^D$  및 L 에 사용될 수 있는 부분 구조가 이하에 기재된다.

<249> [화학식 I]



<250>

<251>  $Q^A$  에 사용될 수 있는 부분 구조는 [QB61CC] 로 나타내는 부분 구조기이다.

<252>  $Q^B$  에 사용될 수 있는 부분 구조는 [QT60CN] 으로 나타내는 부분 구조기이다.

<253>  $Q^C$  에 사용될 수 있는 부분 구조는 [QT60CN] 으로 나타내는 부분 구조기이다.

<254>  $Q^D$  에 사용될 수 있는 부분 구조는 [QB51CC], [QB51CN] 또는 [QB51NC] 로 나타내는 부분 구조기이다.

<255> L 에 사용될 수 있는 부분 구조는 [L] 로 나타내는 부분 구조기이다.

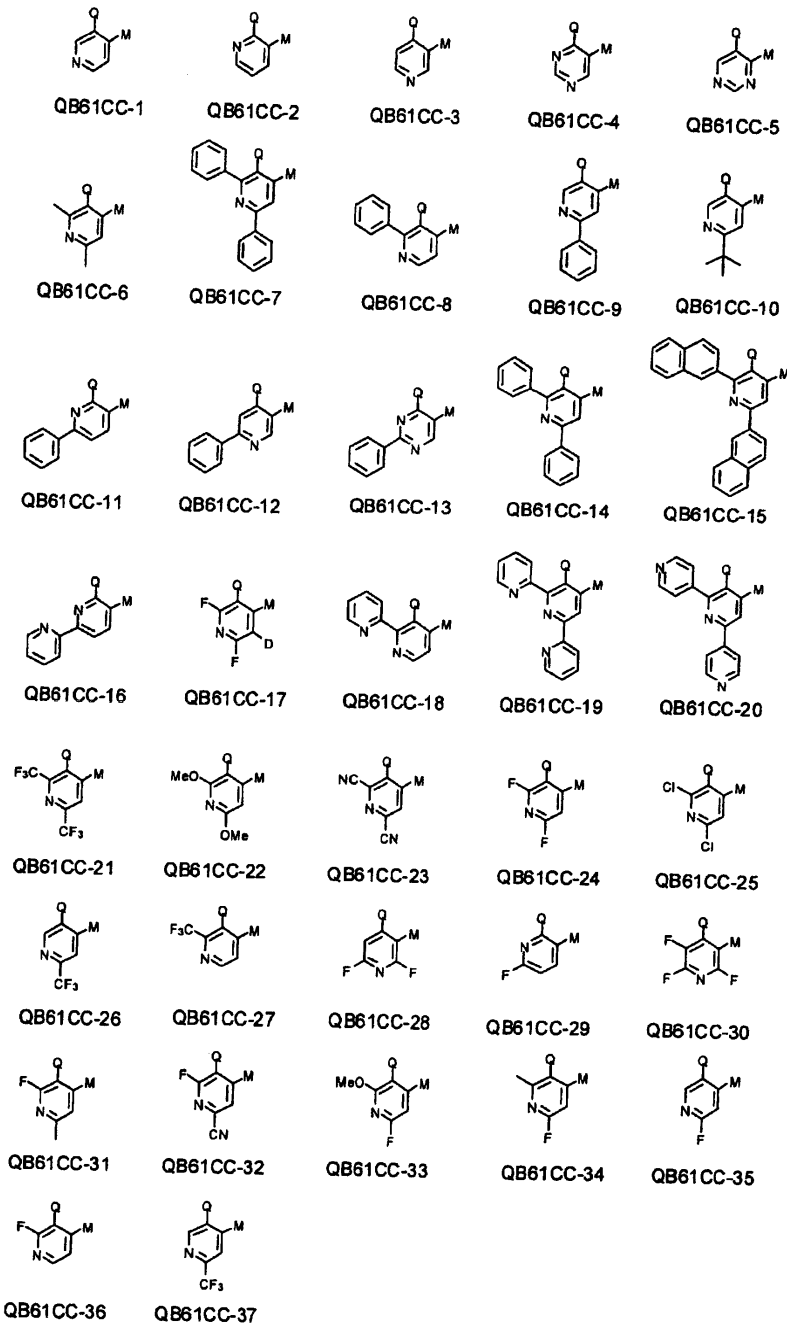
<256> 하기 화학식에서, M 및 L 은 각각 화학식 (I) 의 M 및 L 에 해당하고; Q 에 대해, [ $Q^A$  로 나타내는 부분 구조] 중 Q 는  $Q^B$  를 나타내고, [ $Q^B$  로 나타내는 부분 구조] 중 Q 는  $Q^A$  를 나타내고, [ $Q^C$  로 나타내는 부분 구조] 중 Q 는  $Q^D$  를 나타내며, [ $Q^D$  로 나타내는 부분 구조] 중 Q 는  $Q^C$  를 나타낸다.

<257> 연결기 L 의 부분 구조 [L] 중 두 Q 에 대해, 좌측의 Q 는  $Q^B$  를 나타내고, 우측의 Q 는  $Q^C$  를 나타낸다.

<258>  $\cdot Q^A$  에 사용될 수 있는 부분 구조:

<259>

[QB61CC]



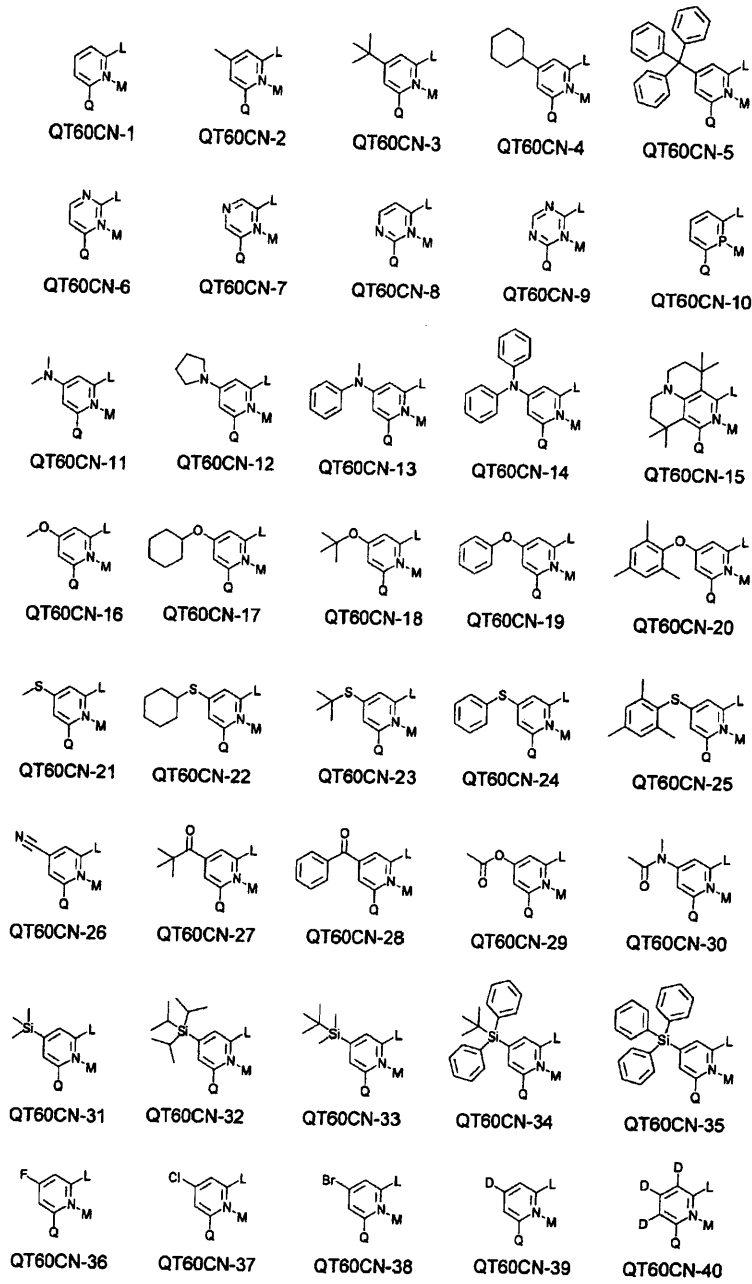
<260>

<261>

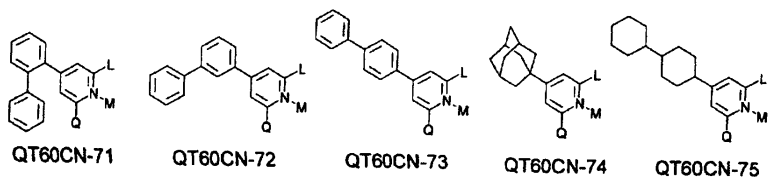
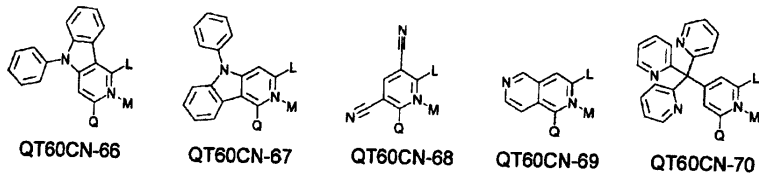
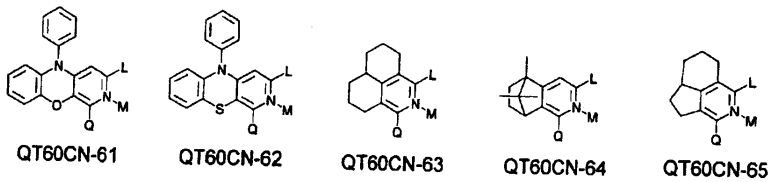
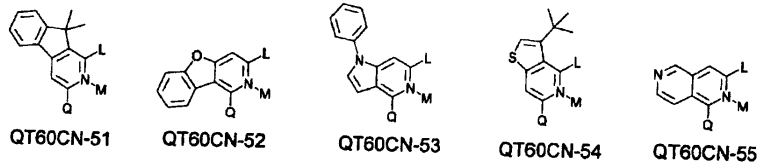
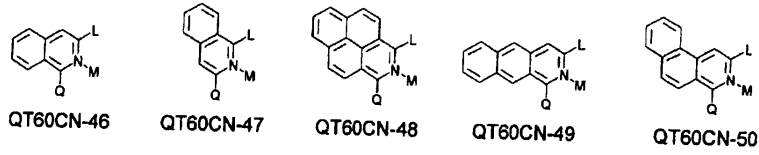
· Q<sup>B</sup> 및 Q<sup>C</sup> 에 사용될 수 있는 부분 구조:

<262>

[QT60CN]



<263>

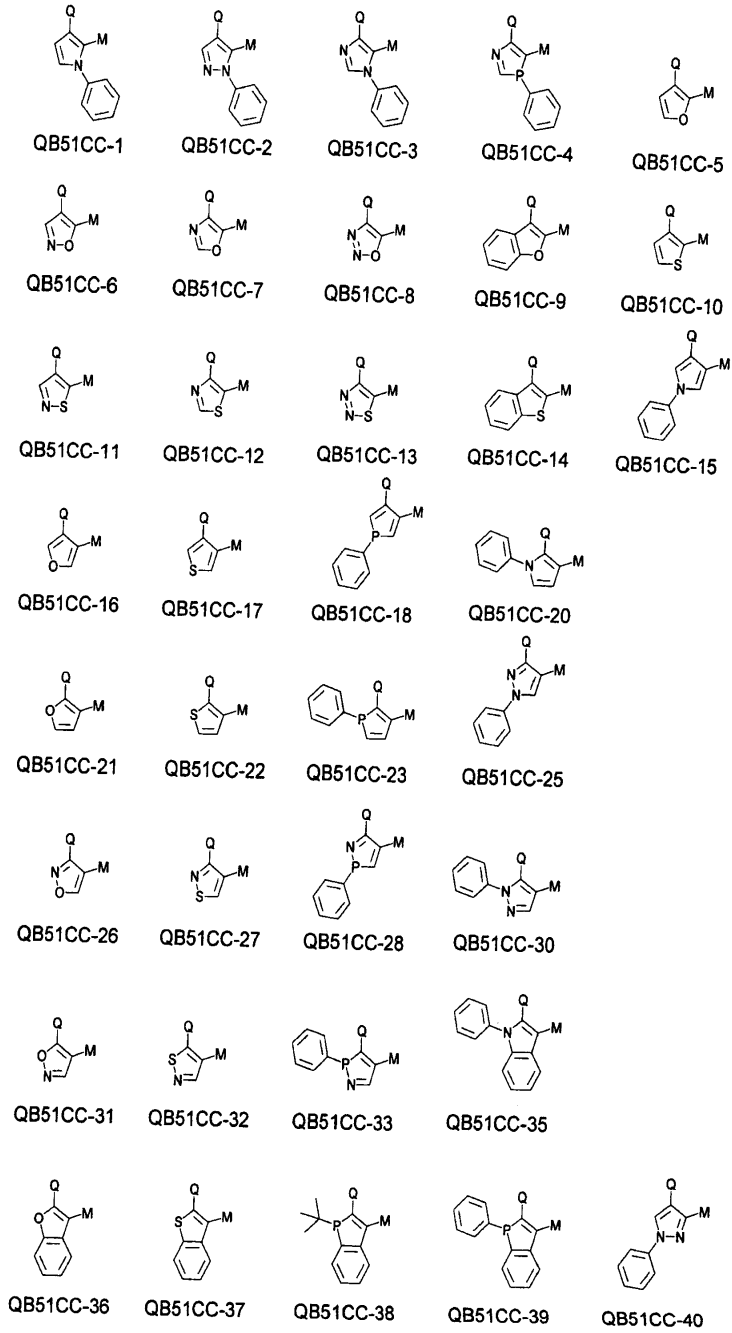


<264>

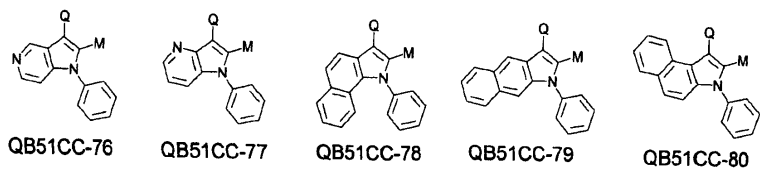
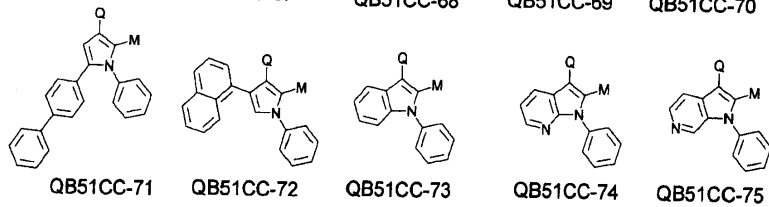
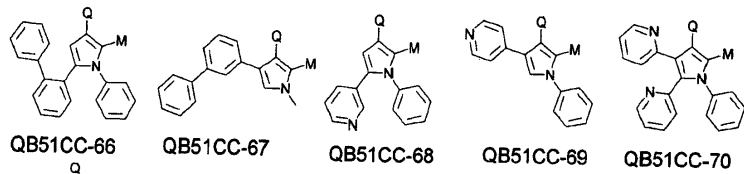
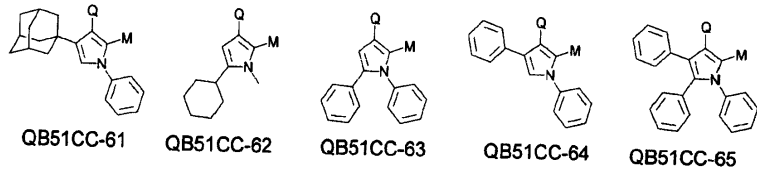
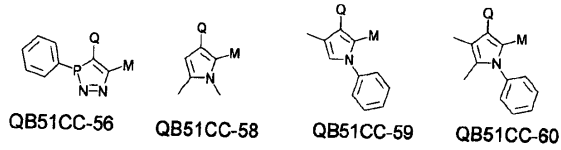
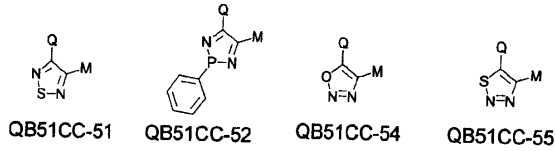
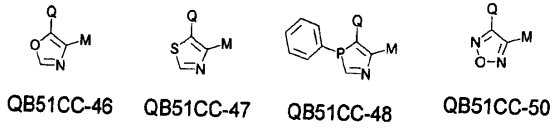
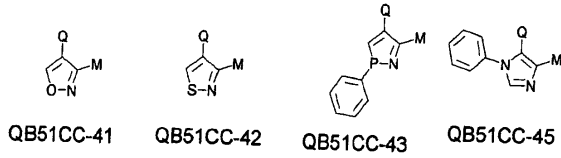
<265> · Q<sup>D</sup> 에 사용될 수 있는 부분 구조:

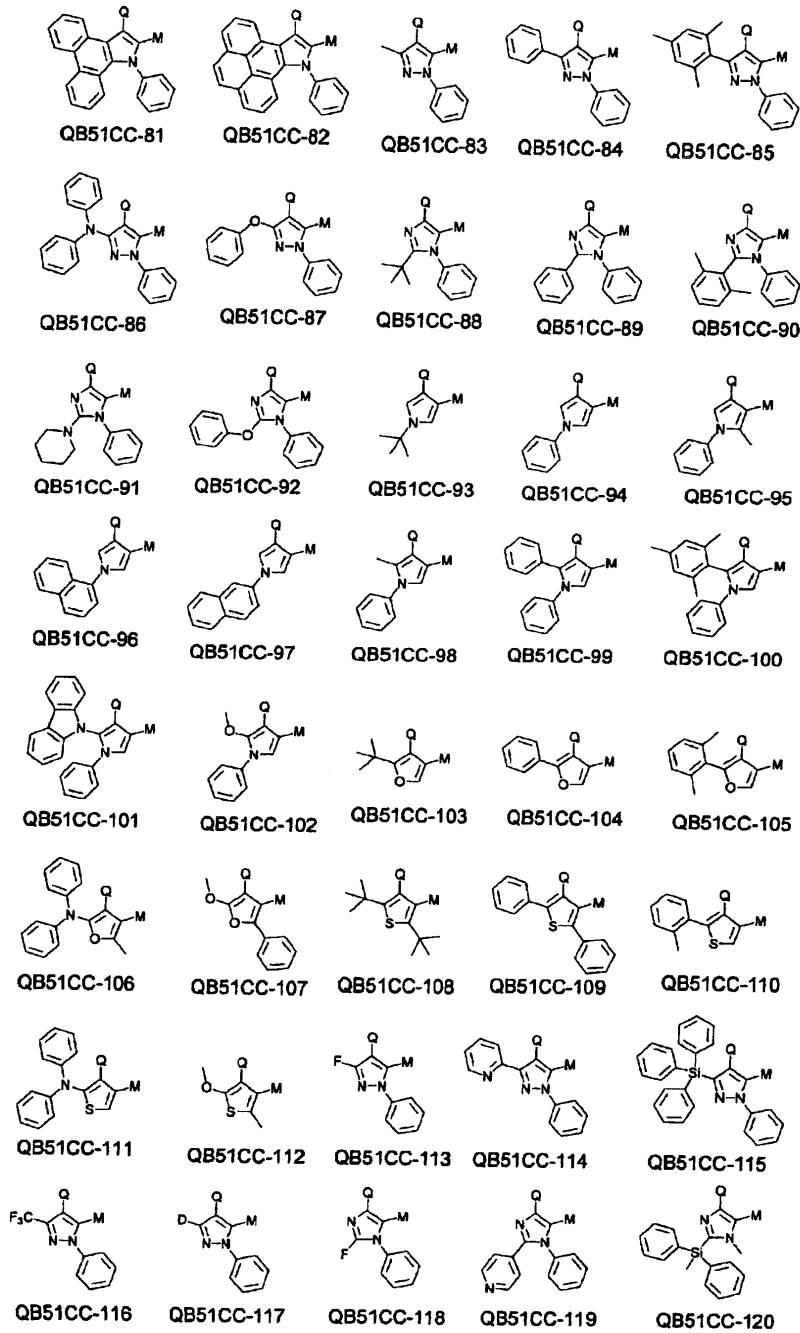
<266>

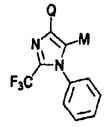
[QB51CC]



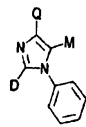
<267>



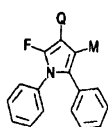




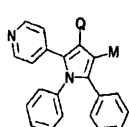
QB51CC-121



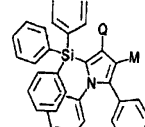
QB51CC-122



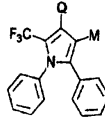
QB51CC-123



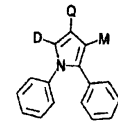
QB51CC-124



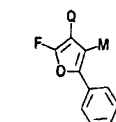
QB51CC-125



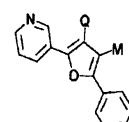
QB51CC-126



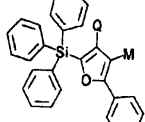
QB51CC-127



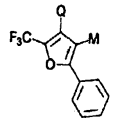
QB51CC-128



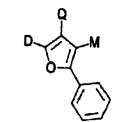
QB51CC-129



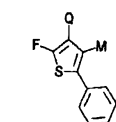
QB51CC-130



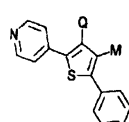
QB51CC-131



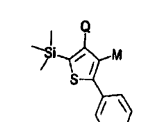
QB51CC-132



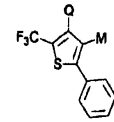
QB51CC-133



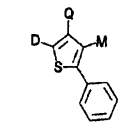
QB51CC-134



QB51CC-135



QB51CC-136

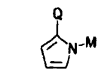


QB51CC-137

<270>

<271>

[QB51CN]



QB51CN-1



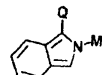
QB51CN-2



QB51CN-3



QB51CN-4



QB51CN-5



QB51CN-6



QB51CN-7



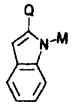
QB51CN-8



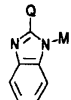
QB51CN-9



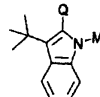
QB51CN-10



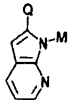
QB51CN-11



QB51CN-12



QB51CN-13



QB51CN-14



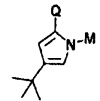
QB51CN-15



QB51CN-16



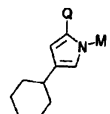
QB51CN-17



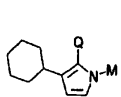
QB51CN-18



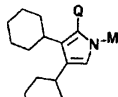
QB51CN-19



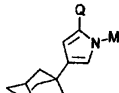
QB51CN-20



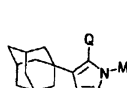
QB51CN-21



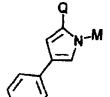
QB51CN-22



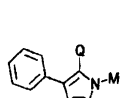
QB51CN-23



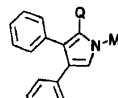
QB51CN-24



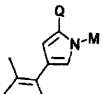
QB51CN-25



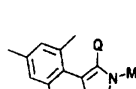
QB51CN-26



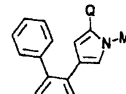
QB51CN-27



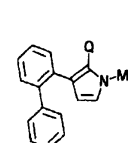
QB51CN-28



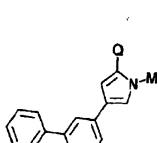
QB51CN-29



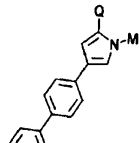
QB51CN-30



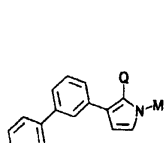
QB51CN-31



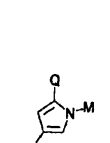
QB51CN-32



QB51CN-33



QB51CN-34



QB51CN-35

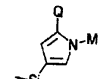
<272>



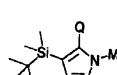
QB51CN-36



QB51CN-37



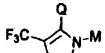
QB51CN-38



QB51CN-39



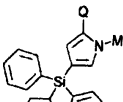
QB51CN-40



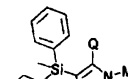
QB51CN-41



QB51CN-42



QB51CN-43

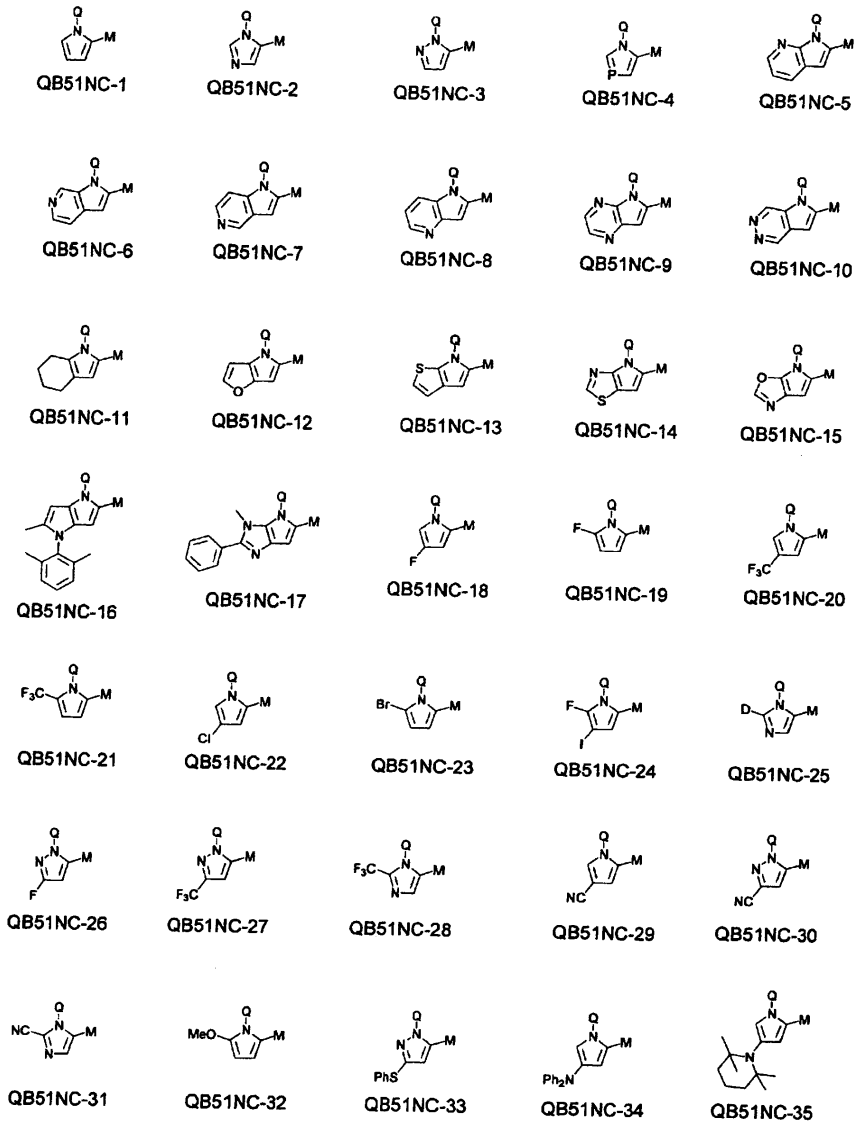


QB51CN-44

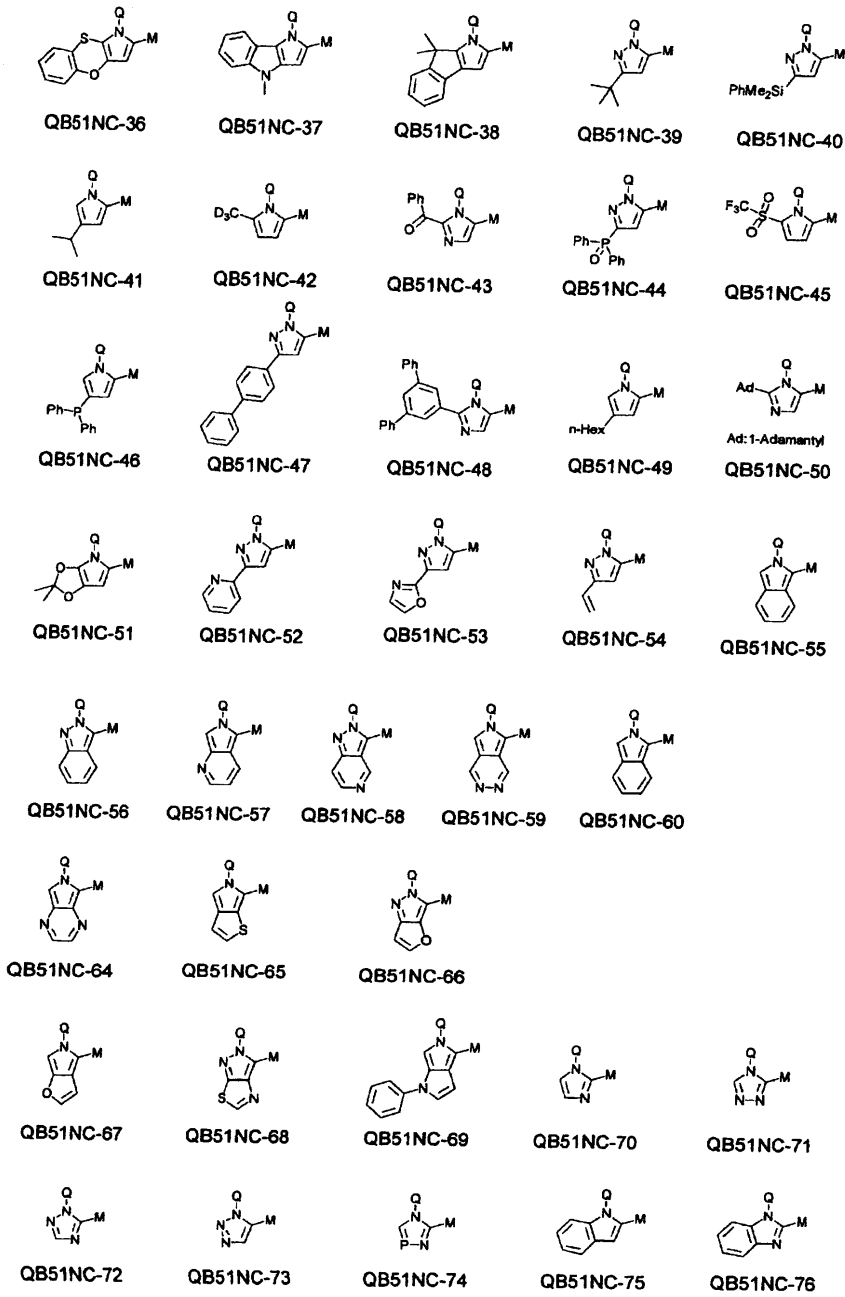
<273>

<274>

[QB51NC]



<275>



<276>

<277>

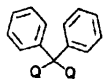
· 연결기 L 에 사용될 수 있는 부분 구조:

<278>

[L]



L-1



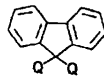
L-2



L-3



L-4



L-5



L-6



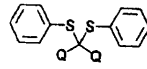
L-7



L-8



L-9



L-10



L-11



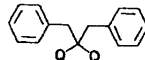
L-12



L-13



L-14



L-15



L-16



L-17



L-18



L-19



L-20



L-21



L-22



L-23



L-24



L-25



L-26



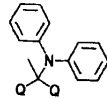
L-27



L-28



L-29



L-30



L-31



L-32



L-33



L-34



L-35



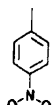
L-36



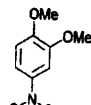
L-37



L-38

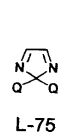
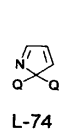
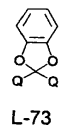
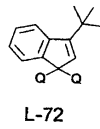
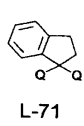
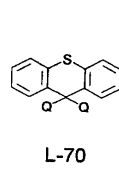
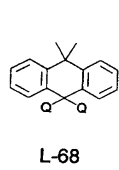
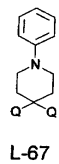
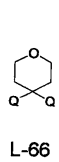
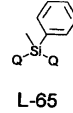
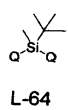
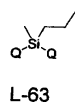
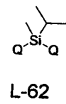
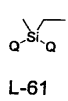
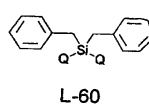
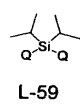
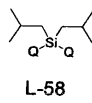
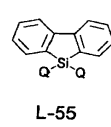
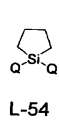
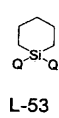
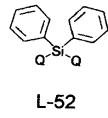
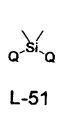
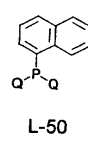
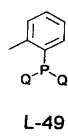
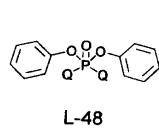
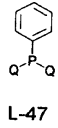
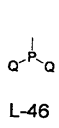
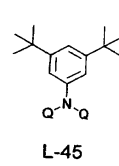
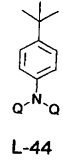
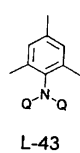
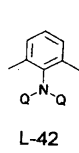
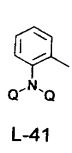


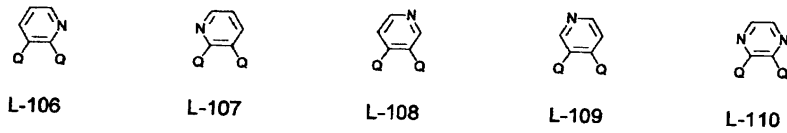
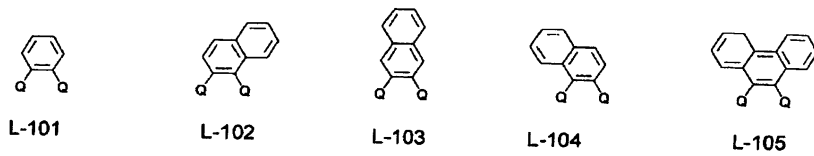
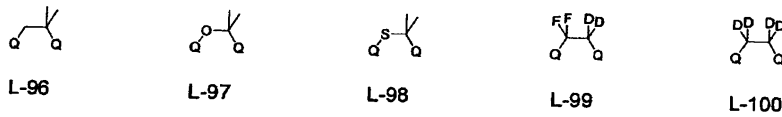
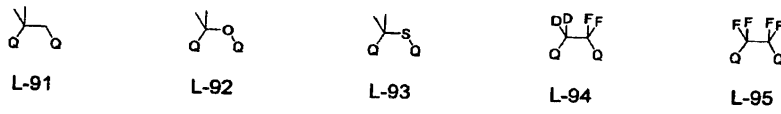
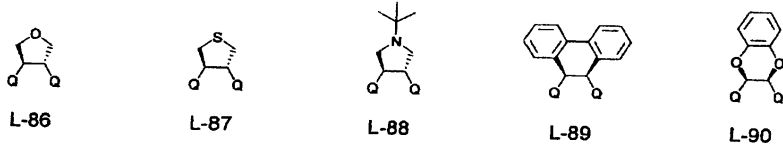
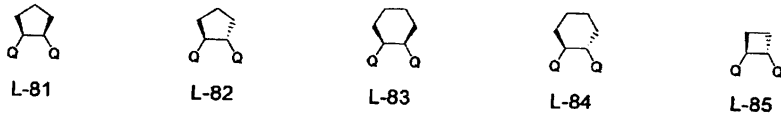
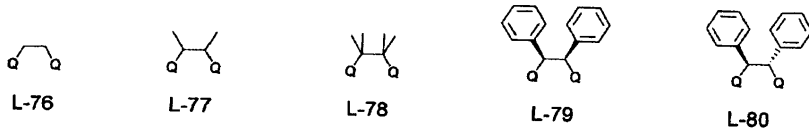
L-39



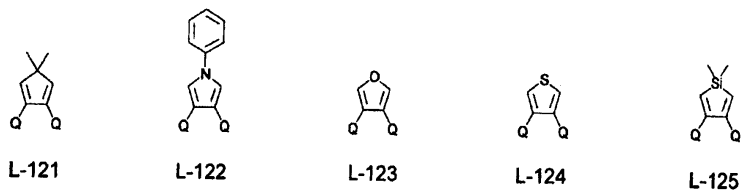
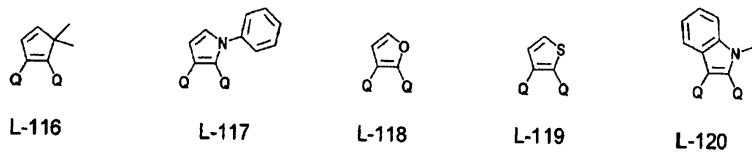
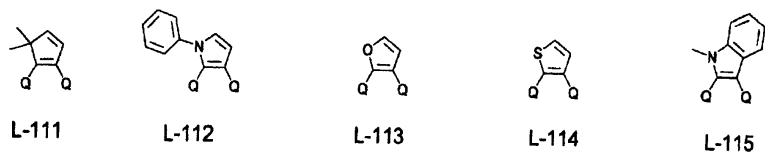
L-40

<279>





<281>



<282>

<283>

본 발명에 따른 화학식 (1) 로 나타내는 화합물은 화학식 (I) 중 표 1 에 나타낸 Q<sup>A</sup>, Q<sup>B</sup>, Q<sup>C</sup> 및 Q<sup>D</sup> 에 해당하는 부분 구조기 1 내지 3 개의 임의의 조합으로 표현될 수 있다.

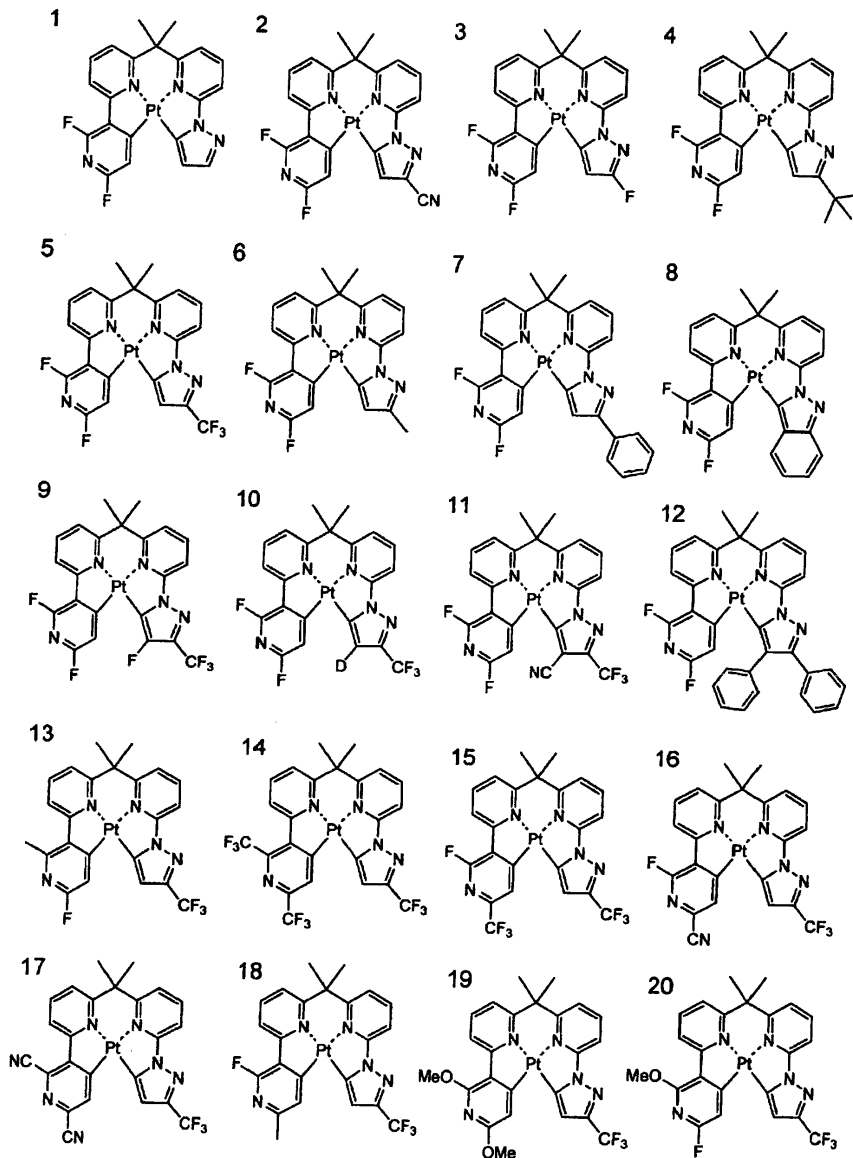
<284> [표 1]

<285>

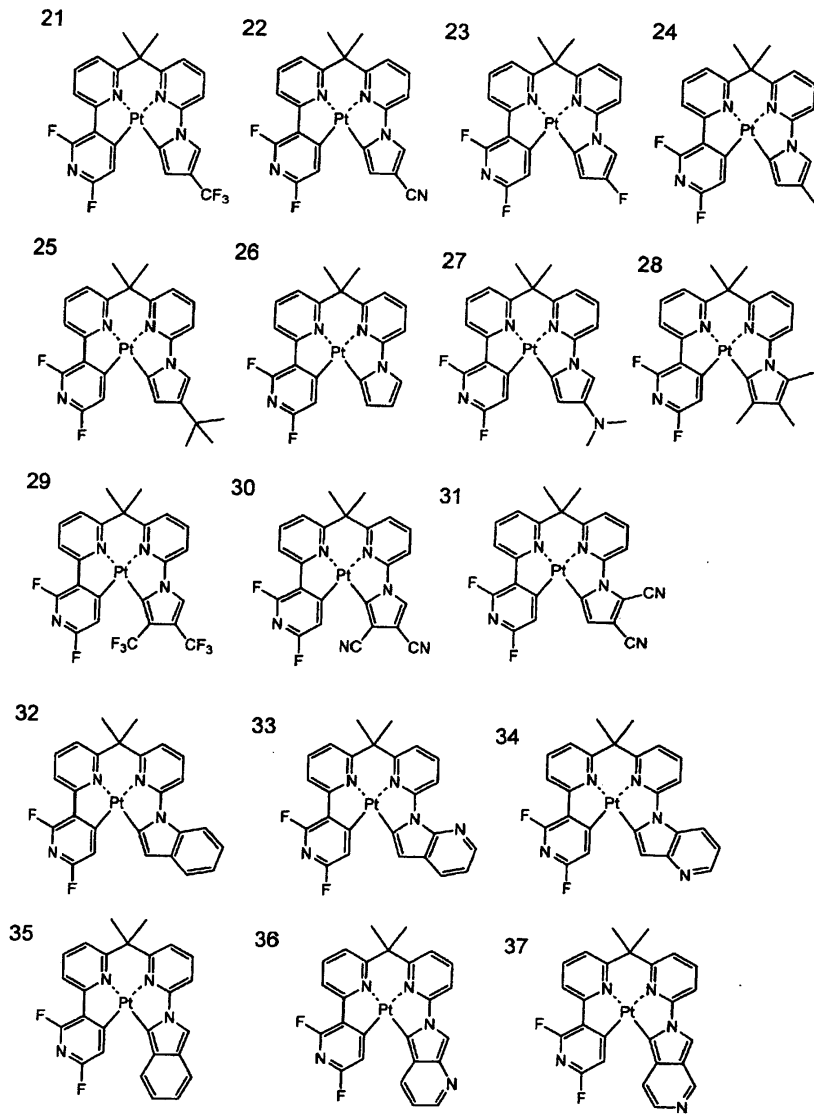
	Q <sup>A</sup>	Q <sup>B</sup>	Q <sup>C</sup>	Q <sup>D</sup>
조합 1	QB61CC	QT60CN	QT60CN	QB51CC
조합 2	QB61CC	QT60CN	QT60CN	QB51CN
조합 3	QB61CC	QT60CN	QT60CN	QB51NC

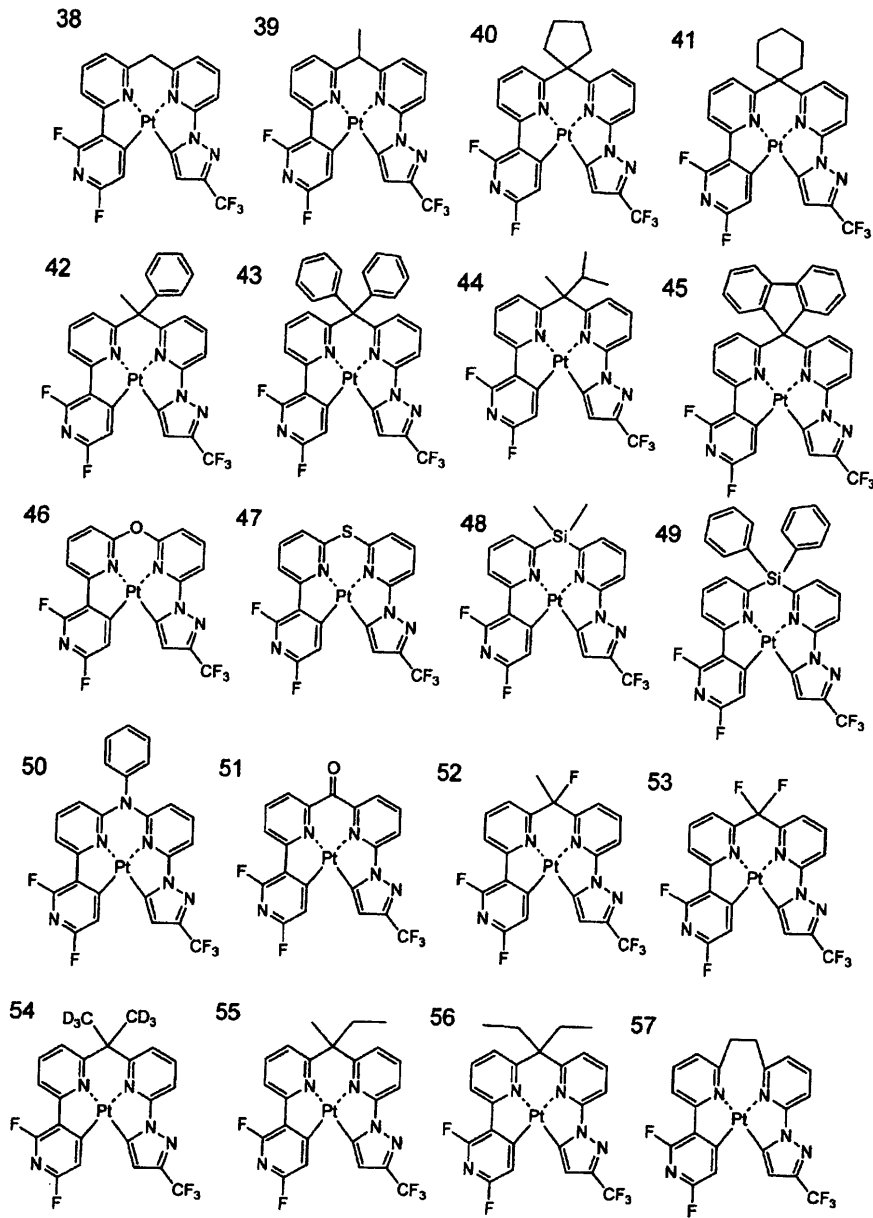
<286> 화학식 (1) 로 나타내는 금속 착물의 바람직한 특정예가 하기 제공될 것이나, 본 발명이 이에 제한되는 것으로 해석되어서는 안된다.

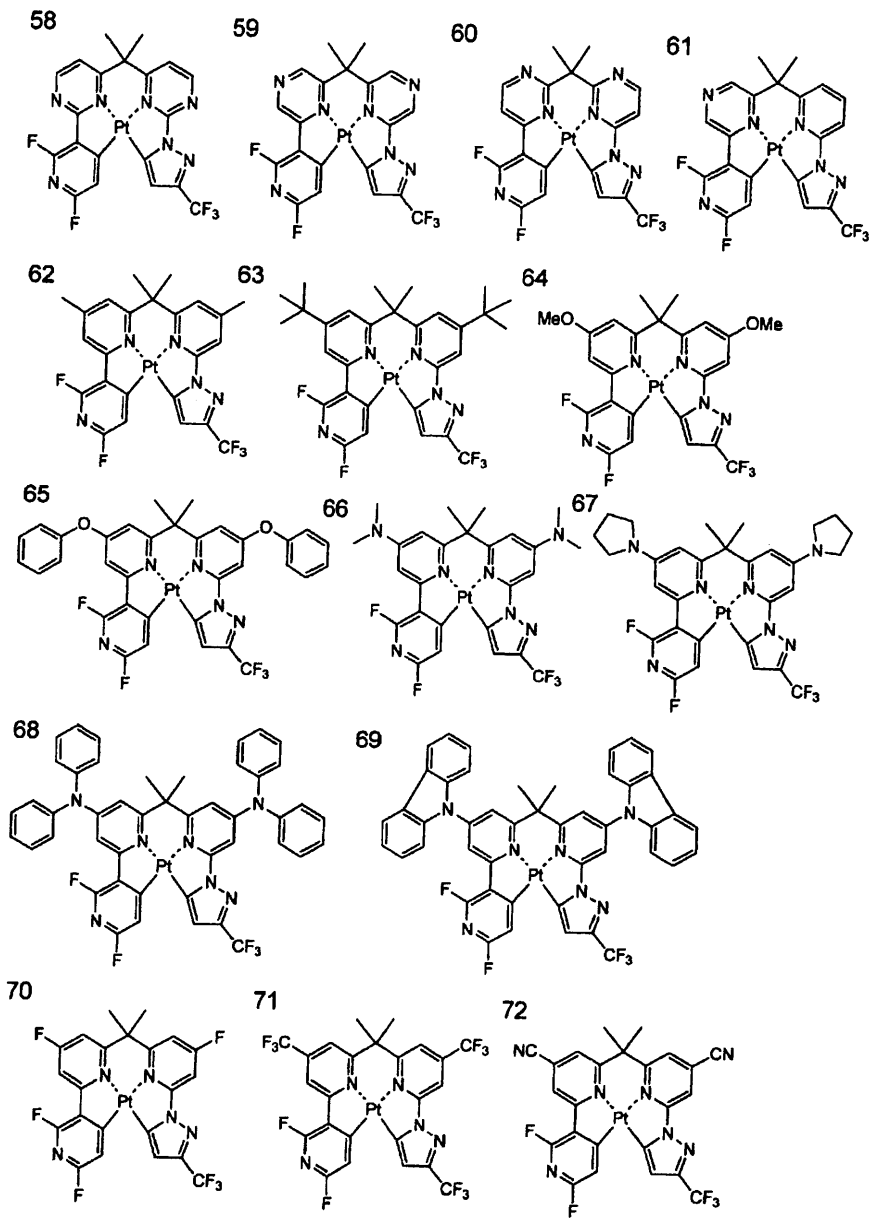
<287> 본 명세서에서, "금속 중-화합물 예에 기재된 화합물 번호"는 화합물 번호로서 사용된다. 예를 들어, 화합물 예에 기재된 화합물 번호가 "1" 이고 금속 종이 "플래티늄"인 경우, 상기 화합물은 "Pt-1"로 표현된다.



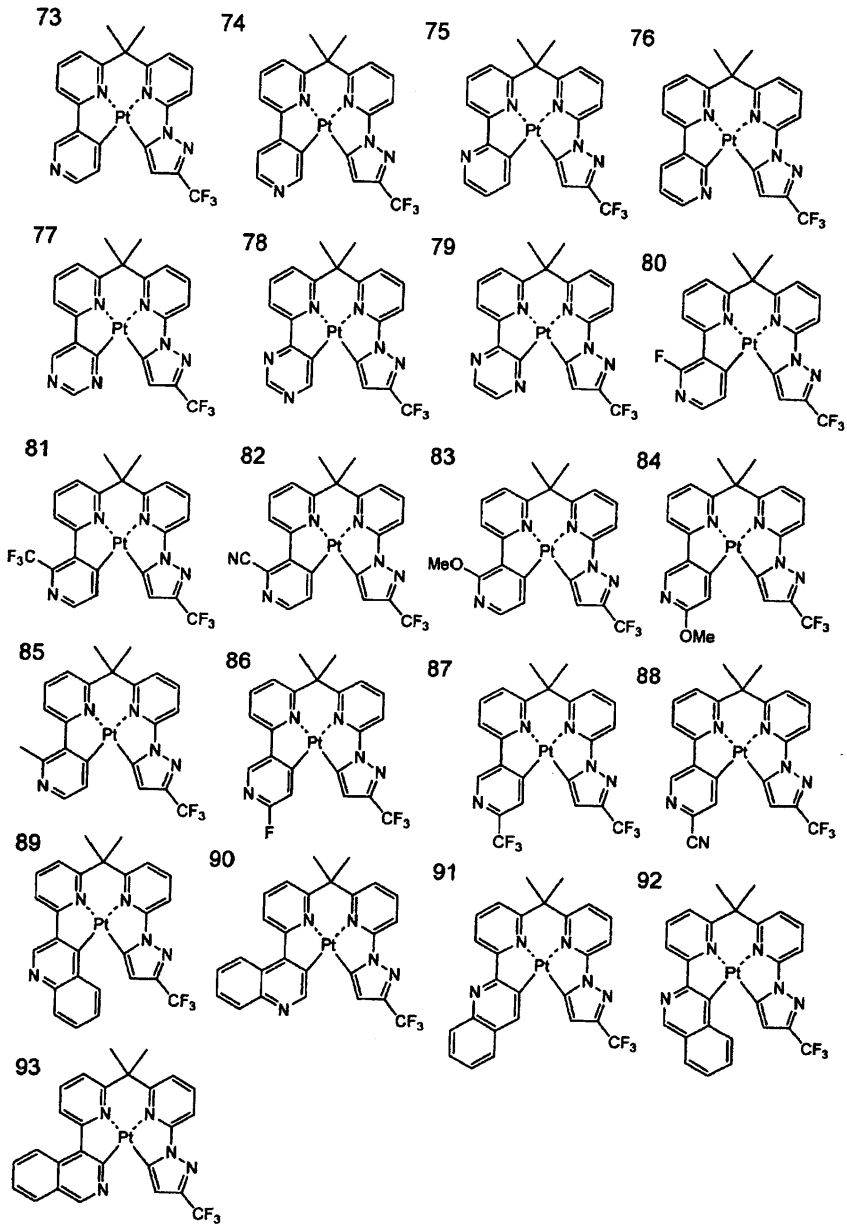
<288>

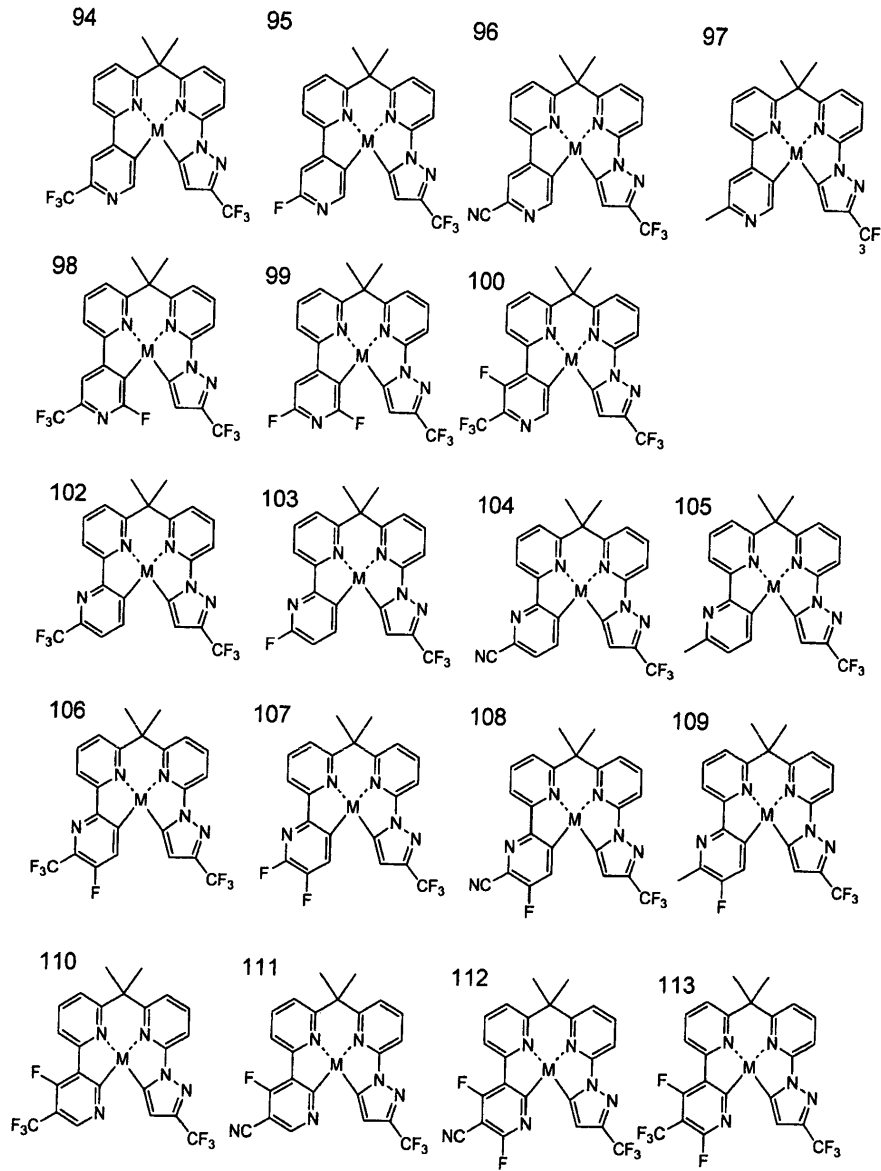


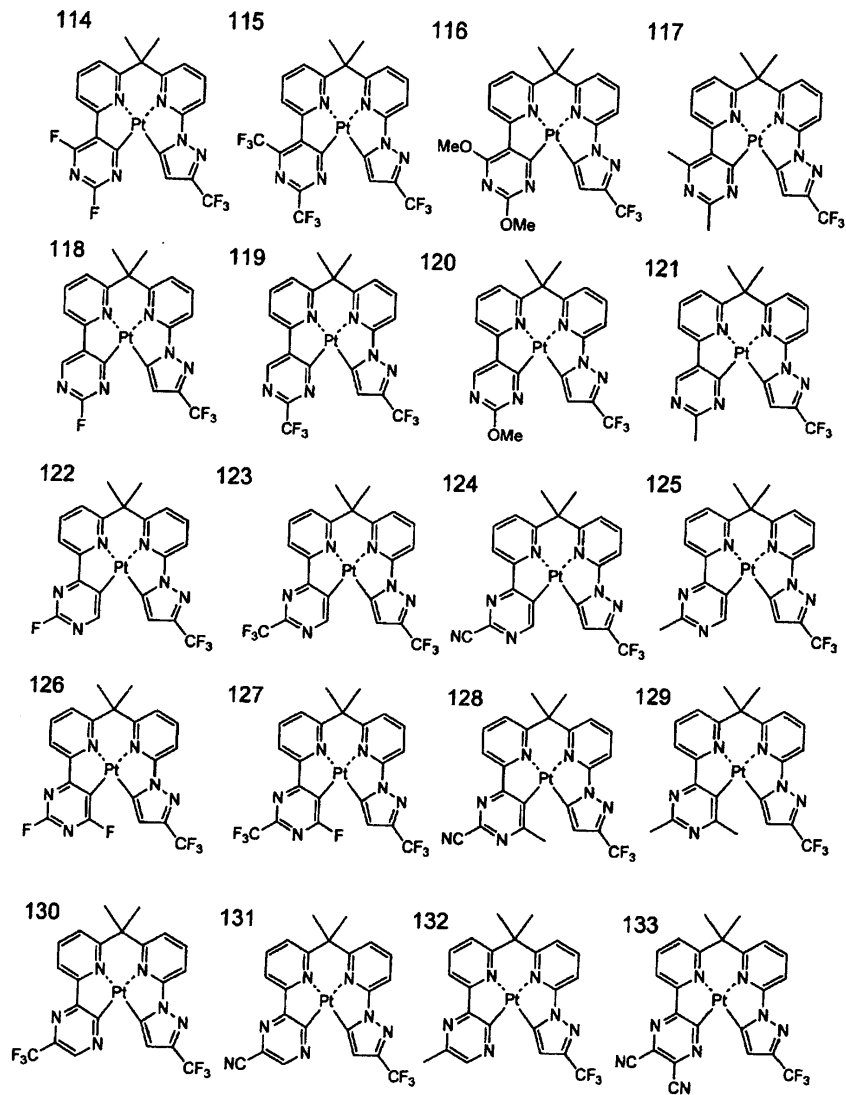




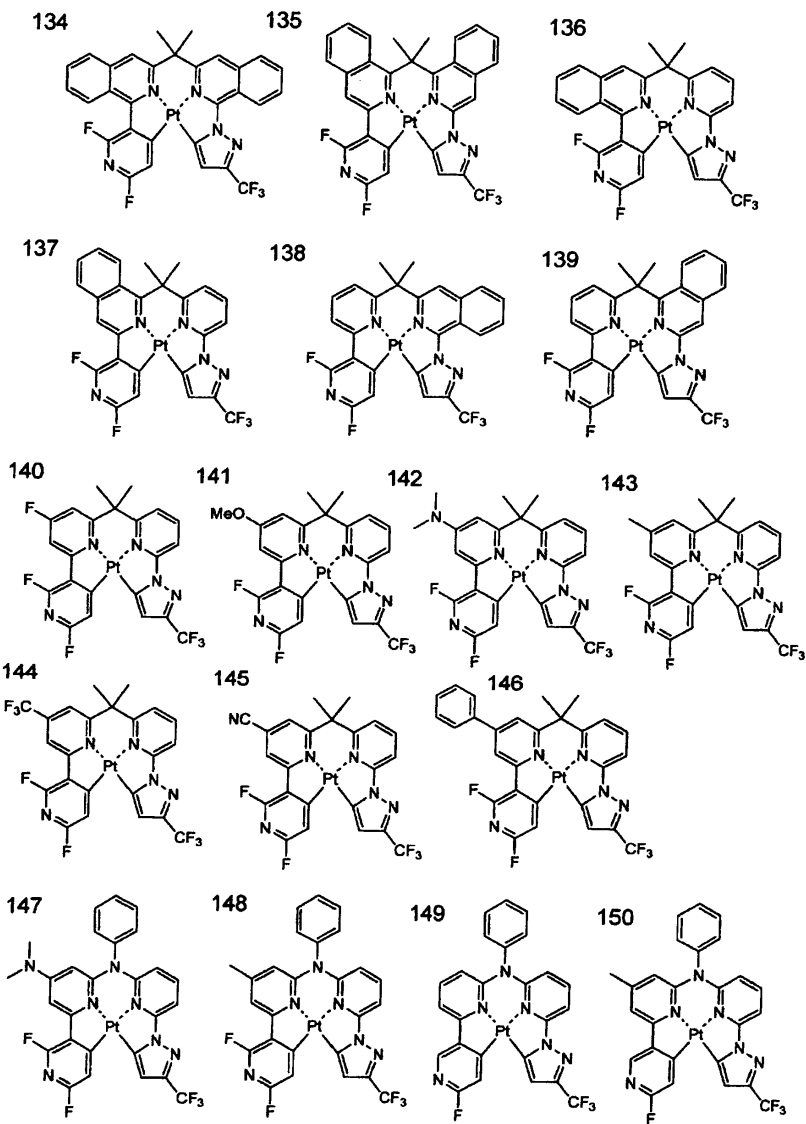
<291>

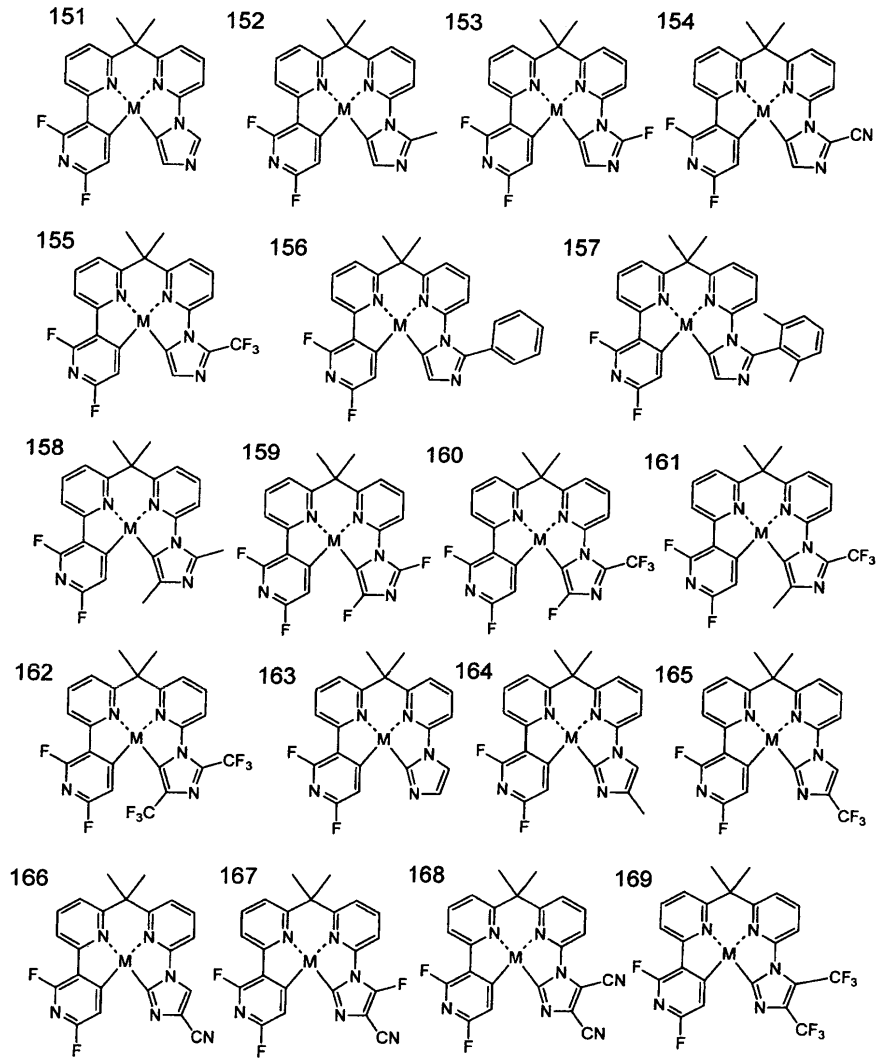


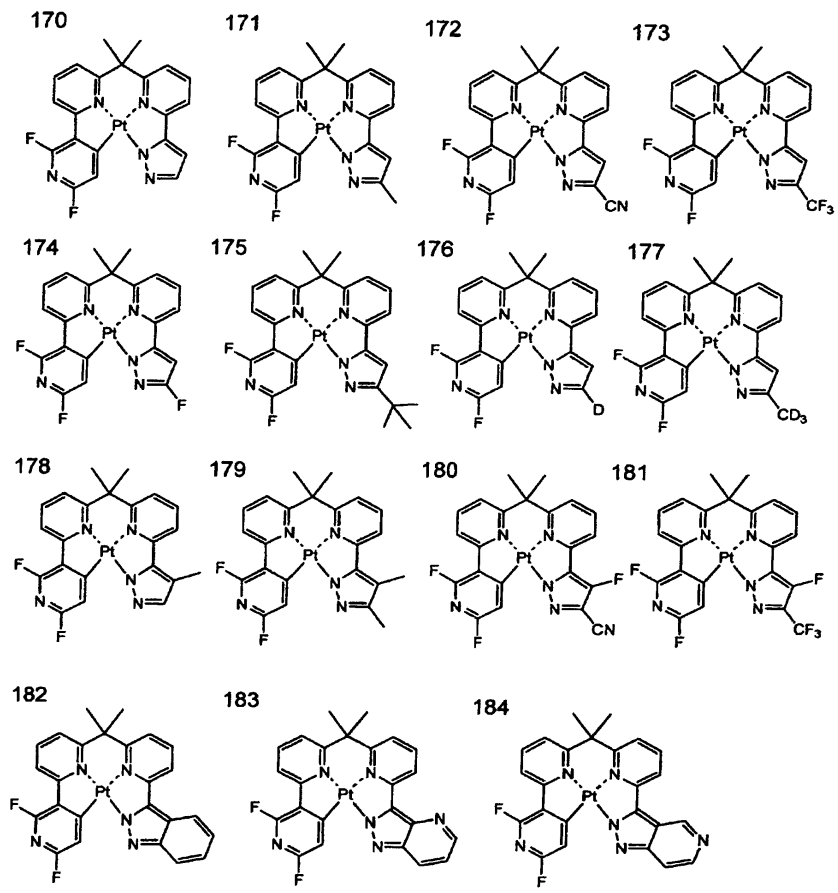




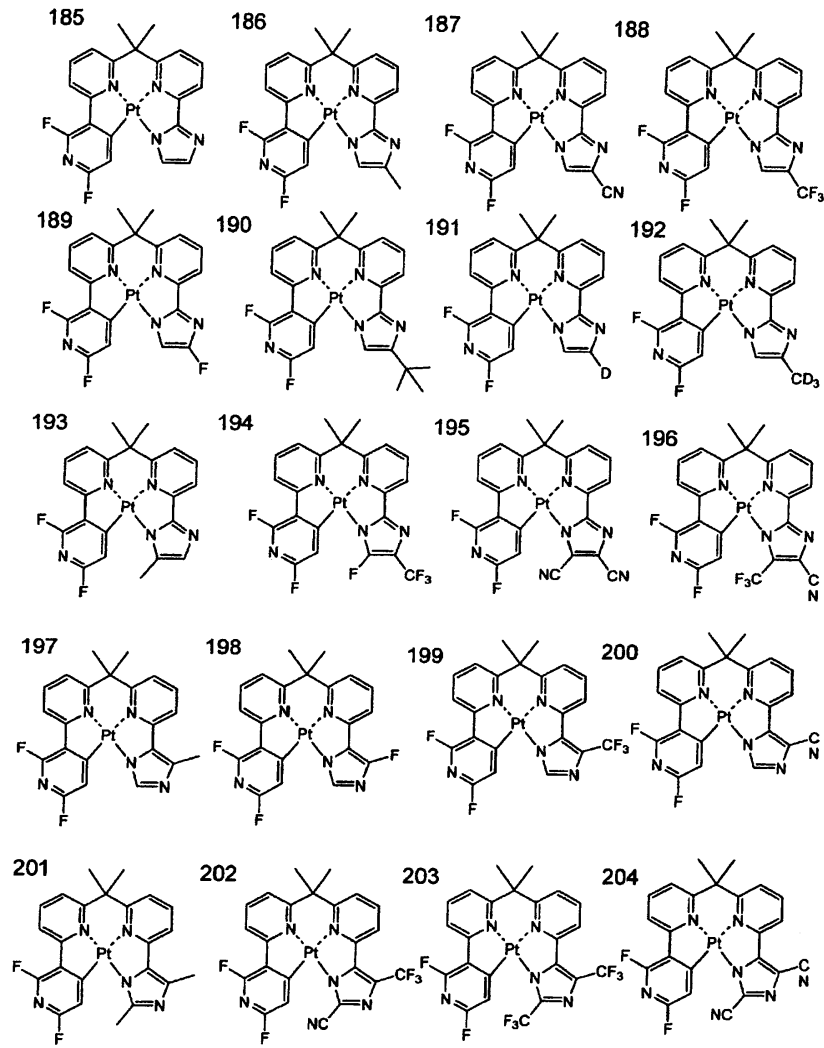
<294>

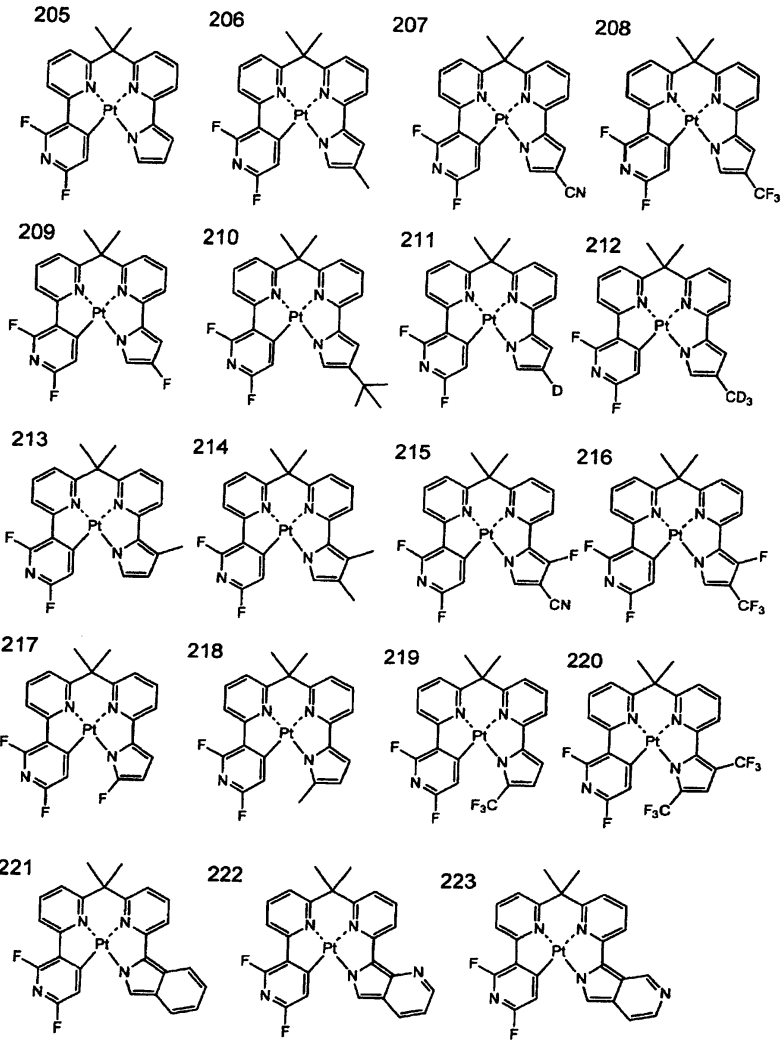




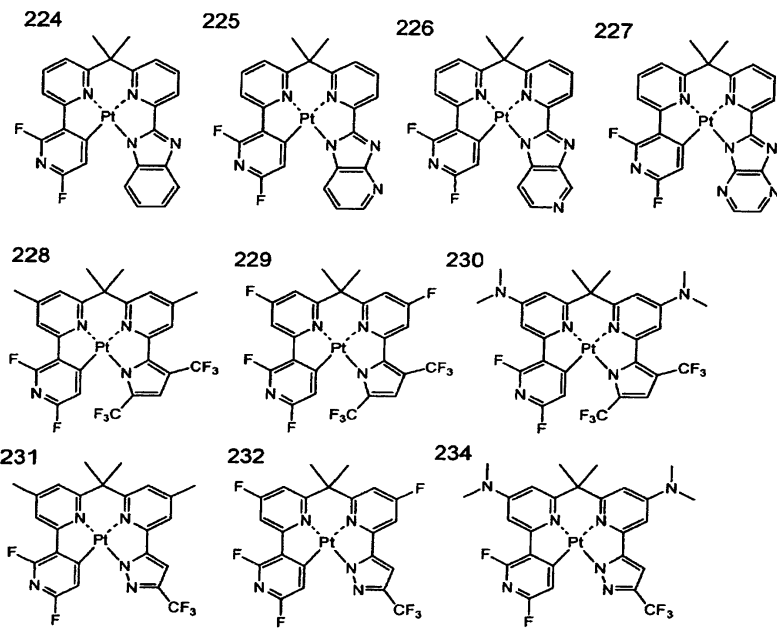


<297>

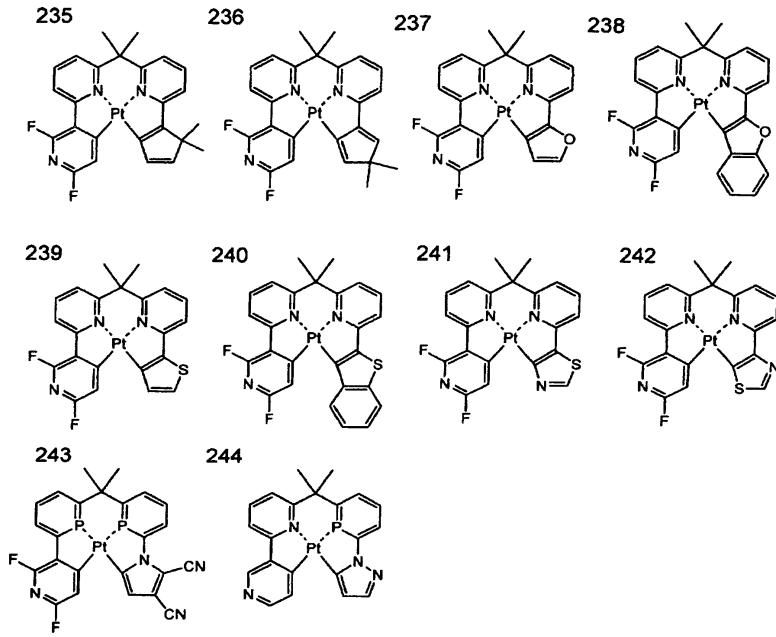




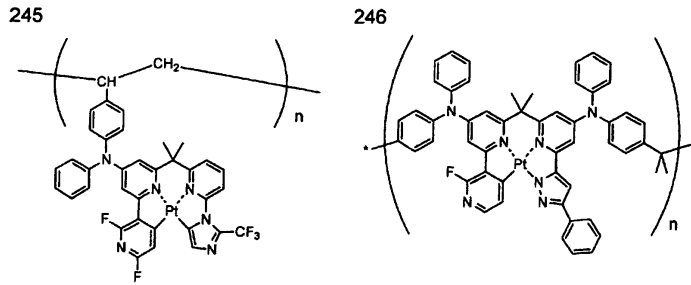
<299>



<300>



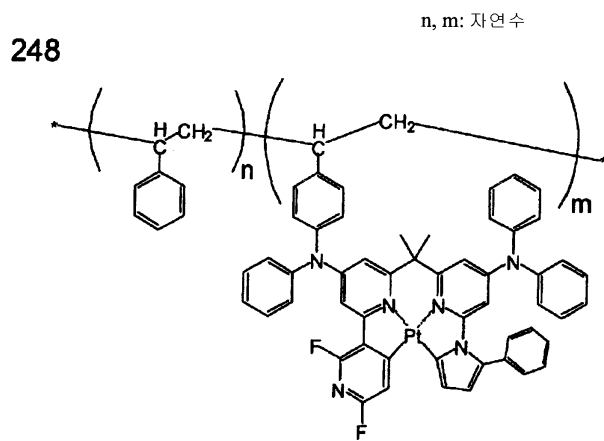
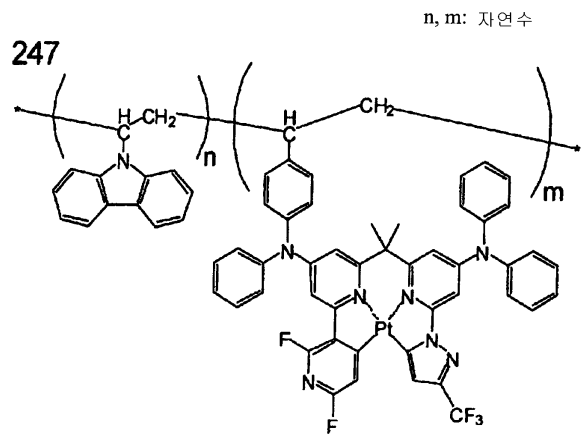
<301>

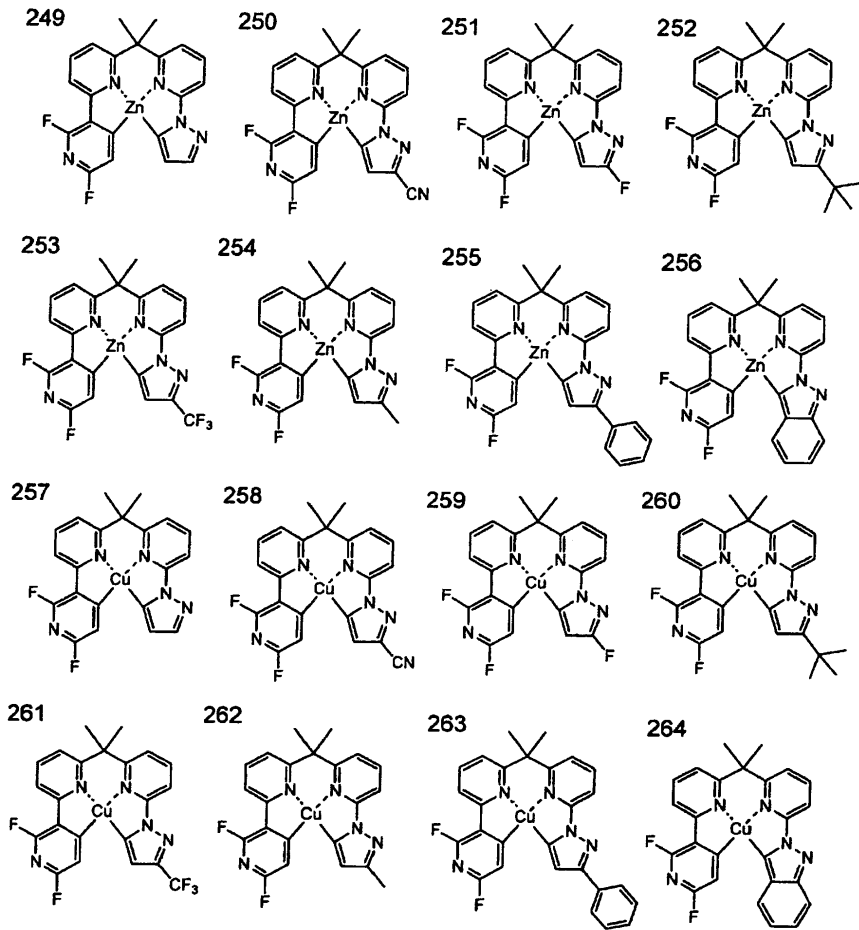


n: 자연수

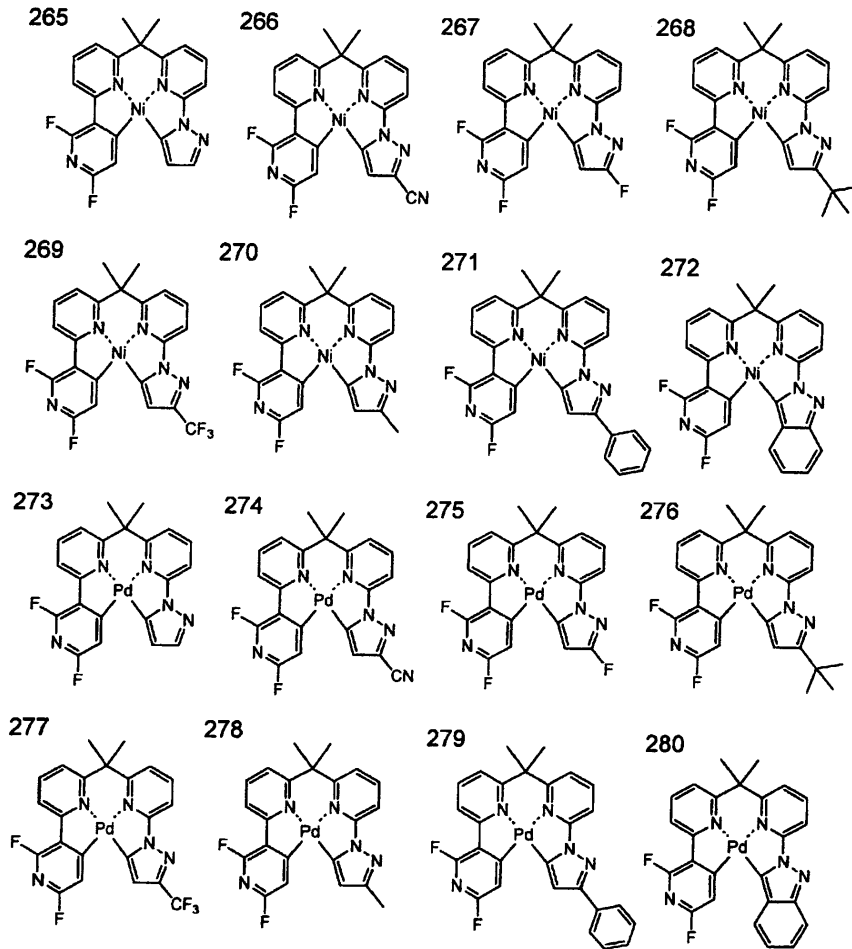
n: 자연수

<302>





<304>



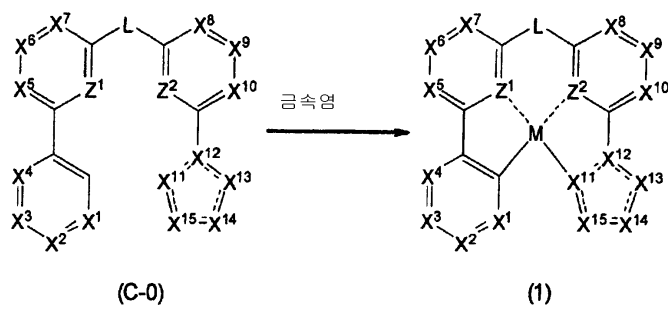
<305>

<306>

다음으로, 화학식 (1) 로 나타내는 금속 착물의 합성 방법이 기재된다.

<307>

화학식 (C-0) 으로 나타내는 화합물 (이후 "리간드"로 칭함) 을 용매의 존재 하에 금속염과 반응시켜 화학식 (1) 로 나타내는 금속 착물을 수득할 수 있다.



<308>

<309>

화학식 (C-0) 에서,  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}, Z^1, Z^2, L$  및  $M$  은 화학식 (1) 의  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}, Z^1, Z^2, L$  및  $M$  과 동일하고, 이의 바람직한 범위도 동일하다.

<310>

금속 착물의 합성에서, 리간드와 착물 형성 반응 시 사용되는 2 가 아연을 함유하는 화합물의 예에는 디클로로 (N,N,N',N'-테트라메틸렌디아민)아연, 아연 아세테이트, 아연 아세틸아세토네이트, 브롬화아연, 염화아연 및 불화아연이 포함된다. 아연염의 더욱 바람직한 예에는 브롬화아연 및 염화아연과 같은 할로겐화아연이 포함된다.

<311>

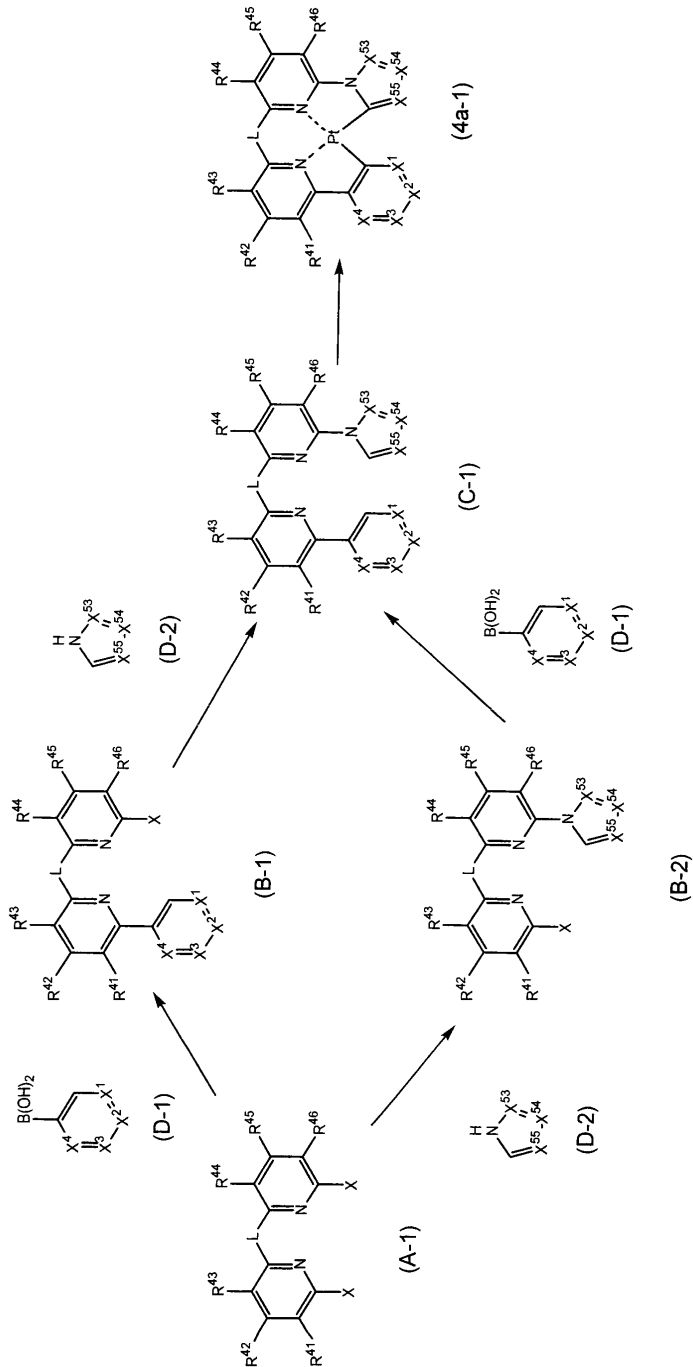
금속 착물의 합성에서, 리간드와 착물 형성 반응 시 사용되는 2 가 구리를 함유하는 화합물의 예에는 구리 아세

테이트, 구리 아세틸아세토네이트, 브롬화구리, 염화구리, 불화구리, 탄산구리, 시안화구리, 수산화구리, 산화구리, 황산구리 및 구리 트리플루오로아세테이트가 포함된다. 구리염의 더욱 바람직한 예에는 브롬화구리, 염화구리 및 불화구리와 같은 할로겐화구리가 포함된다.

- <312> 금속 착물의 합성에서, 리간드와 착물 형성 반응 시 사용되는 2 가 니켈을 함유하는 화합물의 예에는 니켈 아세테이트, 니켈 아세틸아세토네이트, 염화니켈, 브롬화니켈, 불화니켈, 요오드화니켈, 질산니켈 및 황산니켈이 포함된다. 니켈염의 더욱 바람직한 예에는 염화니켈 및 브롬화니켈과 같은 할로겐화니켈이 포함된다.
- <313> 금속 착물의 합성에서, 리간드와 착물 형성 반응 시 사용되는 2 가 팔라듐을 함유하는 화합물의 예에는 염화팔라듐, 브롬화팔라듐, 요오드화팔라듐, 팔라듐 아세테이트, 팔라듐 아세틸아세토네이트, 팔라듐 헥사플루오로아세틸아세토네이트, 팔라듐 트리플루오로아세테이트, 알릴 팔라듐 클로라이드 이량체, (2,2'-비피리딘)디클로로팔라듐, 비스(벤조니트릴)디클로로팔라듐, 비스(아세토니트릴)디클로로팔라듐, (비시클로[2.2.1]헵타-2,5-디엔)디클로로팔라듐, 디클로로(1,5-시클로옥타디엔)팔라듐, 디브로모비스(트리페닐포스핀)팔라듐, 디클로로(N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민)팔라듐, 디클로로(1,10-페난트롤린)팔라듐, 디클로로비스(트리페닐포스핀)팔라듐), 암모늄 테트라클로로팔라테이트, 디아민디브로모팔라듐, 디아민디클로로팔라듐, 디아민디요오도팔라듐, 칼륨 테트라브로모팔라테이트, 칼륨 테트라클로로팔라테이트 및 나트륨 테트라클로로팔라테이트가 포함되고; 0-가 팔라듐을 함유하는 화합물의 예에는 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 및 트리스(디벤질리덴아세톤)팔라듐이 포함된다.
- <314> 팔라듐염의 더욱 바람직한 예에는 염화팔라듐 및 브롬화팔라듐과 같은 할로겐화팔라듐; 비스(벤조니트릴)디클로로팔라듐 및 비스(아세토니트릴)디클로로팔라듐과 같은 니트릴 착물; 및 (비시클로[2.2.1]헵타-2,5-디엔)디클로로팔라듐 및 디클로로(1,5-시클로옥타디엔)팔라듐과 같은 올레핀 착물이 포함된다. 이 중에서, 염화팔라듐 및 브롬화팔라듐과 같은 할로겐화팔라듐; 및 비스(벤조니트릴)디클로로팔라듐 및 비스(아세토니트릴)디클로로팔라듐과 같은 니트릴 착물이 훨씬 바람직하다.
- <315> 금속 착물의 합성에서, 리간드와 착물 형성 반응 시 사용되는 플래티늄염에 대해, 2 가 플래티늄을 함유하는 화합물의 예에는 염화플래티늄, 브롬화플래티늄, 요오드화플래티늄, 플래티늄 아세틸아세토네이트, 비스(벤조니트릴)디클로로플래티늄, 비스(아세토니트릴)디클로로플래티늄, 디클로로(1,5-시클로옥타디엔)플래티늄, 디브로모비스(트리페닐포스핀)플래티늄, 디클로로(1,10-페난트롤린)플래티늄, 디클로로비스(트리페닐포스핀)플래티늄, 암모늄 테트라클로로플라티네이트, 디아민디브로모플래티늄, 디아민디클로로플래티늄, 디아민디요오도플래티늄, 칼륨 테트라브로모플라티네이트, 칼륨 테트라클로로플라티네이트, 나트륨 테트라클로로플라티네이트, 디메틸 비스(디메틸 설푸라이드)플래티늄, 디메틸 비스(디메틸 설푸라이드)플래티늄 및 디메틸(비시클로[2.2.1]헵타-2,5-디엔)플래티늄이 포함된다.
- <316> 플래티늄염의 더욱 바람직한 예에는 염화플래티늄, 브롬화플래티늄 및 요오드화플래티늄과 같은 할로겐화플래티늄; 비스(벤조니트릴)디클로로플래티늄 및 비스(아세토니트릴)디클로로플래티늄과 같은 니트릴 착물; 및 디클로로(1,5-시클로옥타디엔)플래티늄과 같은 올레핀 착물이 포함된다. 이 중에서, 염화플래티늄 및 브롬화플래티늄과 같은 할로겐화플래티늄; 및 비스(벤조니트릴)디클로로플래티늄 및 비스(아세토니트릴)디클로로플래티늄과 같은 니트릴 착물이 훨씬 바람직하다.
- <317> 금속 착물의 제조에 사용되는 금속염은 결정수, 결정 용매 또는 배위 용매를 함유할 수 있다. 금속의 원자가가 특별히 제한되지는 않지만, 금속은 바람직하게는 2 가 또는 0-가이고, 더욱 바람직하게는 2 가이다.
- <318> 금속 착물의 제조에서, 리간드와 착물 형성 반응 시 사용되는 금속염의 양에 대해, 착물을 형성할 수 있는 금속 원자 하나가 금속염에 함유되는 경우, 1 몰의 리간드에 대해 통상적으로 0.1 내지 10 몰, 바람직하게는 0.5 내지 5 몰, 더욱 바람직하게는 1 내지 3 몰이다. 금속염을 형성할 수 있는 금속 원자가 수 "n" 에 함유되는 경우, 금속염의 양은 1/n 배일 수 있다.
- <319> 금속 착물의 제조에서, 금속염과 리간드 간의 착물 형성 반응 시 사용되는 용매의 예에는 N,N-디메틸포름아미드, 포름아미드 및 N,N-디메틸아세트아미드와 같은 아미드; 아세토니트릴, 프로피오니트릴, 부티로니트릴 및 벤조니트릴과 같은 니트릴; 디클로로메탄, 1,2-디클로로에탄, 클로로포름, 사염화탄소, 클로로벤젠 및 o-디클로로벤젠과 같은 할로겐화 탄화수소; 펜탄, 헥산, 옥탄 및 데칸과 같은 지방족 탄화수소; 벤젠, 톨루엔, 자일렌 및 메시틸렌과 같은 방향족 탄화수소; 디에틸 에테르, 디소프로필 에테르, 부틸 에테르, tert-부틸 메틸 에테르, 1,2-디메톡시에탄, 테트라히드로푸란 및 1,4-디옥산과 같은 에테르; 아세톤, 메틸 에틸 케톤 및 메틸 이소부틸 케톤과 같은 케톤; 메탄올, 에탄올, 1-프로판올, 2-프로판올, tert-부틸 알코올, 2-메톡

시에탄올, 2-에톡시에탄올, 에틸렌 글리콜 및 글리세린과 같은 알코올; 및 물이 포함된다.

- <320> 용매의 더욱 바람직한 예에는 아세토니트릴, 프로피오니트릴, 부티로니트릴 및 벤조니트릴과 같은 니트릴; 벤젠, 톨루엔, 자일렌 및 메시틸렌과 같은 방향족 탄화수소; 및 메탄올, 에탄올, 1-프로판올, 2-프로판올, tert-부틸 알코올, 2-메톡시에탄올, 2-에톡시에탄올, 에틸렌 글리콜 및 글리세린과 같은 알코올이 포함된다.  
이 중에서, 아세토니트릴, 프로피오니트릴, 부티로니트릴 및 벤조니트릴과 같은 니트릴; 및 벤젠, 톨루엔, 자일렌 및 메시틸렌과 같은 방향족 탄화수소가 훨씬 바람직하다.
- <321> 이러한 용매는 단독으로 사용될 수 있거나, 두 종류 이상의 혼합물로 사용될 수 있다.
- <322> 금속 착물의 합성에서, 금속염과 리간드 간의 착물 형성 반응 시 사용되는 용매의 양은 반응을 완전히 수행하기에 충분한 한 특별히 제한되지 않는다. 사용되는 리간드에 대해 통상적으로 1 내지 200 부피배, 바람직하게는 5 내지 100 부피배이다.
- <323> 금속 착물의 합성에서, 할로젠화수소와 같은 산성 물질이 금속염과 리간드 간의 착물 형성 반응 시 형성되는 경우, 염기성 물질의 존재 하에서 반응을 수행할 수 있다. 염기성 물질의 예에는 트리에틸아민, 디이소프로필 에틸아민, 피리딘 및 1,8-디메틸아미노나프탈렌과 같은 3 차 아민; 나트륨 메톡시드 및 나트륨 에톡시와 같은 금속 알콕시드; 및 수산화나트륨, 수산화칼륨, 탄산칼륨 및 탄산수소나트륨과 같은 무기 염기가 포함된다.
- <324> 금속 착물의 합성에서, 금속염과 리간드 간의 착물 형성 반응이 비활성 기체 분위기 하에서 수행되는 것이 바람직하다. 비활성 기체의 예에는 질소 및 아르곤이 포함된다.
- <325> 금속 착물의 합성에서, 금속염과 리간드 간의 착물 형성 반응 시 반응 온도, 반응 시간 및 반응 압력은 원료, 용매 등에 따라 변한다. 반응 온도는 통상적으로 20 °C 내지 300 °C의 범위, 바람직하게는 50 °C 내지 250 °C의 범위, 더욱 바람직하게는 80 °C 내지 220 °C의 범위이다. 반응 시간은 통상적으로 30 분 내지 24 시간, 바람직하게는 1 내지 12 시간, 더욱 바람직하게는 2 내지 10 시간이다. 반응 압력이 통상적으로 대기압이지만, 원하는 경우, 승압 또는 감압일 수 있다.
- <326> 금속 착물의 합성에서, 금속염과 리간드 간의 착물 형성 반응 시 가열 측정은 특별히 제한되지 않는다. 특히, 오일 배스 또는 맨틀 가열기에 의한 가열, 또는 마이크로파 조사에 의한 가열이 유용하다.
- <327> 이와 같이 수득된 금속 착물은 원하는 경우 단리되고 정제될 수 있다. 단리 및 정제를 수행하는 방법의 예에는 컬럼 크로마토그래피, 재결정, 재침전 및 승화가 포함된다. 이러한 방법은 단독으로 또는 조합하여 이용될 수 있다.
- <328> 화학식 (1) 로 나타내는 금속 착물 중에서, 화학식 (4a-1) 로 나타내는 금속 착물은 또한 하기 제조 방법에 따라 합성될 수 있다. 그러나, 본 발명이 하기 방법에 제한되는 것으로 해석되어서는 안된다.



<329>

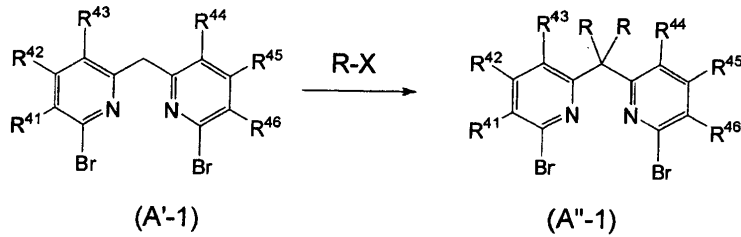
<330> 상기 화학식에서, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup>, X<sup>3</sup>, X<sup>4</sup>, X<sup>53</sup>, X<sup>54</sup>, X<sup>55</sup>, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup>, R<sup>46</sup> 및 L 은 상기 화학식 (4a-1) 의 것과 동일하다. X 는 할로젠 원자, 바람직하게는 염소 원자, 요오드 원자 또는 브롬 원자, 더욱 바람직하게는 요오드 원자 또는 브롬 원자, 가장 바람직하게는 요오드 원자를 나타낸다.

<331> (A-1) 로부터 (B-1) 을 획득하는 단계 및 (B-2) 로부터 (C-1) 을 획득하는 단계로서, 원하는 화합물 각각은 [Synth. Commun., 11, 513 (1981)] 등에 기재된 방법을 이용함으로써 합성될 수 있다.

<332> (B-1) 로부터 (C-1) 을 획득하는 단계 및 (A-1) 로부터 (B-2) 를 획득하는 단계로서, 원하는 화합물 각각은 [Angew. Chem. Int. Ed., 42, 2051-2053 (2003)] 등에 기재된 방법을 이용함으로써 합성될 수 있다.

<333> 연결기 L 이 메틸렌기인 상기 화학식 (A-1) 로 나타내는 화합물 (A'-1) 은 [Journal of Organic Chemistry, 53, 786 (1988)] 등에 기재된 방법에 의해 획득될 수 있다. 더욱이, 연결기가 디알킬메틸렌기인 화합물 (A''-1) 은 테트라히드로푸란 및 N,N-디메틸포름아미드와 같은 용매에 화합물 (A'-1) 을 용해시키고 리튬 디소프로필아미드, 칼륨 t-부톡시드 및 수소화나트륨과 같은 염기의 존재 하에 할로겐화알킬 R-X (식 중, R 은 알킬

기를 나타내고; X 는 브롬 및 요오드와 같은 할로젠 원자를 나타냄) 와 반응시켜 합성될 수 있다.



<334>

<335>

상기 화학식에서, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 및 R<sup>46</sup> 은 상기 화학식 (A-1) 의 것과 동일하다.

<336>

(C-1) 로부터 화학식 (4a-1) 로 나타내는 플래티늄 착물을 획득하는 단계에 대해, 원하는 화합물은 벤조니트릴에 염화플래티늄(II) 1 내지 1.5 당량 및 화합물 (C-1) 을 용해시키고, 130 °C 내지 가열 환류 온도 (벤조니트릴의 비점: 191 °C) 에서 상기 용액을 가열시키며 30 분 내지 4 시간 동안 이를 교반함으로써 합성될 수 있다.

화학식 (4a-1) 로 나타내는 금속 착물은 클로로포름, 디클로로메탄, 톨루엔, 자일렌, 아세트니트릴, 부티로니트릴, 벤조니트릴, 에틸 아세테이트 등으로부터의 재결정, 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피, 승화에 의한 정제 등에 의해 정제될 수 있다.

<337>

상기 제조 방법에서, 정의된 치환기가 특정 합성 방법의 조건 하에서 변경되거나 해당 방법을 수행하는데 비적당한 경우, 관능기의 보호 및 탈보호와 같은 측정에 의해 용이하게 제조될 수 있다 (예를 들어, [Protective Groups in Organic Synthesis, written by T.W. Greene, John Wiley & Sons Inc. (1981)] 등 참조). 또한, 치환기의 도입과 같은 반응 단계의 순서를 원하는 경우 적절하게 변경할 수 있다.

<338>

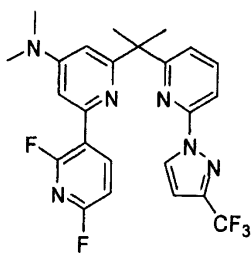
화합물 (C-1) 의 합성이 하기 특정 예에 대해 이하에 기재되어 있으나, 본 발명이 하기 방법에 제한되는 것으로 해석되어서는 안된다.

<339>

<화합물 L-142 의 합성>

<340>

[L-142]



<341>

<342>

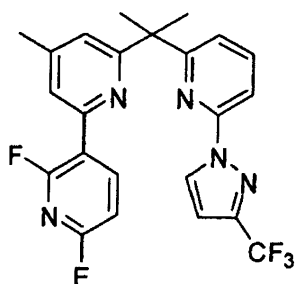
화합물 L-142 는 상기 화학식 (A''-1) 로 나타내는 화합물 (식 중, R<sup>41</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 및 R<sup>46</sup> 각각은 수소 원자이고, R<sup>42</sup> 는 디메틸아미노기이며, R 은 메틸기임) 을 사용하고, 하기 예시 화합물 Pt-5 의 합성에 나타낸 반응 조건 하에서 3-트리플루오로메틸피라졸 및 2,6-디플루오로피리딘-3-보론산과 반응시켜 합성될 수 있다.

<343>

<화합물 L-143 의 합성>

<344>

[L-143]



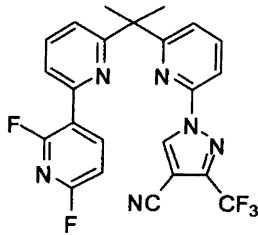
<345>

<346> 화합물 L-143 은 상기 화학식 (A"-1) 로 나타내는 화합물 (식 중, R<sup>41</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 및 R<sup>46</sup> 각각은 수소 원자이고, R<sup>42</sup> 및 R 각각은 메틸기임) 을 사용하고 하기 예시 화합물 Pt-5 의 합성에 나타낸 반응 조건 하에서 3-트리플루오로메틸피라졸 및 2,6-디플루오로피리디드-3-보론산과 반응시켜 합성될 수 있다.

<347> <화합물 L-11 의 합성>

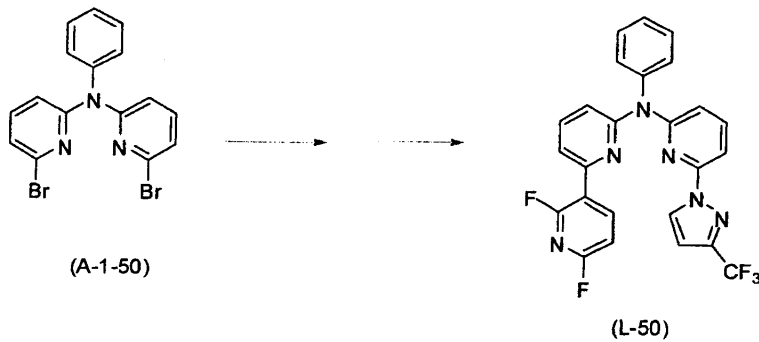
<348> 화합물 L-11 은 상기 화학식 (A"-1) 로 나타내는 화합물 (식 중, R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 및 R<sup>46</sup> 각각은 수소 원자이고, R 은 메틸기임) 을 사용하고 하기 예시 화합물 Pt-5 의 합성에 나타낸 반응 조건 하에서 4-시아노-3-트리플루오로메틸피라졸 및 2,6-디플루오로피리디드-3-보론산과 반응시켜 합성될 수 있다.

<349> [L-11]



<350>

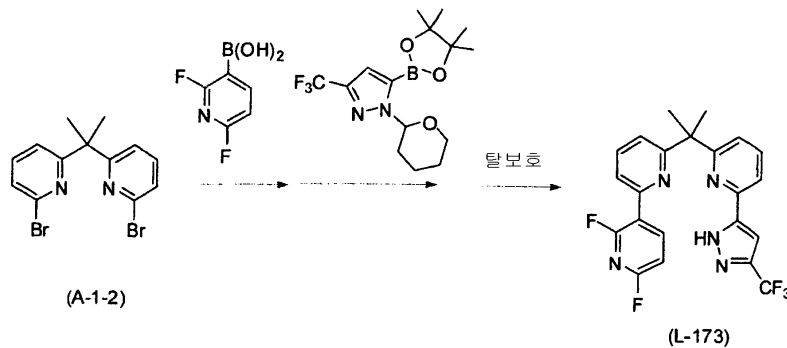
<351> <화합물 L-50 의 합성>



<352>

<353> 화합물 A-1-50 은 [Syn. Lett., 2, 263 (2005)] 등에 기재된 방법을 이용함으로써 합성될 수 있다. 또한, 리간드 L-50 은 하기 예시 화합물 Pt-5 등의 합성에 사용된 반응 조건 하에서 3-트리플루오로메틸피라졸 및 2,6-디플루오로피리디드-3-보론산과 화합물 A-1-50 을 반응시켜 합성될 수 있다.

<354> 또한, 상기 화학식 (4b-1) 로 나타내는 금속 착물을 수득하기 위해 사용되는 화합물은 다음과 같은 방식으로 합성될 수 있다.



<355>

<356> 화합물 L-173 은 상응하는 보론산 또는 보론산 에스테르와 화합물 A-1-2 를 반응시킨 후 질소 상의 보호기를 탈보호하여 합성될 수 있다.

<357> 상술된 바와 같이, 특정 구조를 갖는 상기 금속 착물이 발광층에 하나 이상의 호스트 재료와 함께 함유되는 것이 특히 바람직하다.

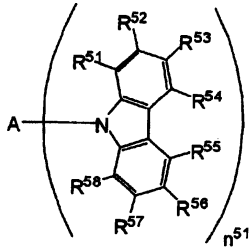
- <358> 본원에서 칭하는 호스트 재료는 발광층에서 전하의 주입 또는 수송을 주로 수행하는 화합물이고, 또한 그 자체로 실질적으로 발광하지 않는 화합물이다. 본 명세서에서, 용어 "실질적으로 발광하지 않는"은 실질적으로 발광하지 않는 화합물로부터의 발광의 양이 바람직하게는 소자 전체의 발광의 총량의 5 % 이하, 더욱 바람직하게는 3 % 이하, 훨씬 바람직하게는 1 % 이하인 것을 의미한다.
- <359> 발광층 중 호스트 재료의 양에 대해, 호스트 재료가 발광층에서 주성분 (함량이 가장 높은 성분) 인 것이 바람직하다. 호스트 재료의 양은 더욱 바람직하게는 50 질량% 이상 내지 99.9 질량% 이하, 훨씬 바람직하게는 70 질량% 이상 내지 99.8 질량% 이하, 특히 바람직하게는 80 질량% 이상 내지 99.7 질량% 이하, 가장 바람직하게는 85 질량% 이상 내지 99.5 질량% 이하이다.
- <360> 호스트 재료의 유리 전이 온도는 바람직하게는 100 °C 이상 내지 500 °C 이하, 더욱 바람직하게는 110 °C 이상 내지 300 °C 이하, 훨씬 바람직하게는 120 °C 이상 내지 250 °C 이하이다.
- <361> 필름 상태의 호스트 재료의 형광 파장은 바람직하게는 400 nm 이상 내지 650 nm 이하의 범위, 더욱 바람직하게는 420 nm 이상 내지 600 nm 이하의 범위, 훨씬 바람직하게는 440 nm 이상 내지 550 nm 이하의 범위이다.
- <362> 호스트 재료로서, JP-A-2002-100476 의 단락 0113 내지 0161 에 개시되어 있는 화합물 및 JP-A-2004-214179 의 단락 0087 내지 0098 에 개시되어 있는 화합물이 적합하게 사용될 수 있지만, 본 발명이 이러한 화합물에 제한되는 것으로 해석되어서는 안된다.
- <363> 또한, 호스트 재료의 예에는 3 차 아민 구조를 갖는 재료, 카르바졸 구조를 갖는 재료, 인돌 구조를 갖는 재료, 디아릴아민 구조를 갖는 재료, 피리딘 구조를 갖는 재료, 피라진 구조를 갖는 재료, 트리아진 구조를 갖는 재료 및 아릴실란 구조를 갖는 재료 뿐만 아니라 이후에 기재되는 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층의 섹션에서 예시된 재료가 포함된다. 이 중에서, 카르바졸 구조 또는 인돌 구조를 갖는 재료가 더욱 바람직하고; 카르바졸 구조를 갖는 재료가 특히 바람직하다.
- <364> 유기층이 하나 이상의 중수소를 갖는 재료를 함유하는 것이 바람직하다.
- <365> 하나 이상의 중수소를 갖는 재료를 사용함으로써, 내구성은 더욱 강화될 수 있다.
- <366> 탄소-중수소 (C-D) 결합의 결합 에너지가 탄소-수소 (C-H) 결합의 결합 에너지보다 높다는 것은 공지되어 있다. 따라서, 탄소-수소 결합이 끊어지는 열화 메커니즘은 억제될 수 있다. 이러한 이유로, 수소 원자를 중수소 원자로 대체하여 내구성을 강화시키는 것이 효과적이라고 생각할 수 있다.
- <367> 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 재료는 유기 재료와 무기 재료 중 하나 또는 모두일 수 있고, 바람직하게는 유기 재료이다.
- <368> 용어 "하나 이상의 중수소 원자를 갖는 유기 재료"는 수소 원자 또는 중수소 원자가 유기 재료에서 결합될 수 있는 위치에서 중수소 원자 및 수소 원자가 100/0 내지 1/99 범위의 비율 ((중수소 원자의 원자수)/(수소 원자의 원자수)) 로 함유되는 것을 의미한다. 여기서, 수소 원자 또는 중수소 원자가 결합될 수 있는 위치는 하나 이상의 특정 구역 내지 한 분자 전체의 범위 중 임의의 위치일 수 있다. 즉, 상기 비율은 중수소 원자에 의해 차지된 비율 (중수소화 비율) 이 수소 원자 또는 중수소 원자가 결합될 수 있는 위치의 총 합에 대해 1 내지 100 % 라는 사실과 동일하다.
- <369> 따라서, 상기 비율의 상태는 해당 위치에서 중수소를 함유하는 화합물 및 적당한 비율로 해당 위치에서 중수소를 함유하지 않는 화합물을 동시에 사용함으로써 실현될 수 있다.
- <370> 수소 원자에 대한 중수소 원자의 조성에 대해, 비율은 바람직하게는 100/0 내지 5/95 의 범위, 더욱 바람직하게는 100/0 내지 50/50 의 범위, 특히 바람직하게는 100/0 내지 80/20 의 범위이다.
- <371> 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 유기 재료가 유기 전계발광 소자의 임의의 층에 함유될 수 있지만, 바람직하게는 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층, 엑시톤 차단층 및 전하 차단층 중 임의의 하나 또는 복수에 함유되고; 더욱 바람직하게는 발광층, 엑시톤 차단층 및 전하 차단층 중 임의의 하나 또는 복수에 함유되고; 훨씬 바람직하게는 발광층에 함유되며; 특히 바람직하게는 발광층에 호스트 재료로서 함유된다. 호스트 재료로서 사용되는 경우, 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 유기 재료의 양은 앞서 기재된 호스트 재료의 양과 동일하다.
- <372> 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 유기 재료의 예에는 WO 02/47440 에 개시되어 있는 화합물이 포함되지만, 본

발명이 이에 제한되는 것으로 해석되어서는 안된다.

<373> 특히, 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 유기 재료의 바람직한 예에는 질소 원자 함유 재료가 포함된다. 이 중에서, 3 차 아민 구조, 카르바졸 구조 또는 인돌 구조를 갖는 재료가 바람직하고; 카르바졸 구조 또는 인돌 구조를 갖는 재료가 더욱 바람직하며; 카르바졸 구조를 갖는 재료가 특히 바람직하다.

<374> 카르바졸 구조를 갖는 재료에 대해, 하기 화학식 (V) 로 나타내는 화합물이 특히 바람직하다. 화학식 (V) 로 나타내는 화합물은 이하에 기재된다.

<375> [화학식 V]



<376> 상기 화학식 (V) 에서, R<sup>51</sup> 내지 R<sup>58</sup> 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R<sup>51</sup> 내지 R<sup>58</sup> 에서, 인접 치환기는 서로 결합되어 축합 고리를 형성할 수 있다. A 는 연결기를 나타내고; n<sup>51</sup> 은 2 내지 6 의 정수를 나타낸다. 화학식 (V) 로 나타내는 화합물은 하나 이상의 중수소 원자를 함유한다.

<378> 치환기의 예에는 중수소 원자 및 상기 치환기 B 에 예시된 것이 포함된다.

<379> R<sup>51</sup> 내지 R<sup>58</sup> 로 나타내는 치환기는 바람직하게는 중수소 원자, 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 할로젠기, 시아노기 또는 실릴기이고; 더욱 바람직하게는 중수소 원자, 알킬기, 헤테로아릴기, 할로젠기, 시아노기 또는 실릴기이며; 특히 바람직하게는 중수소 원자, 알킬기, 헤테로아릴기 또는 실릴기이다. 이러한 치환기는 추가로 다른 치환기로 치환될 수 있거나, 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.

<380> R<sup>51</sup> 내지 R<sup>58</sup> 로 나타내는 알킬기는 바람직하게는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, tert-부틸, n-옥틸, 시클로프로필, 시클로펜틸, 시클로헥실, 1-아다만틸 또는 트리플루오로메틸이고; 더욱 바람직하게는 메틸, 이소프로필, tert-부틸, n-옥틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 1-아다만틸 또는 트리플루오로메틸이며; 특히 바람직하게는 tert-부틸, 시클로헥실, 1-아다만틸 또는 트리플루오로메틸이다. 이러한 치환기는 추가로 다른 치환기로 치환될 수 있거나, 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.

<381> R<sup>51</sup> 내지 R<sup>58</sup> 로 나타내는 헤테로아릴기는 바람직하게는 이미다졸릴, 피라졸릴, 피리딜, 퀴놀릴, 이소퀴놀리닐, 피롤릴, 인돌릴, 푸릴, 티에닐, 벤즈옥사졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 카르바졸릴 또는 아제피닐이고; 더욱 바람직하게는 이미다졸릴, 피라졸릴, 퀴놀릴, 인돌릴, 푸릴, 티에닐, 벤즈이미다졸릴, 카르바졸릴 또는 아제피닐이며; 특히 바람직하게는 인돌릴, 푸릴, 티에닐, 벤즈이미다졸릴, 카르바졸릴 또는 아제피닐이다. 이러한 치환기는 추가로 다른 치환기로 치환될 수 있거나 축합 고리 구조를 형성할 수 있거나, 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.

<382> R<sup>51</sup> 내지 R<sup>58</sup> 로 나타내는 실릴기는 바람직하게는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리아이소프로필실릴, 메틸디페닐실릴, 디메틸-tert-부틸실릴, 디메틸페닐실릴, 디페닐-tert-부틸실릴 또는 트리페닐실릴이고; 더욱 바람직하게는 트리메틸실릴, 트리아이소프로필실릴, 디메틸-tert-부틸실릴, 디페닐-tert-부틸실릴 또는 트리페닐실릴이며; 특히 바람직하게는 트리메틸실릴, 디메틸-tert-부틸실릴 또는 트리페닐실릴이다. 이러한 치환기는 다른 치환기로 추가로 치환될 수 있거나, 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.

<383> 특히, R<sup>52</sup> 및 R<sup>57</sup> 로 나타내는 치환기는 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 실릴기 또는 중수소 원자이고; 더욱 바람직하게는 알킬기, 실릴기 또는 중수소 원자이며; 특히 바람직하게는 tert-부틸기, 아다만틸기, 트리메틸실릴기, 트리페닐실릴기 또는 중수소 원자이다.

<384> 특히, R<sup>53</sup> 및 R<sup>56</sup> 으로 나타내는 치환기는 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 실릴기 또는 중수소 원자이고; 더욱 바

람직하게는 알킬기, 실릴기 또는 중수소 원자이며; 특히 바람직하게는 tert-부틸기, 아다만틸기, 트리메틸실릴기, 트리페닐실릴기 또는 중수소 원자이다.

<385> n<sup>51</sup> 은 바람직하게는 2 내지 4 이고, 더욱 바람직하게는 2 내지 3 이며, 특히 바람직하게는 2 이다.

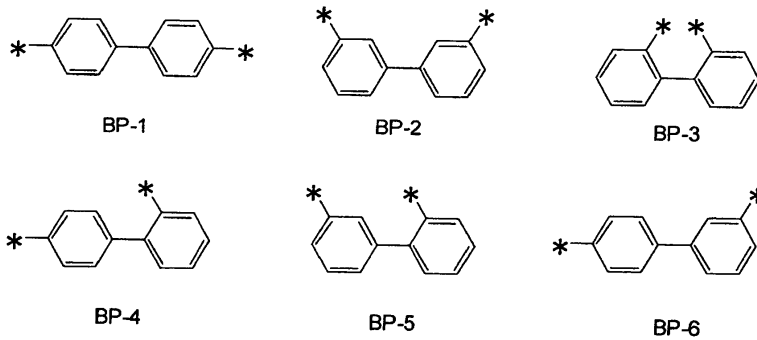
<386> A 로 나타내는 연결기는 바람직하게는 알킬렌, 아릴렌, 헤테로아릴렌, 실릴렌, 또는 비페닐 구조를 갖는 2 가 연결기 (비페닐디일) 이고; 더욱 바람직하게는 아릴렌, 헤테로아릴렌, 또는 비페닐 구조를 갖는 2 가 연결기 (비페닐디일) 이며; 특히 바람직하게는 아릴렌, 또는 비페닐 구조를 갖는 2 가 연결기 (비페닐디일) 이다. 이러한 연결기는 추가로 중수소 원자 또는 상기 치환기 B 로 나타내는 치환기로 치환될 수 있다.

<387> 아릴렌은 바람직하게는 페닐렌, 나프틸렌, 비페닐렌 또는 테르페닐렌이고; 더욱 바람직하게는 페닐렌 또는 비페닐렌이며; 특히 바람직하게는 페닐렌이다.

<388> 페닐렌은 바람직하게는 1,2,3,4,5,6-육치환된 페닐렌, 1,2,4,5-사치환된 페닐렌, 1,3,5-삼치환된 페닐렌, 1,2-이치환된 페닐렌, 1,3-이치환된 페닐렌 또는 1,4-이치환된 페닐렌이고; 더욱 바람직하게는 1,2-이치환된 페닐렌, 1,3-이치환된 페닐렌 또는 1,4-이치환된 페닐렌이며; 특히 바람직하게는 1,3-이치환된 페닐렌 또는 1,4-이치환된 페닐렌이다.

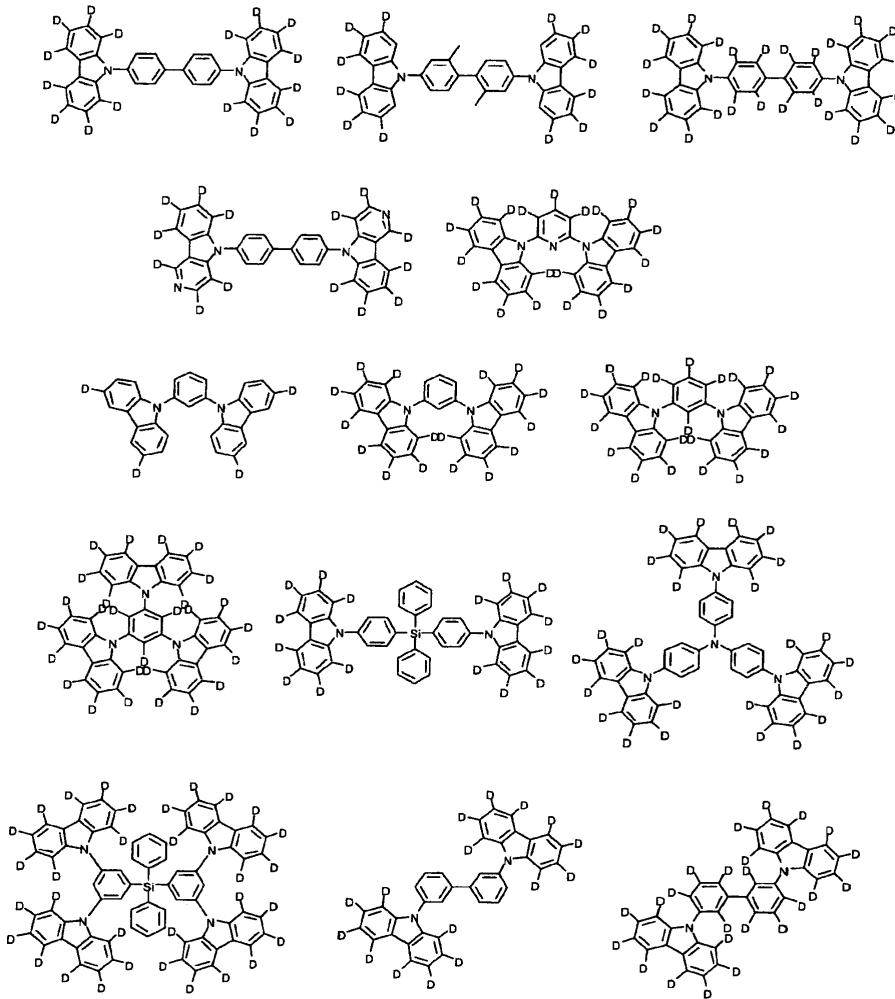
<389> 헤테로아릴렌은 바람직하게는 이치환된 피리딜렌 또는 이치환된 N-페닐카르바졸릴렌이고; 더욱 바람직하게는 2,6-이치환된 피리딜렌, 3,5-이치환된 피리딜렌 또는 3,6-이치환된 N-페닐카르바졸릴렌이며; 특히 바람직하게는 3,6-이치환된 N-페닐카르바졸릴렌이다.

<390> 비페닐 구조를 갖는 2 가 연결기 (비페닐디일) 의 예에는 이하 기재되는 것이 포함된다. 이 중에서, BP-1, BP-2 및 BP-6 이 바람직하고; BP-1 및 BP-2 가 더욱 바람직하며; BP-2 가 훨씬 바람직하다.



<391> 상기 구조식에서, \* 는 카르바졸의 질소 원자에 대한 결합 위치를 나타낸다.

<392> 각각 하나 이상의 중수소 원자를 갖는 카르바졸 구조 또는 인돌 구조를 갖는 재료의 예는 이하 기재되는 것이다.



<394>

<395> 본 발명의 유기 전계발광 소자 (유기 EL 소자) 에서, 상기 화학식 (1) 내지 (4), (4a-1) 내지 (4a-3) 및 (4b-1) 내지 (4b-3) 으로 나타내는 화합물 중 하나 이상이 발광층에 함유되는 것이 바람직하다.

<396> 다음으로, 유기 EL 소자를 구성하는 부품 각각을 기재한다.

<397> <유기층>

<398> 본 발명의 유기층이 기재된다. 본 발명의 소자는 발광층을 포함하는 하나 이상의 유기층을 가진다. 앞서 기재된 바와 같이, 유기 발광층 이외의 유기층의 예에는 정공 수송층, 전자 수송층, 정공 차단층, 전자 차단층, 정공 주입층 및 전자 주입층과 같은 각각의 층이 포함된다.

<399> - 유기층의 형성 -

<400> 각각의 유기층은 기상 증착 및 스퍼터링 (sputtering) 과 같은 건조 제조 공정, 수송 공정, 인쇄 공정 등 중 임의의 공정에 의해 적합하게 형성될 수 있다.

<401> - 발광층 -

<402> 발광층은 전기장에 적용시, 애노드, 정공 주입층 또는 정공 수송층으로부터 정공을 받고, 캐소드, 전자 주입층 또는 전자 수송층으로부터 전자를 받으며 정공 및 전자의 재조합 위치를 제공하여 발광하도록 하는 기능을 갖는 층이다.

<403> 발광층은 발광 재료로만 배열될 수 있거나, 호스트 재료 및 발광 재료의 혼합 층으로서 배열될 수 있다. 발광 재료는 형광 재료 또는 인광 재료일 수 있다. 발광 재료는 단일 종류 또는 두 종류 이상으로 제조될 수 있다. 호스트 재료가 전하 수송 재료인 것이 바람직하다. 호스트 재료는 단일 종류 또는 두 종류 이상으로 제조될 수 있다. 이의 예에는 전자 수송 호스트 재료 및 정공 수송 호스트 재료가 혼합되는 배열이 포함된다. 더욱이, 발광층은 전하 수송 특성을 갖지 않고 발광하지 않는 재료를 함유할 수 있다.

- <404> 또한, 발광층은 단층 또는 2 이상의 층으로 제조될 수 있다. 각 층은 서로 상이한 발광색으로 발광할 수 있다.
- <405> 형광 재료의 예에는 화합물, 예를 들어, 벤즈옥사졸 유도체, 벤즈이미다졸 유도체, 벤조티아졸 유도체, 스티릴 벤젠 유도체, 폴리페닐 유도체, 디페닐부타디엔 유도체, 테트라페닐부타디엔 유도체, 나프탈이미드 유도체, 쿠마린 유도체, 축합 방향족 화합물, 페리논 유도체, 옥사디아졸 유도체, 옥사진 유도체, 알다진 유도체, 피탈리진 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 비스스티릴안트라센 유도체, 퀴나크리돈 유도체, 피롤로피리딘 유도체, 티아디아졸로피리딘 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 스티릴아민 유도체, 디케토피롤로피롤 유도체, 방향족 디메틸리딘 화합물, 8-퀴놀리놀 유도체의 착물 및 피로메텐 유도체의 착물로 나타내는 다양한 착물, 중합체 화합물, 예컨대 폴리티오펜, 폴리페닐렌 및 폴리페닐렌 비닐렌, 유기 실란 유도체 등이 포함된다.
- <406> 인광 재료의 예에는, 특정 구조를 갖는 상기 금속 착물 이외에, 예를 들어, US6303238B1, US6097147, WO 00/57676, WO 00/70655, WO 01/08230, WO 01/39234A2, WO 01/41512A1, WO 02/02714A2, WO 02/15645A1, WO 02/44189A1, WO 05/19373A2, JP-A-2001-247859, JP-A-2002-302671, JP-A-2002-117978, JP-A-2003-133074, JP-A-2002-235076, JP-A-2003-123982, JP-A-2002-170684, EP1211257, JP-A-2002-226495, JP-A-2002-234894, JP-A-2001-247859, JP-A-2001-298470, JP-A-2002-173674, JP-A-2002-203678, JP-A-2002-203679, JP-A-2004-357791, JP-A-2006-256999, JP-A-2007-19462, JP-A-2007-84635, JP-A-2007-96259 등에 개시되어 있는 인광 화합물이 포함된다. 특히, 발광 재료의 더욱 바람직한 예에는 Ir 착물, Pt 착물, Cu 착물, Re 착물, W 착물, Rh 착물, Ru 착물, Pd 착물, Os 착물, Eu 착물, Tb 착물, Gd 착물, Dy 착물 및 Ce 착물이 포함된다. 특히, Ir 착물, Pt 착물 및 Re 착물이 바람직하고; 금속-탄소 결합, 금속-질소 결합, 금속-산소 결합 및 금속-황 결합 중 하나 이상의 배위결합 방식을 함유하는 Ir 착물, Pt 착물 및 Re 착물이 더욱 바람직하다. 더욱이, 발광 효율, 구동 내구성, 색도 등의 관점에서, 네자리 또는 여러자리 리간드를 함유하는 Ir 착물, Pt 착물 및 Re 착물이 특히 바람직하다.
- <407> 발광층에 함유된 호스트 재료로서, 앞서 기재된 것이 사용될 수 있다.
- <408> 발광층의 두께는 특별히 제한되지 않는다. 일반적으로, 발광층의 두께는 바람직하게는 1 nm 내지 500 nm, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm, 훨씬 바람직하게는 10 nm 내지 100 nm 이다.
- <409> - 정공 주입층 및 정공 수송층 -
- <410> 정공 주입층 및 정공 수송층 각각은 애노드 또는 애노드 측면으로부터 정공을 받아들고 캐소드 측면으로 이를 수송하는 기능을 갖는 층이다. 특히, 정공 주입층 및 정공 수송층 각각은 바람직하게는 카르바졸 유도체, 아자카르바졸 유도체, 인돌 유도체, 아자인돌 유도체, 이미다졸 유도체, 폴리아릴알칸 유도체, 피라졸린 유도체, 피라졸론 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노-치환된 칼콘 유도체, 스티릴안트라센 유도체, 플루오레논 유도체, 히드라존 유도체, 스티벤 유도체, 실라잔 유도체, 방향족 3 차 아민 화합물, 스티릴아민 화합물, 방향족 디메틸리딘계 화합물, 포르피린계 화합물, 유기 실란 유도체, 리간드로서 탄소, 페닐아졸 또는 페닐아진을 갖는 모든 종류의 금속 착물 (Ir 착물로 나타냄) 등을 함유하는 층이다.
- <411> 전자-받개 도판트 (dopant) 는 정공 주입층 또는 정공 수송층에 함유될 수 있다. 정공 주입층 또는 정공 수송층에 도입되는 전자-받개 도판트로서, 임의의 무기 화합물 또는 유기 화합물이 전자-받개이고 유기 화합물을 산화시키는 특성을 갖는 한 사용될 수 있다.
- <412> 특히, 무기 화합물의 예에는 염화제2철, 염화알루미늄, 염화갈륨, 염화인듐 및 5염화안티몬과 같은 금속 할로젠 화물; 및 5산화바나듐 및 3산화몰리브덴과 같은 금속 산화물이 포함된다.
- <413> 유기 화합물로서, 니트로기, 할로젠, 시아노기, 트리플루오로메틸기 등을 치환기로서 갖는 화합물, 퀴논계 화합물, 산 무수물계 화합물, 플러렌 등이 적합하게 사용될 수 있다.
- <414> 또한, JP-A-6-212153, JP-A-11-111463, JP-A-11-251067, JP-A-2000-196140, JP-A-2000-286054, JP-A-2000-315580, JP-A-2001-102175, JP-A-2001-160493, JP-A-2002-252085, JP-A-2002-56985, JP-A-2003-157981, JP-A-2003-217862, JP-A-2003-229278, JP-A-2004-342614, JP-A-2005-72012, JP-A-2005-166637, JP-A-2005-209643 등에 개시되어 있는 화합물이 또한 적합하게 사용될 수 있다.
- <415> 이 중에서, 헥사시아노부타디엔, 헥사시아노벤젠, 테트라시아노에틸렌, 테트라시아노퀴노디메탄, 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄, p-플루오라닐, p-클로라닐, p-브로마닐, p-벤조퀴논, 2,6-디클로로벤조퀴논, 2,5-디클로로벤조퀴논, 1,2,4,5-테트라시아노벤젠, 1,4-디시아노테트라플루오로벤젠, 2,3-디클로로-5,6-디시아노벤조

퀴논, p-디니트로벤젠, m-디니트로벤젠, o-디니트로벤젠, 1,4-나프토퀴논, 2,3-디클로로나프토퀴논, 1,3-디니트로나프탈렌, 1,5-디니트로나프탈렌, 9,10-안트라퀴논, 1,3,6,8-테트라니트로카르바졸, 2,4,7-트리니트로-9-플루오레논, 2,3,5,6-테트라시아노피리딘 및 폴러렌 C60 이 바람직하고; 헥사시아노부타디엔, 헥사시아노벤젠, 테트라시아노에틸렌, 테트라시아노퀴노디메탄, 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄, p-플루오라닐, p-클로라닐, p-브로마닐, 2,6-디클로로벤조퀴논, 2,5-디클로로벤조퀴논, 2,3-디클로로나프토퀴논, 1,2,4,5-테트라시아노벤젠, 2,3-디클로로-5,6-디시아노벤조퀴논 및 2,3,5,6-테트라시아노피리딘이 더욱 바람직하며; 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄이 특히 바람직하다.

<416> 이러한 전자-받개 도판트가 단독으로 또는 두 종류 이상의 조합으로 사용될 수 있다. 전자-받개 도판트의 양이 재료의 종류에 따라 변하지만, 정공 수송층 재료에 대해 바람직하게는 0.01 질량% 내지 50 질량%, 더욱 바람직하게는 0.05 질량% 내지 20 질량%, 특히 바람직하게는 0.1 질량% 내지 10 질량%이다.

<417> 정공 주입층 및 정공 수송층 각각의 두께는 구동 전압 저하의 관점에서 바람직하게는 500 nm 이하이다.

<418> 정공 수송층의 두께는 바람직하게는 1 nm 내지 500 nm, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm, 훨씬 바람직하게는 10 nm 내지 100 nm 이다. 또한, 정공 주입층의 두께는 바람직하게는 0.1 nm 내지 200 nm, 더욱 바람직하게는 0.5 nm 내지 100 nm, 훨씬 바람직하게는 1 nm 내지 100 nm 이다.

<419> 정공 주입층 및 정공 수송층 각각은 상기 재료 중 하나 또는 두 종류 이상으로 구성된 단층 구조일 수 있거나, 동일하거나 상이한 조성의 복수 층으로 구성된 다층 구조일 수 있다.

<420> - 전자 주입층 및 전자 수송층 -

<421> 전자 주입층 및 전자 수송층 각각은 캐소드 또는 캐소드 측면으로부터 전자를 받아들이고 애노드 측면으로 이를 수송하는 기능을 갖는 층이다. 특히, 전자 주입층 및 전자 수송층 각각은 바람직하게는 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 플루오레논 유도체, 안트라퀴노디메탄 유도체, 안트론 유도체, 디페닐퀴논 유도체, 티오피란디옥시드 유도체, 카르보다이미드 유도체, 플루오레닐리덴메탄 유도체, 디스티릴피라진 유도체, 나프탈렌, 페틸렌 등의 방향족 테트라카르복실산 무수물, 프탈로시아닌 유도체, 8-퀴놀리놀 유도체의 착물 및 리간드로서 프탈로시아닌, 벤즈옥사졸 또는 벤조티아졸을 함유하는 착물로 나타내는 모든 종류의 착물, 유기 실란 유도체 등을 함유하는 층이다.

<422> 전자-주개 도판트는 전자 주입층 또는 전자 수송층에 함유될 수 있다. 전자 주입층 또는 전자 수송층에 도입되는 전자-주개 도판트로서, Li 과 같은 알칼리금속, Mg 와 같은 알칼리토금속, 희토류 금속을 포함하는 전이 금속, 환원 유기 화합물 등이 전자-받개이고 유기 화합물을 환원시키는 특성을 갖는 한 적합하게 사용된다. 4.2 eV 이하의 일함수를 갖는 금속이 금속으로서 적합하게 사용될 수 있다. 이의 특정 예에는 Li, Na, K, Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Y, Cs, La, Sm, Gd 및 Yb 가 포함된다. 또한, 환원 유기 화합물의 예에는 질소-함유 화합물, 황-함유 화합물 및 인-함유 화합물이 포함된다.

<423> 또한, JP-A-6-212153, JP-A-2000-196140, JP-A-2003-68468, JP-A-2003-229278, JP-A-2004-342614 등에 개시되어 있는 재료가 사용될 수 있다.

<424> 이러한 전자-주개 도판트가 단독으로 또는 두 종류 이상의 조합으로 사용될 수 있다. 전자-주개 도판트의 양이 재료의 종류에 따라 변하지만, 전자 수송층 재료에 대해 바람직하게는 0.1 질량% 내지 99 질량%, 더욱 바람직하게는 1.0 질량% 내지 80 질량%, 특히 바람직하게는 2.0 질량% 내지 70 질량%이다.

<425> 전자 주입층 및 전자 수송층 각각의 두께는 구동 전압 저하의 측면에서 바람직하게는 500 nm 이하이다.

<426> 전자 수송층의 두께는 바람직하게는 1 nm 내지 500 nm, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm, 훨씬 바람직하게는 10 nm 내지 100 nm 이다. 또한, 전자 주입층의 두께는 바람직하게는 0.1 nm 내지 200 nm, 더욱 바람직하게는 0.2 nm 내지 100 nm, 훨씬 바람직하게는 0.5 nm 내지 50 nm 이다.

<427> 전자 주입층 및 전자 수송층 각각은 상기 재료 중 하나 또는 두 종류 이상으로 구성된 단층 구조일 수 있거나, 동일하거나 상이한 조성의 복수 층으로 구성된 다층 구조일 수 있다.

<428> - 정공 차단층 -

<429> 정공 차단층은 애노드 측면 내지 발광층에서 캐소드 측면으로 수송되는 정공의 침투를 방지하는 기능을 갖는 층이다. 본 발명에서, 정공 차단층은 캐소드 측면의 발광층에 인접한 유기층으로서 제공될 수 있다.

- <430> 정공 차단층을 구성하는 유기 화합물의 예에는 알루미늄(III) 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)4-페닐페놀레이트 ("BA1q" 로 약숴됨) 과 같은 알루미늄 착물; 트리아졸 유도체; 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린 ("BCP" 로 약숴됨) 과 같은 페난트롤린 유도체가 포함된다. 정공 차단층의 두께는 바람직하게는 1 nm 내지 500 nm, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm, 훨씬 바람직하게는 10 nm 내지 100 nm 이다.
- <431> 정공 차단층은 상기 재료 중 하나 또는 두 종류 이상으로 구성된 단층 구조일 수 있거나, 동일하거나 상이한 조성의 복수 층으로 구성된 다층 구조일 수 있다.
- <432> - 전하 생성층 -
- <433> 방출 효율을 강화시키기 위해, 전하 생성층은 복수의 발광층 사이에 제공될 수 있다.
- <434> 전하 생성층은 전기장 적용 시 전하 (정공 및 전자) 를 생성하는 기능 및 생성된 전하를 전하 생성층에 인접한 층에 주입하는 기능을 갖는 층이다.
- <435> 전하 생성층을 형성할 수 있는 재료로서, 상기 기능을 갖는 임의의 재료가 유용하다. 이러한 재료는 단일 화합물로 형성될 수 있거나, 복수의 화합물로 형성될 수 있다.
- <436> 특히, 상기 재료는 전도성을 갖는 재료일 수 있거나, 도핑된 유기층에서와 같이 반도체성을 갖는 재료일 수 있거나, 전기 절연 특성을 갖는 재료일 수 있다. 이의 예에는 JP-A-11-329748, JP-A-2003-272860, JP-A-2004-39617 등에 개시되어 있는 재료가 포함된다.
- <437> 더욱 특히, ITO 및 IZO (산화인듐아연) 와 같은 투명 전도성 재료; C60 과 같은 풀러렌; 올리고티오펜과 같은 전도성 유기 재료; 금속 프탈로시아닌, 비금속 프탈로시아닌, 금속 포르피린 및 비금속 포르피린과 같은 전도성 유기 재료; Ca, Ag, Al, Mg:Ag 합금, Al:Li 합금 및 Mg:Li 합금과 같은 금속 재료; 정공 전도성 재료; 전자 전도성 재료; 및 이들의 혼합물이 사용될 수 있다.
- <438> 정공 전도성 재료의 예에는 전자-끄는 특성을 갖는 산화제 (예를 들어, F4-TCNQ, TCNQ, FeCl<sub>3</sub> 등) 로 정공 수송 유기 재료 (예를 들어, 2-TNATA, NPD 등) 를 도핑하여 수득된 재료; P-형 전도성 중합체; 및 P-형 반도체가 포함된다. 전자 전도성 재료의 예에는 4.0 eV 미만의 일함수를 갖는 금속 화합물 또는 금속으로 전자 수송 유기 재료를 도핑하여 수득된 재료; N-형 전도성 중합체; 및 N-형 반도체가 포함된다. N-형 반도체의 예에는 N-형 Si, N-형 CdS 및 N-형 ZnS 가 포함되고, P-형 반도체의 예에는 P-형 Si, P-형 CdTe 및 P-형 CuO 가 포함된다.
- <439> 또한, 전하 생성층으로서, V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 와 같은 전기 절연 재료가 사용될 수 있다.
- <440> 전하 생성층은 단층, 또는 복수 층의 적층물일 수 있다. 복수 층의 적층 구조의 예에는 투명 전도성 재료 및 금속 재료와 같은 전도성을 갖는 재료와 정공 전도성 재료 또는 전자 전도성 재료가 적층되는 구조를 갖는 층; 및 상기 정공 전도성 재료와 전자 전도성 재료가 적층되는 구조를 갖는 층이 포함된다.
- <441> 일반적으로, 전하 생성층의 재료 및 두께가 가시광선에 대한 투과율이 50 % 이상이라도 선택되는 것이 바람직하다. 또한, 전하 생성층의 두께는 특별히 제한되지는 않지만, 바람직하게는 0.5 내지 200 nm, 더욱 바람직하게는 1 내지 100 nm, 훨씬 바람직하게는 3 내지 50 nm, 특히 바람직하게는 5 내지 30 nm 이다.
- <442> 전하 생성층을 형성하는 방법은 특별히 제한되지는 않지만, 유기 화합물 층을 형성하는 상기 방법을 채택할 수 있다.
- <443> 전하 생성층이 상기 2 이상의 발광층 사이에서 형성되지만, 전하 생성층은 애노드 측면 및 캐소드 측면의 인접 층에 전하를 주입하는 기능을 갖는 재료를 함유할 수 있다. 애노드 측면에 인접한 층으로의 전자 주입 특성을 강화시키기 위해, 전자 주입 화합물, 예를 들어, BaO, SrO, Li<sub>2</sub>O, LiCl, LiF, MgF<sub>2</sub>, MgO, CaF<sub>2</sub> 등은 전하 생성층의 애노드 측면 상에 적층될 수 있다.
- <444> 상기 함유물에 더해, 전하 생성층의 재료는 JP-A-2003-45676, 미국 특허 제 6,337,492 호, 제 6,107,734 호 및 제 6,872,472 호 등의 기재내용에 기초하여 선택될 수 있다.
- <445> <보호층>
- <446> 전체 유기 EL 소자는 보호층으로 보호될 수 있다.
- <447> 보호층에 함유될 재료로서, 소자의 열화를 촉진시키는 물질, 예컨대 수분 및 산소의 소자로의 혼입을 억제시키

는 기능을 갖는 임의의 재료가 유용하다.

- <448> 이의 특정 예에는 금속 (예를 들어, In, Sn, Pb, Au, Cu, Ag, Al, Ti, Ni 등), 금속 산화물 (예를 들어, 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>, TiO<sub>2</sub> 등), 금속 질화물 (예를 들어, SiN<sub>x</sub>, SiN<sub>x</sub>O<sub>y</sub> 등), 금속 불화물 (예를 들어, MgF<sub>2</sub>, LiF, AlF<sub>3</sub>, CaF<sub>2</sub> 등), 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리이미드, 폴리우레아, 폴리테트라플루오로에틸렌, 폴리클로로트리플루오로에틸렌, 폴리디클로로디플루오로에틸렌, 클로로트리플루오로에틸렌과 디클로로디플루오로에틸렌의 공중합체, 테트라플루오로에틸렌 및 하나 이상의 공단량체를 함유하는 단량체 혼합물을 공중합시켜 수득된 공중합체, 공중합체 주쇄에 시클릭 구조를 갖는 불소-함유 공중합체, 흡수 인자가 1 % 이상인 흡수 물질 및 흡수 인자가 0.1 % 이하인 방수 물질이 포함된다.
- <449> 보호층을 형성하는 방법은 특별히 제한되지 않는다. 예를 들어, 진공 기상 증착 공정, 스퍼터링 공정, 반응성 스퍼터링 공정, MBE (분자 빔 에피택시) 공정, 클러스터 이온 빔 공정, 이온 플레이팅 공정, 플라즈마 중합화 공정 (고주파 여기 이온 플레이팅 공정), 플라즈마 CVD 공정, 레이저 CVD 공정, 열적 CVD 공정, 기체 소스 CVD 공정, 코팅 공정, 인쇄 공정 및 수송 공정이 채택될 수 있다.
- <450> <애노드>
- <451> 일반적으로, 애노드는 유기층에 정공을 공급하기 위한 전극으로서의 기능을 가질 수 있다. 애노드는 이의 형상, 구조 및 크기 등에 대해 특별히 제한되지 않고, 공지된 전극 재료 중에서 발광 소자의 적용 및 목적에 따라 적절히 선택될 수 있다. 앞서 기재된 바와 같이, 애노드는 통상적으로 투명 애노드로서 제공된다.
- <452> 애노드 재료의 적합한 예에는 금속, 합금, 금속 산화물, 전도성 화합물 및 이들의 혼합물이 포함된다. 애노드 재료의 특정 예에는 안티몬, 불소 등으로 도핑된 산화주석 (예를 들어, ATO, FTO 등), 산화주석, 산화아연, 산화인듐, 산화인듐주석 (ITO) 및 산화인듐아연 (IZO) 과 같은 전도성 금속 산화물; 금, 은, 크롬 및 니켈과 같은 금속; 상기 금속 및 전도성 금속 산화물의 혼합물 또는 적층물; 요오드화구리 및 황화구리와 같은 무기 전도성 재료; 폴리아닐린, 폴리티오펜 및 폴리피롤과 같은 유기 전도성 재료; 및 이들과 ITO 와의 적층물이 포함된다. 이 중에서, 전도성 금속 산화물이 바람직하고; 생산성, 고전도성, 투명성 등의 관점에서 ITO 가 특히 바람직하다.
- <453> 애노드는 애노드를 구성하는 재료에 대한 적응성을 고려하면서 예를 들어, 습식 방식 (예를 들어, 인쇄 방식, 코팅 방식 등), 물리적 방식 (예를 들어, 진공 기상 증착 공정, 스퍼터링 공정, 이온 플레이팅 공정 등), 화학적 방식 (예를 들어, CVD 공정, 플라즈마 CVD 공정 등) 등에서 적절히 선택된 방법에 따라 상기 기관 상에서 형성될 수 있다. 예를 들어, ITO 가 애노드의 재료로서 선택되는 경우, 애노드의 형성은 직류 또는 고주파 스퍼터링 공정, 진공 기상 증착 공정, 이온 플레이팅 공정 등에 따라 수행될 수 있다.
- <454> 애노드의 형성 위치는 특별히 제한되지 않고, 발광 소자의 적용 및 목적에 따라 적절히 선택될 수 있지만, 애노드가 기관 상에서 형성되는 것이 바람직하다. 그러한 경우, 애노드는 기관 전체 또는 기관 한 면의 부분에서 형성될 수 있다.
- <455> 애노드를 형성하는 패터닝 (patterning) 은 포토리소그래피와 같은 화학적 에칭에 의해 수행될 수 있거나, 레이저 등과 같은 물리적 에칭에 의해 수행될 수 있다. 또한, 패터닝은 마스크를 중첩시키고 진공 증착 또는 스퍼터링 등을 하여 수행될 수 있거나, 리프트오프 (liftoff) 공정 또는 인쇄 공정에 의해 수행될 수 있다.
- <456> 애노드의 두께는 애노드를 구성하는 재료에 따라 적절히 선택될 수 있고, 명확하게 정의될 수 없다. 애노드의 두께는 통상적으로 약 10 nm 내지 50 μm, 바람직하게는 50 nm 내지 20 μm 이다.
- <457> 애노드의 저항률 값은 바람직하게는 10<sup>3</sup> Ω/□ 이하, 더욱 바람직하게는 10<sup>2</sup> Ω/□ 이하이다. 애노드가 투명한 경우, 애노드는 무색 투명일 수 있거나, 착색 투명일 수 있다. 투명 애노드 측면으로부터 발광을 수집하기 위해, 이의 투과율은 바람직하게는 60 % 이상, 더욱 바람직하게는 70 % 이상이다.
- <458> 투명 애노드는 [New Developments of Transparent Conductive Films, supervised by Yutaka Sawada (published by CMC Publishing Co., Ltd., 1999)] 에 상세히 기재되어 있고, 거기에 기재된 것은 본 발명에 적용될 수 있다. 내열성이 낮은 플라스틱 기재 재료를 사용하는 경우, ITO 또는 IZO 를 사용하고 150 °C 이하의 저온에서 이를 제조하여 수득된 투명 애노드가 바람직하다.
- <459> <캐소드>

- <460> 일반적으로, 캐소드는 유기층에 전자를 주입하는 전극으로서의 기능을 가질 수 있다. 캐소드는 이의 형상, 구조 및 크기 등에 대해 특별히 제한되지 않고, 공지된 전극 재료 중에서 발광 소자의 적용 및 목적에 따라 적절히 선택될 수 있다.
- <461> 캐소드를 구성하는 재료의 예에는 금속, 합금, 금속 산화물, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물이 포함된다. 캐소드 재료의 특정 예에는 알칼리금속 (예를 들어, Li, Na, K, Cs 등), 알칼리토금속 (예를 들어, Mg, Ca 등), 금, 은, 납, 알루미늄, 나트륨-칼륨 합금, 리튬-알루미늄 합금, 마그네슘-은 합금, 인듐, 및 이테르븀과 같은 희토류 금속이 포함된다. 이러한 재료가 단독으로 사용될 수 있지만, 두 종류 이상의 재료는 안정성 및 전자 주입 특성을 양립할 수 있다는 관점에서 공동으로 적합하게 사용될 수 있다.
- <462> 이 중에서, 전자 주입 특성의 관점에서는 알칼리금속 및 알칼리토금속이 캐소드를 구성하는 재료로서 바람직하고; 우수한 저장 안정성의 관점에서는 알루미늄으로 주로 구성된 재료가 바람직하다.
- <463> 본원에서 언급된 바와 같은 알루미늄으로 주로 구성된 재료는 알루미늄 단독, 또는 0.01 내지 10 질량%의 알칼리금속 또는 알칼리토금속 또는 이들의 혼합물과 알루미늄의 합금 (예를 들어, 리튬-알루미늄 합금, 마그네슘-알루미늄 합금 등) 을 나타낸다.
- <464> 캐소드의 재료는 JP-A-2-15595 및 JP-A-5-121172 에 상세히 개시되어 있고, 상기 특허 문헌에 개시된 재료는 또한 본 발명에 적용될 수 있다.
- <465> 캐소드를 형성하는 방법은 특별히 제한되지 않고, 캐소드의 형성은 공지된 방법에 따라 수행될 수 있다. 캐소드는 캐소드를 구성하는 재료에 대한 적응성을 고려하면서, 예를 들어, 습식 방식 (예를 들어, 인쇄 방식, 코팅 방식 등), 물리적 방식 (예를 들어, 진공 기상 증착 공정, 스퍼터링 공정, 이온 플레이팅 공정 등), 화학적 방식 (예를 들어, CVD 공정, 플라즈마 CVD 공정 등) 등에서 적절히 선택된 방법에 따라 형성될 수 있다. 예를 들어, 금속 등이 캐소드의 재료로서 선택되는 경우, 캐소드는 하나 또는 두 종류 이상의 동시 또는 순차적 스퍼터링 공정에 의해 형성될 수 있다.
- <466> 캐소드를 형성하는 패터닝은 포토리소그래피와 같은 화학적 에칭에 의해 수행될 수 있거나, 레이저 등을 이용하는 물리적 에칭에 의해 수행될 수 있다. 또한, 패터닝은 마스크를 중첩시키고 진공 기상 증착 또는 스퍼터링 등을 하여 수행될 수 있거나, 리프트오프 공정 또는 인쇄 공정에 의해 수행될 수 있다.
- <467> 캐소드의 형성 위치는 특별히 제한되지 않는다. 캐소드는 유기층 전체 또는 일부에서 형성될 수 있다.
- <468> 또한, 알칼리금속 또는 알칼리토금속 등의 불화물 또는 산화물로 제조된 유전체 층은 캐소드와 유기층 사이에 0.1 내지 5 nm 의 두께로 삽입될 수 있다. 상기 유전체 층은 또한 전자 주입층의 일종으로 고려될 수 있다. 유전체 층은 예를 들어 진공 기상 증착 공정, 스퍼터링 공정, 이온 플레이팅 공정 등에 의해 형성될 수 있다.
- <469> 캐소드의 두께는 캐소드를 구성하는 재료에 따라 적절히 선택될 수 있고, 명확하게 정의될 수 없다. 캐소드의 두께는 통상적으로 약 10 nm 내지 5  $\mu\text{m}$ , 바람직하게는 50 nm 내지 1  $\mu\text{m}$  이다.
- <470> 또한, 캐소드는 투명할 수 있거나 불투명할 수 있다. 투명 캐소드는 1 내지 10 nm 의 두께로 캐소드의 재료를 얇게 제조하고 ITO 및 IZO 와 같은 투명 전도성 재료를 추가로 적층시켜 형성될 수 있다.
- <471> 소자의 특성에 관하여, 애노드 및 캐소드 중 하나 이상이 투명 또는 반투명인 것이 바람직하다.
- <472> <기관>
- <473> 전극 및 유기층은 기관 상에서 제조될 수 있다.
- <474> 기관이 유기층으로부터 방출된 광을 확산시키거나 퇴화시키지 않는 기관인 것이 바람직하다. 이의 특정 예에는 이트리아-안정화된 지르코니아 (YSZ) 및 유리와 같은 무기 재료; 폴리에틸렌 테레프탈레이트, 폴리부틸렌 프탈레이트 및 폴리에틸렌 나프탈레이트와 같은 폴리에스테르; 및 폴리스티렌, 폴리카르보네이트, 폴리에테르술폰, 폴리아릴레이트, 폴리이미드, 폴리시클로올레핀, 노르보르넨 수지 및 폴리(클로로트리플루오로에틸렌)과 같은 유기 재료가 포함된다.
- <475> 예를 들어, 유리가 기관으로서 사용되는 경우, 재료의 품질에 대해, 유리로부터 용출된 이온을 감소시키기 위해, 비알칼리 유리를 사용하는 것이 바람직하다. 또한, 소다석회유리를 사용하는 경우, 실리카 등을 이용한 배리어 (barrier) 코팅이 적용되는 유리를 사용하는 것이 바람직하다. 유기 재료의 경우, 유기 재료가

내열성, 치수 안정성, 내용매성, 전기 절연 특성 및 가공성에서 우수한 것이 바람직하다.

<476> 기관은 이의 형상, 구조 및 크기 등에 대해 특별히 제한되지 않고, 발광 소자의 적용 및 목적 등에 따라 적절히 선택될 수 있다. 일반적으로, 기관의 형상은 바람직하게는 판상이다. 기관의 구조는 단층 구조일 수 있거나 적층 구조일 수 있다. 또한, 기관은 단일 성분으로 형성될 수 있거나 2 이상의 성분으로 형성될 수 있다.

<477> 기관이 무색 투명일 수 있거나 착색 투명일 수 있지만, 유기 발광층으로부터 방출되는 광이 확산되거나 퇴화되지 않는다는 관점에서 무색 투명한 것이 바람직하다.

<478> 기관은 전면 또는 후면 상에서 수분 침투 방지층 (기체 배리어 층) 으로 제공될 수 있다.

<479> 수분 침투 방지층 (기체 배리어 층) 의 재료로서, 질화규소 및 산화규소와 같은 무기 재료가 적합하게 사용된다. 수분 침투 방지층 (기체 배리어 층) 은 예를 들어 고주파 스퍼터링 공정 등에 의해 형성될 수 있다. 열가소성 기관을 사용하는 경우, 원하는 경우, 하드 코트층, 언더코트 층 등을 추가로 제공할 수 있다.

<480> <밀폐 용기>

<481> 본 발명의 유기 EL 소자는 밀폐 용기를 사용하여 소자 전체를 밀폐시킴으로써 제조된 소자일 수 있다. 수분 흡수제 또는 비활성 액체는 밀폐 용기와 소자 사이의 공간에 충전될 수 있다. 수분 흡수제는 특별히 제한되지 않지만, 이의 예에는 산화바륨, 산화나트륨, 산화칼륨, 산화칼슘, 황산나트륨, 황산칼슘, 황산마그네슘, 5산화인, 염화칼슘, 염화마그네슘, 염화구리, 불화세슘, 불화니오븀, 브롬화칼슘, 브롬화바나듐, 분자체, 제올라이트 및 산화마그네슘이 포함된다. 비활성 액체는 특별히 제한되지 않지만, 이의 예에는 파라핀, 액체 파라핀, 퍼플루오로알칸, 퍼플루오로아민 및 퍼플루오로에테르와 같은 불소계 용매, 염화계 용매 및 실리콘 오일이 포함된다.

<482> <구동 방법>

<483> 본 발명의 유기 EL 소자에 따르면, 발광은 직류의 전압 (임의로 교류 성분을 함유함) (통상적으로 2 볼트 내지 15 볼트) 또는 애노드와 캐소드 간의 직류의 전류를 적용함으로써 획득될 수 있다.

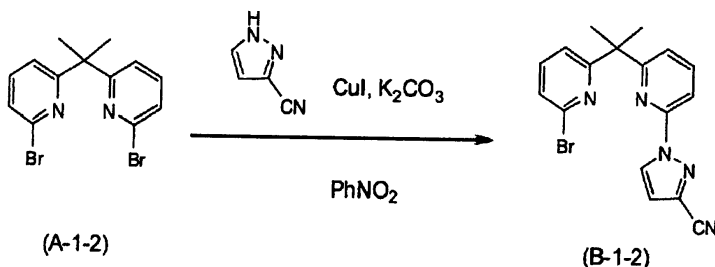
<484> 본 발명의 유기 EL 소자의 구동 방법에 대해, JP-A-2-148687, JP-A-6-301355, JP-A-5-29080, JP-A-7-134558, JP-A-8-234685, JP-A-8-241047, 일본 특허 제 2784615 호 및 미국 특허 제 5,828,429 호 및 제 6,023,308 호에 개시되어 있는 구동 방법이 적용될 수 있다.

<485> 본 발명의 소자는 디스플레이 소자, 디스플레이, 백라이트, 전자사진, 조명 광원, 녹음 광원, 노출 광원, 기록 광원, 마커, 간판, 인테리어, 광통신 등에 적합하게 이용될 수 있다.

<486> [실시예]

<487> 본 발명은 이하에 하기 실시예에 대해 상세히 기재하고 있으나, 본 발명이 이에 제한되는 것으로 해석되어서는 안된다.

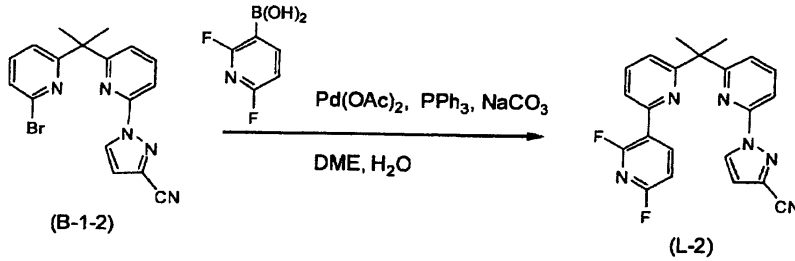
<488> <화합물 B-1-2 의 합성>



<489> <490> 화합물 A-1-2 (14.24 g, 40.0 mmol), 3-시아노피라졸 (1.86 g, 20.0 mmol), 요오드화구리 (0.38 g, 2.0 mmol), 탄산칼륨 (8.29 g, 30.0 mmol) 및 니트로벤젠 (80 mL) 을 질소 분위기 하에서 3-목 플라스크에 충전하고, 혼합물을 6 시간 동안 교반하면서 가열 환류하였다. 니트로벤젠을 진공에서 증류 제거한 후, 물을 첨가하고; 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하며; 수득된 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 농축하였다. 수득된 잔류물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 2.60 g 의 화합물 B-1-2 를 수득하였다.

<491>  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300 MHz)  $\delta$ : 1.84 (s, 6H), 6.82 (s, 1H), 7.12 (d,  $J = 4.5$  Hz, 1H), 7.20 (d,  $J = 3.0$  Hz, 1H), 7.31 (d,  $J = 4.5$  Hz, 1H), 7.44 (t,  $J = 9.0$  Hz, 1H), 7.77 (d,  $J = 4.0$  Hz, 1H), 7.82 (t,  $J = 9.6$  Hz, 1H), 8.56 (s, 1H)

<492> <화합물 L-2 의 합성>

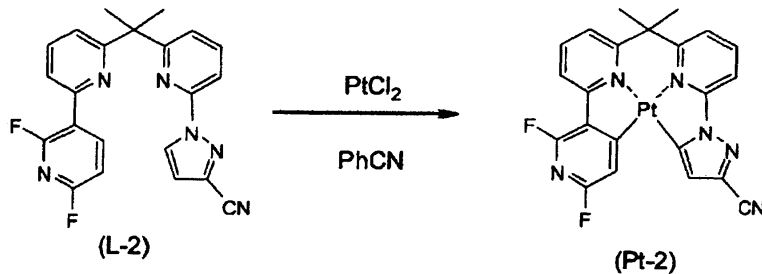


<493>

<494> 수득된 화합물 B-1-2 (1.84 g, 5.0 mmol), 2,6-디플루오로피리디닐-3-보론산 (0.93 g, 6.0 mmol), 팔라듐 아세테이트 (28 mg, 0.125 mmol), 트리페닐포스핀 (0.13 g, 0.5 mmol), 탄산나트륨 (2.65 g, 25 mmol), 1,2-디메톡시에탄 (25 mL) 및 물 (25 mL) 을 질소 분위기 하에서 3-목 플라스크에 충전하고, 혼합물을 4 시간 30 분 동안 교반하면서 가열 환류하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 물을 첨가하고; 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하며; 수득된 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 농축하였다. 수득된 잔류물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.91 g 의 화합물 L-2 를 수득하였다.

<495>  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{DMSO-d}_6$ , 300 MHz)  $\delta$ : 1.88 (s, 6H), 7.26 (s, 1H), 7.32 (d,  $J = 4.5$  Hz, 1H), 7.39 (d,  $J = 4.5$  Hz, 1H), 7.43 (d,  $J = 6.0$  Hz, 1H), 7.72 (d,  $J = 3.0$  Hz, 1H), 7.81 (d,  $J = 6.0$  Hz, 1H), 7.89 (t,  $J = 6.0$  Hz, 1H), 8.00 (t,  $J = 9.0$  Hz, 1H), 8.67 (dd,  $J = 6.0, 4.5$  Hz, 1H), 8.81 (s, 1H)

<496> <예시 화합물 Pt-2 의 합성>

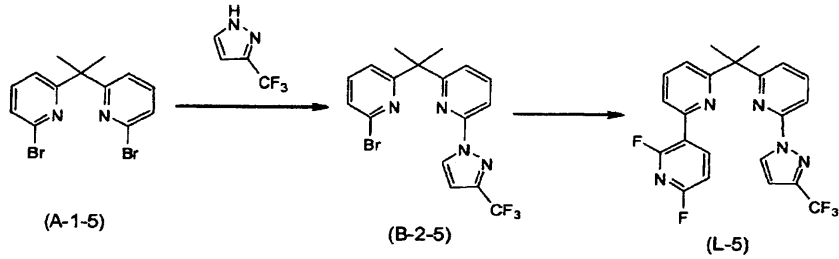


<497>

<498> 화합물 L-2 (1.60 g, 4.0 mmol), 염화플래티늄(II) (1.07 g, 4.0 mmol) 및 벤조니트릴 (50 mL) 을 질소 분위기 하에서 플라스크에 충전하고, 혼합물을 3 시간 동안 교반하면서 180 °C에서 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 용매를 농축하고, 침전된 결정을 여과하여 1.27 g (수율: 53 %) 의 예시 화합물 Pt-2 를 황색 결정으로서 수득하였다.

<499>  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300 MHz)  $\delta$ : 2.06 (s, 6H), 6.83 (s,  $J_{\text{Pt-H}} = 6.0$  Hz, 1H), 7.41 (dd,  $J = 0.91, 1.2$  Hz,  $J_{\text{Pt-H}} = 28$  Hz, 1H), 7.58 (d,  $J = 3.9$  Hz, 1H), 7.63 (d,  $J = 3.9$  Hz, 1H), 7.89 (d,  $J = 4.5$  Hz, 1H), 8.00 (t,  $J = 9.0$  Hz, 1H), 8.07 (t,  $J = 9.0$  Hz, 1H), 8.13 (d,  $J = 4.5$  Hz, 1H)

<500> <화합물 L-5 의 합성>



<501>

<502>

화합물 A-1-5 (10.0 g, 28.09 mmol), 3-트리플루오로메틸피라졸 (1.91 g, 14.05 mmol), 요오드화구리 (0.267 g, 1.40 mmol), 탄산칼륨 (5.82 g, 42.1 mmol) 및 부티로니트릴 (200 mL) 을 질소 분위기 하에서 3-목 플라스크에 충전하고, 혼합물을 7 시간 30 분 동안 교반하면서 가열 환류하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 물을 첨가하고; 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하며; 수득된 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 농축하였다. 수득된 생성물의 절반은 후속 반응에 그 자체로 사용했다.

<503>

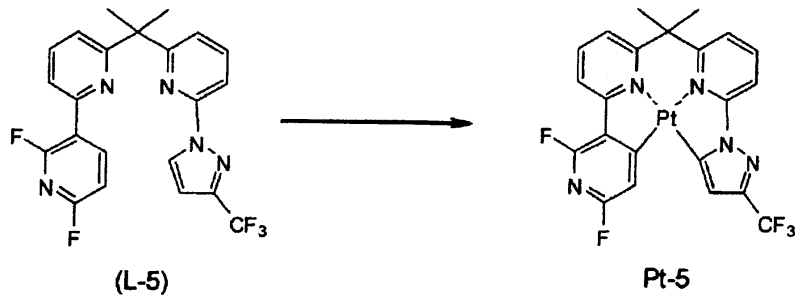
5.0 g 의 수득된 생성물, 2,6-디플루오로피리딘-3-보론산 (5.00 g, 31.5 mmol), 팔라듐 아세테이트 (137 mg, 0.608 mmol), 트리페닐포스핀 (0.638 g, 2.43 mmol), 탄산나트륨 (12.9 g, 121.6 mmol), 1,2-디메톡시에탄 (150 mL) 및 물 (200 mL) 을 질소 분위기 하에서 3-목 플라스크에 충전하고, 혼합물을 4 시간 30 분 동안 교반하면서 가열 환류하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 물을 첨가하고; 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하며; 수득된 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 농축하였다. 수득된 잔류물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.74 g 의 화합물 L-5 를 수득하였다.

<504>

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 300 MHz) δ : 1.89 (s, 6H), 6.67 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.94 (dd, J = 3, 8.4 Hz, 1H), 7.15 내지 7.25 (m, 2H), 7.60 내지 7.90 (m, 4H), 8.50 내지 8.59 (m, 1H), 8.69 (dt, J = 8.1, 9.6 Hz, 1H)

<505>

<예시 화합물 Pt-5 의 합성>



<506>

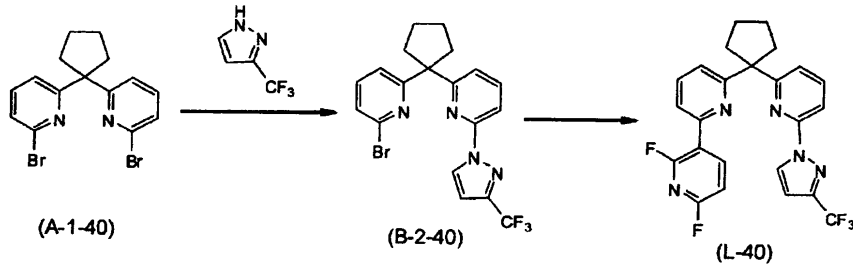
<507>

화합물 L-5 (1.70 g, 3.82 mmol), 염화플래티늄(II) (1.02 g, 3.82 mmol) 및 벤조니트릴 (50 mL) 을 질소 분위기 하에서 플라스크에 충전하고, 혼합물을 3 시간 동안 교반하면서 180 °C에서 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 용매를 농축하고, 침전된 결정을 여과하여 1.84 g (수율: 75 %) 의 예시 화합물 Pt-5 를 황색 결정으로서 수득하였다.

<508>

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 300 MHz) δ : 2.05 (s, 6H), 6.72 (s, J<sub>Pt-H</sub> = 12 Hz, 1H), 7.45 (s, J<sub>Pt-H</sub> = 60 Hz, 1H), 7.52 (dd, J = 0.6, 7.2 Hz, 1H), 7.62 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.89 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.95 내지 8.20 (m, 3H)

<509> <화합물 L-40 의 합성>



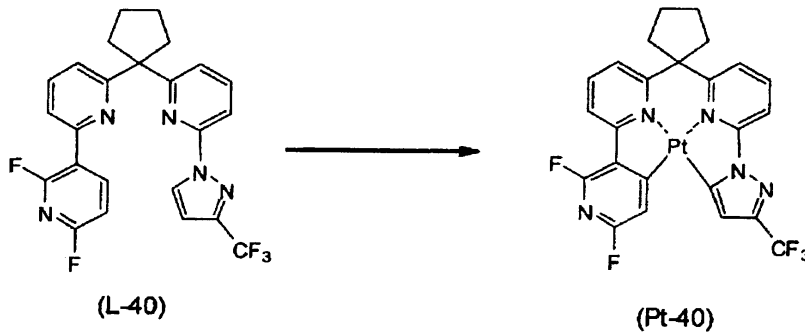
<510>

<511> 화합물 A-1-40 (5.00 g, 13.00 mmol), 3-트리플루오로메틸피리다졸 (0.88 g, 6.5 mmol), 요오드화구리 (0.124 g, 0.65 mmol), 탄산칼륨 (2.70 g, 20 mmol) 및 부티로니트릴 (100 mL) 을 질소 분위기 하에서 3-목 플라스크에 충전하고, 혼합물을 7 시간 30 분 동안 교반하면서 가열 환류하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 물을 첨가하고; 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하며; 수득된 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 농축하였다. 수득된 생성물을 후속 반응에 그 자체로 사용하였다.

<512> 2.7 g 의 수득된 생성물, 2,6-디플루오로피리딘-3-보론산 (1.47 g, 9.3 mmol), 팔라듐 아세테이트 (69 mg, 0.3 mmol), 트리페닐포스핀 (0.33 g, 1.2 mmol), 탄산나트륨 (3.29 g, 31 mmol), 1,2-디메톡시에탄 (75 mL) 및 물 (100 mL) 을 질소 분위기 하에서 3-목 플라스크에 충전하고, 혼합물을 4 시간 30 분 동안 교반하면서 가열 환류하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 물을 첨가하고; 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하며; 수득된 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 농축하였다. 수득된 잔류물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.8 g 의 화합물 L-40 을 수득하였다.

<513> <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 300 MHz) δ : 1.79 (m, 4H), 2.64 (m, 4H), 6.70 (d, J = 2.6 Hz, 1H), 6.97 (dd, J = 2.8, 8.2 Hz, 1H), 7.19 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 7.23 (dd, J = 1.3, 7.3 Hz, 1H), 7.67 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.72 (dd, J = 1.5, 8.0 Hz, 1H), 7.73 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 8.77 (dt, J = 8.1, 9.5 Hz, 1H)

<514> <예시 화합물 Pt-40 의 합성>

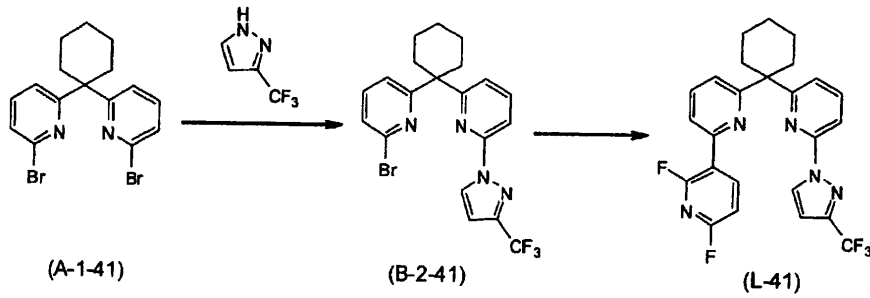


<515>

<516> 화합물 L-40 (1.70 g, 3.6 mmol), 염화플래티늄(II) (0.96 g, 3.6 mmol) 및 벤조니트릴 (50 mL) 을 질소 분위기 하에서 플라스크에 충전하고, 혼합물을 3 시간 동안 교반하면서 180 °C에서 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 용매를 농축하고, 침전된 결정을 여과하여 1.56 g (수율: 65 %) 의 예시 화합물 Pt-40 을 황색 결정으로서 수득하였다.

<517> <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 300 MHz) δ : 1.76 (m, 4H), 2.71 (m, 4H), 6.74 (s, J<sub>Pt-H</sub> = 11.7 Hz, 1H), 7.45 (t, J = 2.2 Hz, J<sub>Pt-H</sub> = 64.0 Hz, 1H), 7.52 (dd, J = 0.6, 7.8 Hz, 1H), 7.60 (dd, J = 1.0, 7.8 Hz, 1H), 7.84 (dd, J = 0.7, 8.2 Hz, 1H), 8.01 (t, J = 8.0 Hz, 1H), 8.06 (t, J = 8.1 Hz, 1H), 8.07 (d, J = 8.0 Hz, 1H)

<518> <화합물 L-41 의 합성>



<519>

<520>

화합물 A-1-41 (4.7 g, 11.9 mmol), 3-트리플루오로메틸피라졸 (0.8 g, 5.9 mmol), 요오드화구리 (113.0 mg, 0.6 mmol), 탄산칼륨 (2.5 g, 17.9 mmol) 및 규정 부티로니트릴 (80.0 mL) 로 이루어진 혼합물을 질소 분위기 하에 115 °C에서 7 시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 여과하고, 농축한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 5.0 g 의 담황색 고체를 수득하였다.

<521>

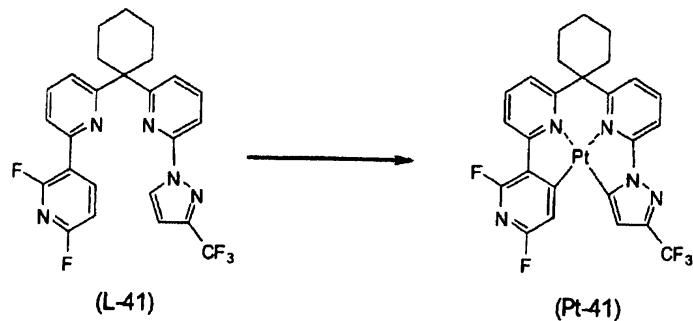
수득된 담황색 고체 (5.0 g), 2,6-디플루오로피리딘-3-보론산 (4.5 g, 28.3 mmol), 팔라듐 아세테이트 (212 mg, 0.94 mmol), 트리페닐포스핀 (991 mg, 3.8 mmol), 탄산나트륨 (9.2 g, 86 mmol), 1,2-디메톡시에탄 (200.0 mL) 및 물 (200.0 mL) 로 이루어진 혼합물을 질소 분위기 하에 80 °C에서 1 시간 반 동안 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 여과한 후 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 집합적으로 건조시킨 후 농축하고, 수득된 잔류물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.0 g 의 화합물 L-41 을 백색 고체로서 수득하였다.

<522>

<sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ: 1.60 내지 1.66 (br, 6H), 2.53 내지 2.60 (br, 4H), 6.69 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 6.97 (dd, J = 3.0, 8.4 Hz, 1H), 7.18 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.23 내지 7.28 (m, 1H), 7.56 내지 7.53 (m, 4H), 8.62 (s, 1H), 8.74 (dt, J = 8.1, 9.6 Hz, 1H)

<523>

<예시 화합물 Pt-41 의 합성>



<524>

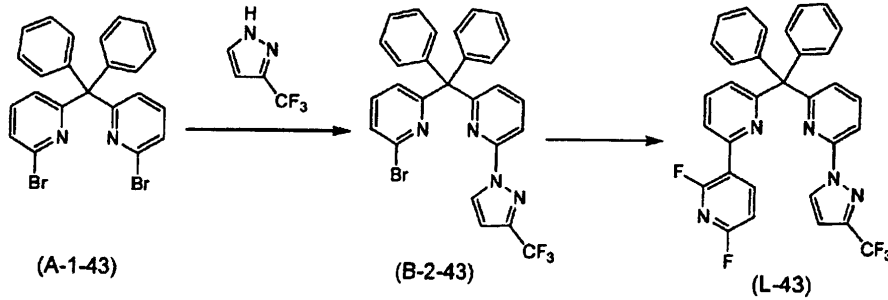
<525>

화합물 L-41 (1.00 g, 2.1 mmol), 염화플래티늄(II) (0.55 g, 2.1 mmol) 및 벤조니트릴 (20 mL) 을 질소 분위기 하에서 플라스크에 충전하고, 혼합물을 8 시간 동안 교반하면서 180 °C에서 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 침전된 결정을 여과하여 0.91 g (수율: 65 %) 의 예시 화합물 Pt-41 을 황색 결정으로서 수득하였다.

<526>

<sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 300 MHz) δ: 1.39 (br, 6H), 2.51 (br, 2H), 2.82 (br, 2H), 6.61 (s, 1H), 7.32 (t, J = 2.1 Hz, J<sub>Pt-H</sub> = 63.6 Hz, 1H), 7.45 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.54 (dd, J = 1.8, 4.5 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.93 내지 8.01 (m, 3H)

<527> <화합물 L-43 의 합성>



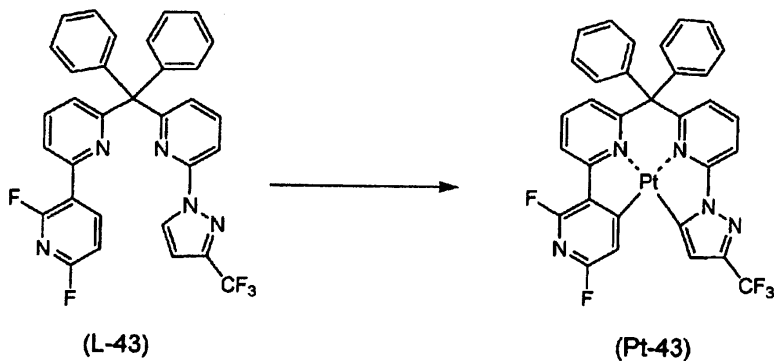
<528>

<529> 화합물 A-1-43 (9.46 g, 19.7 mmol), 3-트리플루오로메틸피라졸 (1.34 g, 9.85 mmol), 요오드화구리 (0.187 g, 0.98 mmol), 탄산칼륨 (4.00 g, 29.55 mmol) 및 부티로니트릴 (50 mL) 을 질소 분위기 하에서 3-목 플라스크에 충전하고, 혼합물을 6 시간 동안 교반하면서 가열 환류하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 물을 첨가하고; 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하며; 수득된 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 농축하였다. 수득된 생성물을 후속 반응에 그 자체로 사용하였다.

<530> 5.85 g 의 수득된 생성물, 2,6-디플루오로피리딘-3-보론산 (3.47 g, 21.85 mmol), 팔라듐 아세테이트 (122 mg, 0.54 mmol), 트리페닐포스핀 (0.571 g, 2.1 mmol), 탄산나트륨 (11.55 g, 109 mmol), 1,2-디메톡시에탄 (100 mL) 및 물 (100 mL) 을 질소 분위기 하에서 3-목 플라스크에 충전하고, 혼합물을 4 시간 30 분 동안 교반하면서 가열 환류하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 물을 첨가하고; 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하며; 수득된 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 농축하였다. 수득된 잔류물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 1.75 g 의 화합물 L-43 을 수득하였다.

<531> <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 300 MHz) δ : 6.58 (d, 1H), 6.80 (dd, 1H), 7.10 내지 7.40 (m, 13H), 7.70 내지 7.90 (m, 3H), 8.15 (d, 1H), 8.40 (dt, 1H)

<532> <예시 화합물 Pt-43 의 합성>

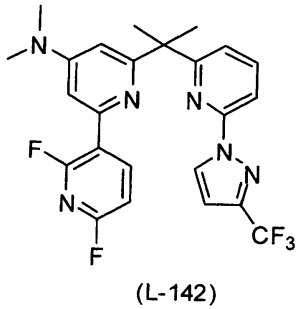


<533>

<534> 화합물 L-43 (1.75 g, 3.07 mmol), 염화플래티늄(II) (0.817 g, 3.07 mmol) 및 벤조니트릴 (20 mL) 을 질소 분위기 하에서 플라스크에 충전하고, 혼합물을 2 시간 동안 교반하면서 180 °C 에서 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 용매를 농축하고, 침전된 결정을 여과하여 1.72 g (수율: 73 %) 의 예시 화합물 Pt-43 을 황색 결정 으로서 수득하였다.

<535> <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 300 MHz) δ : 6.55 (dd, 3H), 6.64 (s, 1H), 6.91 (dd, 1H), 7.03 (dd, 1H), 7.20 내지 7.40 (m, 6H), 7.40 내지 7.52 (m, 1H), 7.57 내지 7.70 (m, 1H), 7.80 내지 8.00 (m, 3H), 8.12 (d, 1H)

<536> <화합물 L-142 의 합성>

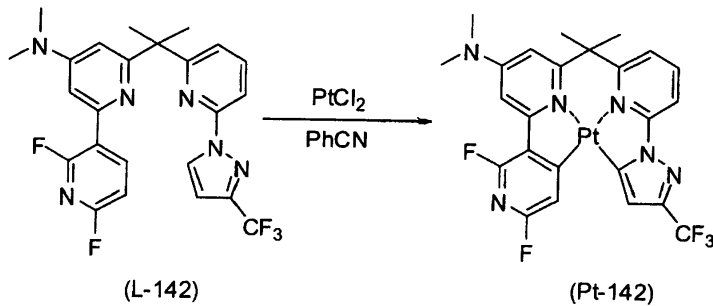


<537>

<538> 화합물 L-142 를 예시 화합물 Pt-5 의 합성과 동일한 방식으로 합성하였다.

<539>  $^1\text{H-NMR}$  (300 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  : 1.88 (s, 6H), 3.04 (s, 6H), 6.41 (s, 1H), 6.72 (s, 1H), 6.90 (d,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 7.04 (s, 1H), 7.18 (d,  $J = 8.9$  Hz, 1H), 7.75 (t,  $J = 7.2$  Hz, 1H), 7.84 (d,  $J = 7.2$  Hz, 1H), 8.63 내지 8.73 (m, 2H)

<540> <예시 화합물 Pt-142 의 합성>

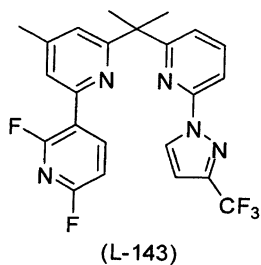


<541>

<542> 염화플래티늄(II) (871 mg, 3.3 mmol) 및 화합물 L-142 (1.6 g, 3.3 mmol) 를 벤조니트릴 (100 mL) 에서 8 시간 동안 질소 분위기 하에 가열에 의한 환류 조건 하에서 교반하였다. 반응 혼합물을 냉각시킨 후, 메탄올을 첨가하고, 침전된 고체를 여과한 후 메탄올로 세정하여, 1.2 g 의 예시 화합물 Pt-142 를 담황색 분말로서 수득하였다. 수율: 54 %

<543>  $^1\text{H-NMR}$  (300 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$  : 1.99 (s, 6H), 3.19 (s, 6H), 6.68 (t,  $J = 6.0$  Hz, 1H), 6.76 (d,  $J = 2.4$  Hz, 1H), 7.25 (t,  $J = 2.4$  Hz, 1H), 7.41 (t,  $J(\text{H-F}) = 2.1$  Hz,  $J(\text{Pt-H}) = 64.2$  Hz, 1H), 7.52 (d,  $J = 7.8$  Hz, 1H), 7.82 (d,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 8.03 (t,  $J = 8.1$  Hz, 1H)

<544> <화합물 L-143 의 합성>

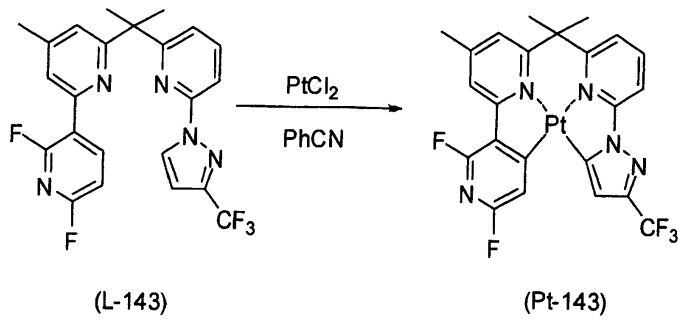


<545>

<546> 화합물 L-143 을 예시 화합물 Pt-5 의 합성과 동일한 방식으로 합성하였다.

<547>  $^1\text{H-NMR}$  (300 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  : 1.87 (s, 6H), 2.37 (s, 3H), 6.67 (d,  $J = 2.4$  Hz, 1H), 6.92 (dd,  $J = 1.8$ , 8.4 Hz, 1H), 7.00 (s, 1H), 7.16 (t,  $J = 7.2$  Hz, 1H), 7.56 (s, 1H), 7.75 (t,  $J = 7.8$  Hz, 1H), 7.85 (d,  $J = 7.5$  Hz, 1H), 8.59 (s, 1H), 8.68 (dd,  $J = 8.4$ , 17.1 Hz, 1H)

<548> <예시 화합물 Pt-143 의 합성>

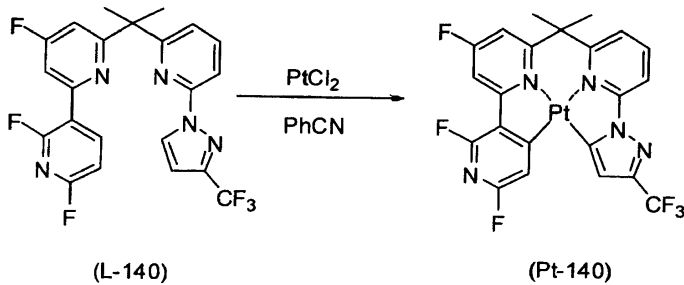


<549>

<550> 염화플래티늄(II) (266 mg, 1.0 mmol, 1.05 당량) 및 화합물 L-143 (400 mg, 0.95 mmol, 1.0 당량) 을 벤조니트릴 (4 mL) 에서 4 시간 동안 질소 분위기 하에 가열에 의한 환류 조건 하에서 교반하였다. 반응 혼합물을 냉각시킨 후, 메탄올을 첨가하고, 침전된 고체를 여과한 후 메탄올로 세정하여, 380 mg 의 예시 화합물 Pt-143 을 담황색 분말로서 수득하였다. 수율: 65 %

<551>  $^1\text{H-NMR}$  (300 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 2.05 (s, 6H), 2.56 (s, 3H), 6.74 (t,  $J = 6.0$  Hz, 1H), 7.46 (t,  $J(\text{H-F}) = 2.4$  Hz,  $J(\text{Pt-H}) = 64.2$  Hz, 1H), 7.51 (s, 1H), 7.59 (d,  $J = 7.2$  Hz, 1H), 7.87 (d,  $J = 7.5$  Hz, 1H), 7.95 (s, 1H), 8.09 (t,  $J = 8.1$  Hz, 1H)

<552> <예시 화합물 Pt-140 의 합성>



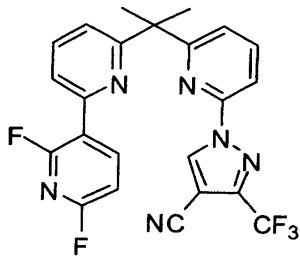
<553>

<554> 염화플래티늄(II) (980 mg, 3.7 mmol) 및 화합물 L-140 (1.72 g, 3.7 mmol) 을 벤조니트릴 (80 mL) 에서 18 시간 동안 질소 분위기 하에 가열에 의한 환류 조건 하에서 교반하였다. 반응 혼합물을 냉각시킨 후, 메탄올을 첨가하고, 침전된 고체를 여과한 후 메탄올로 세정하여, 1.22 g 의 예시 화합물 Pt-140 을 담황색 분말로서 수득하였다. 수율: 50 %

<555>  $^1\text{H-NMR}$  (300 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 2.06 (s, 6H), 7.35 내지 7.52 (m, 2H), 7.60 (dd,  $J = 0.6, 7.8$  Hz, 1H), 7.82 내지 7.94 (m, 2H), 8.12 (t,  $J = 8.1$  Hz, 1H)

<556> <화합물 L-11 의 합성>

<557> 화합물 L-11 을, 화학식 (A"-1) 로 나타내는 화합물 (식 중,  $\text{R}^{41}$ ,  $\text{R}^{42}$ ,  $\text{R}^{43}$ ,  $\text{R}^{44}$ ,  $\text{R}^{45}$  및  $\text{R}^{46}$  각각은 수소 원자이고, R 은 메틸기임) 을 사용하고 예시 화합물 Pt-5 등의 합성에서 사용된 반응 조건을 사용함으로써 이를 4-시아노-3-트리플루오로메틸피라졸 및 2,6-디플루오로피리딘-3-보론산과 반응시켜 합성할 수 있다.

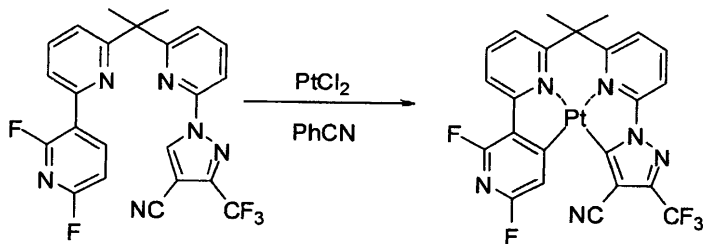


(L-11)

<558>

<559>  $^1\text{H-NMR}$  (300 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 1.94 (s, 6H), 6.99 (ddd,  $J = 0.9, 3.0, 8.4$  Hz, 1H), 7.36 (ddd,  $J = 1.5, 6.9, 15$  Hz, 2H), 7.70 내지 8.00 (m, 4H), 8.65 (dt,  $J = 8.1, 9.6$  Hz, 1H), 9.04 (d,  $J = 0.9$  Hz, 1H)

<560> <예시 화합물 Pt-11 의 합성>



(L-11)

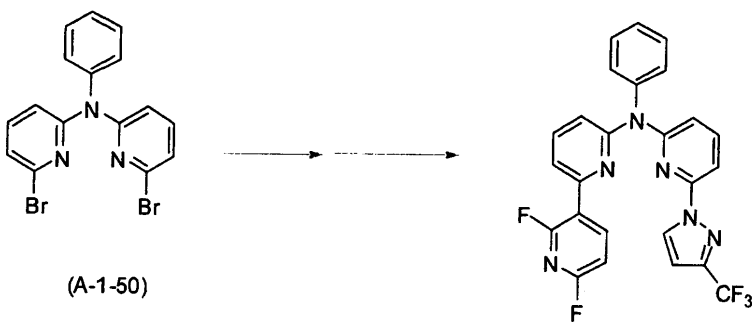
(Pt-11)

<561>

<562> 염화플래티늄(II) (791 mg, 2.98 mmol) 및 화합물 L-11 (1.4 g, 2.98 mmol) 을 벤조니트릴 (50 mL) 에서 3 시간 동안 질소 분위기 하에 가열에 의한 환류 조건 하에서 교반하였다. 반응 혼합물을 냉각시킨 후, 메탄올을 첨가하고, 침전된 고체를 여과한 후 메탄올로 세정하여, 1.49 g 의 예시 화합물 Pt-11 을 담황색 분말로서 수득하였다. 수율: 75 %

<563>  $^1\text{H-NMR}$  (300 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 2.10 (s, 6H), 7.63 내지 7.72 (m, 2H), 7.95 (dd,  $J = 0.6, 8.1$  Hz, 1H), 8.07 (t,  $J = 8.1$  Hz, 1H), 8.12 내지 8.23 (m, 2H), 8.31 (t,  $J(\text{H-F}) = 1.5$  Hz,  $J(\text{Pt-H}) = 63.0$  Hz, 1H)

<564> <화합물 L-50 의 합성>



(A-1-50)

(L-50)

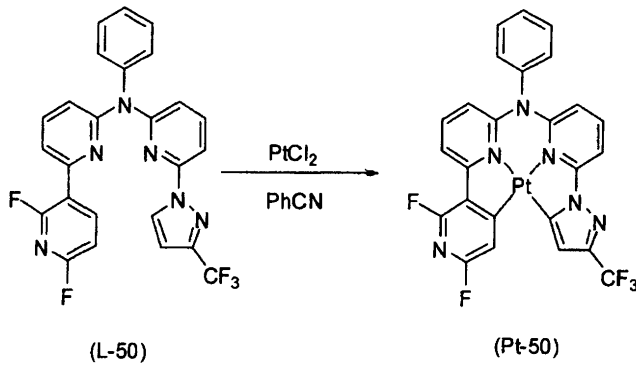
<565>

<566> 화합물 A-1-50 을 [Syn. Lett., 2, 263 (2005)] 등에 기재된 방법을 이용하여 합성할 수 있다.

<567> 화합물 L-50 을 예시 화합물 Pt-5 의 합성과 동일한 방식으로 합성할 수 있다.

<568>  $^1\text{H-NMR}$  (300 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$ : 6.56 (d,  $J = 2.7$  Hz, 1H), 6.82 (ddd,  $J = 0.6, 3.0, 8.4$  Hz, 1H), 7.01 (d,  $J = 8.4$  Hz, 1H), 7.10 (d,  $J = 8.4$  Hz, 1H), 7.25 내지 7.37 (m, 3H), 7.46 (t,  $J = 7.5$  Hz, 2H), 7.56 내지 7.63 (m, 2H), 7.71 (dt,  $J = 1.5, 8.1$  Hz, 2H), 8.11 (dd,  $J = 0.9, 2.7$  Hz, 1H), 8.32 (dt,  $J = 7.8, 8.1$  Hz, 1H)

<569> <예시 화합물 Pt-50 의 합성>



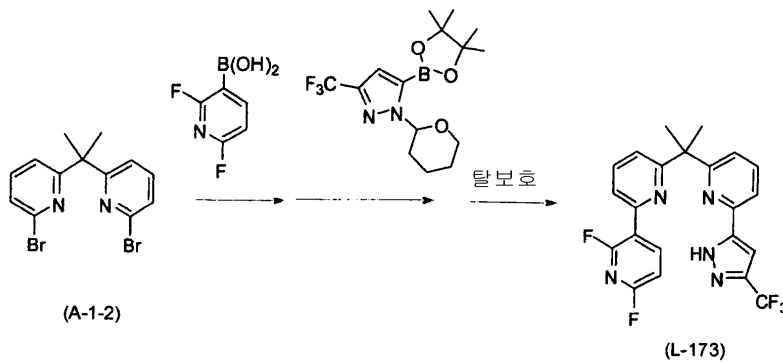
<570>

<571>

염화플래티늄(II) (45 mg, 0.172 mmol) 및 화합물 L-50 (85 mg, 0.172 mmol) 을 벤조니트릴 (5 mL) 에서 3 시간 동안 질소 분위기 하에 가열에 의한 환류 조건 하에서 교반하였다. 반응 혼합물을 냉각시킨 후, 메탄올을 첨가하고, 침전된 고체를 여과한 후 메탄올로 세정하여, 93 mg 의 예시 화합물 Pt-50 을 담황색 분말로서 수득하였다. 수율: 79 %

<572>

<sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ : 6.45 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 6.64 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 6.75 (s, 1H), 7.46 내지 7.56 (m, 3H), 7.66 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.75 내지 7.90 (m, 6H)



<573>

<574>

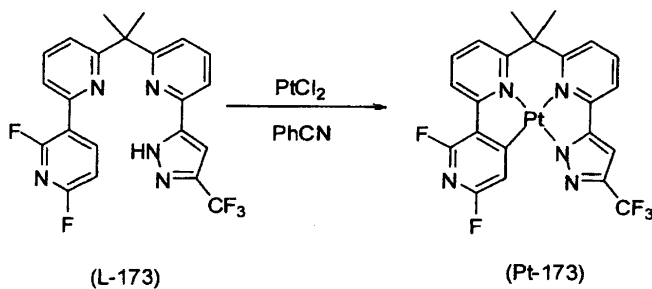
화합물 L-173 을, 화합물 A-1-2 와 보론 에스테르를 서로 반응시킨 후 질소 상의 보호기를 탈보호시켜 합성할 수 있다.

<575>

<sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ : 1.85 (s, 6H), 6.85 (dd, J = 0.9, 3.0 Hz, 1H), 6.88 (s, 1H), 7.21 (dt, J = 0.9, 7.8 Hz, 2H), 7.43 (dd, J = 0.9, 7.8 Hz, 1H), 7.60 내지 7.72 (m, 3H), 8.55 (dt, J = 9.6, 10.8 Hz, 1H), 11.7 (brs, 1H)

<576>

<예시 화합물 Pt-173 의 합성>



<577>

<578>

염화플래티늄(II) (537 mg, 2.02 mmol) 및 화합물 L-173 (900 mg, 2.02 mmol) 을 벤조니트릴 (50 mL) 에서 3 시간 동안 질소 분위기 하에 가열에 의한 환류 조건 하에서 교반하였다. 반응 혼합물을 냉각시킨 후, 메탄

올을 첨가하고, 침전된 고체를 여과한 후 메탄올로 세정하여, 1.06 g 의 예시 화합물 Pt-173 을 담황색 분말로 수득하였다. 수율: 82 %

<579> <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ : 2.07 (s, 6H), 6.97 (s, 1H), 7.60 내지 7.67 (m, 2H), 7.71 (dd, J = 0.9, 8.1 Hz), 7.90 내지 8.08 (m, 3H), 8.17 (t, J = 2.1 Hz, J (Pt-H) = 46.8 Hz, 1H)

<580> <유기 EL 소자의 평가>

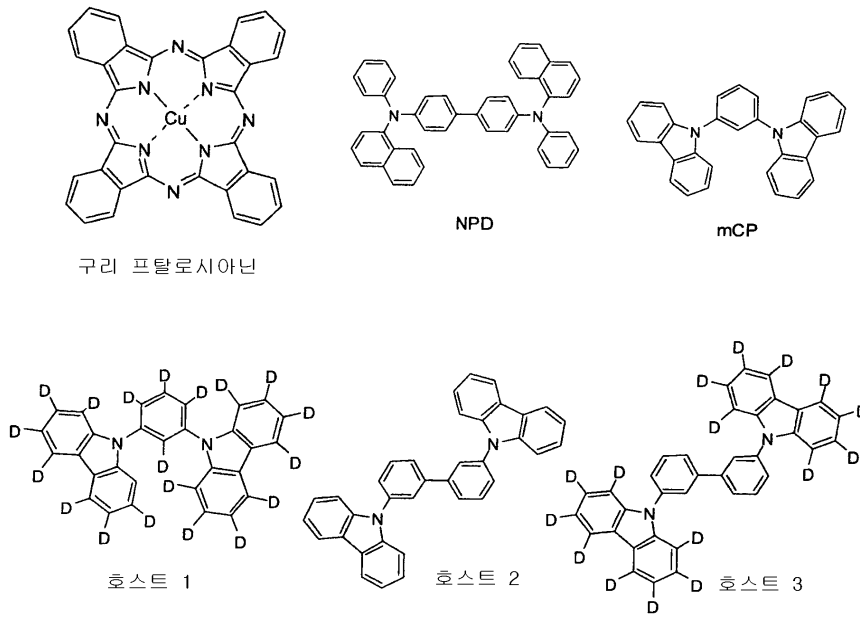
<581> 세정된 ITO 기판을 기상 증착 장치에 놓고; 구리 프탈로시아닌을 10 nm 의 두께로 이 위에 기상 증착시키며; NPD ((N,N'-디-α-나프틸-N,N'-디페닐)-벤지딘) 을 40 nm 의 두께로 이 위에 추가로 기상 증착시켰다. 호스트 재료 및 발광 재료를 40 nm 의 두께로 85/15 의 비율 (질량비) 에서 이 위에 기상 증착시키고; Alq 를 10 nm 의 두께로 이 위에 추가로 기상 증착시킨 후; Alq 를 30 nm 의 두께로 이 위에 추가로 기상 증착시켰다. 3 nm 의 두께로 불화리튬을 이 위에 기상 증착한 후, 알루미늄을 60 nm 의 두께로 기상 증착하여, 유기 EL 소자를 제조하였다. 상기 유기 EL 소자를 Toyo Corporation 사제 소스 측정 유닛 MODEL 2400 를 사용하여 직류 일정 전압의 적용 시 발광에 적용하였다. 그 결과, 발광 재료로부터 유래된 발광을 수득하였다. 더욱이, 360 cd/m<sup>2</sup> (발광 면적: 4 mm<sup>2</sup>) 의 휘도 조건 하에서 그리고 1,000 cd/cm<sup>2</sup> (발광 면적: 4 mm<sup>2</sup>) 의 고휘도 조건 하에서 구동하는 소자의 휘도 반감기 (half-time) 를 각각 측정하였다. 실시예 8 및 9 각각에서, 중수소화된 Alq (D-Alq) 를 Alq 대신에 사용하여 동일한 소자를 제조하였다. 수득된 결과를 표 2 에 나타낸다.

<582> [표 2]

발광 소자	발광층에 사용된 호스트 재료	발광층에 사용된 발광 재료	휘도 반감기 (개시: 360 cd/m <sup>2</sup> )	휘도 반감기 (개시: 1,000 cd/m <sup>2</sup> )
비교예 1	mCP	화합물 I	810	176
비교예 2	mCP	화합물 II	750	162
실시예 1	mCP	Pt-2	850	230
실시예 2	mCP	Pt-5	890	230
실시예 3	mCP	Pt-40	850	220
실시예 4	mCP	Pt-41	850	230
실시예 5	mCP	Pt-43	972	246
실시예 6	Host 1	Pt-5	1053	300
실시예 7	Host 2	Pt-5	970	246
실시예 8	mCP	Pt-5	930	246
실시예 9	Host 1	Pt-5	1134	316
실시예 10	mCP	Pt-11	900	240
실시예 11	mCP	Pt-50	850	235
실시예 12	mCP	Pt-140	950	250
실시예 13	mCP	Pt-142	850	220
실시예 14	mCP	Pt-143	910	260
실시예 15	mCP	Pt-173	850	240
실시예 16	호스트 1	Pt-11	1100	310
실시예 17	호스트 1	Pt-140	1170	330
실시예 18	호스트 1	Pt-143	1200	340
실시예 19	호스트 2	Pt-11	1010	250
실시예 20	호스트 2	Pt-140	1080	260
실시예 21	호스트 2	Pt-143	1100	270
실시예 22	호스트 3	Pt-5	1155	320
실시예 23	호스트 3	Pt-11	1200	325
실시예 24	호스트 3	Pt-140	1270	338
실시예 25	호스트 3	Pt-143	1300	350

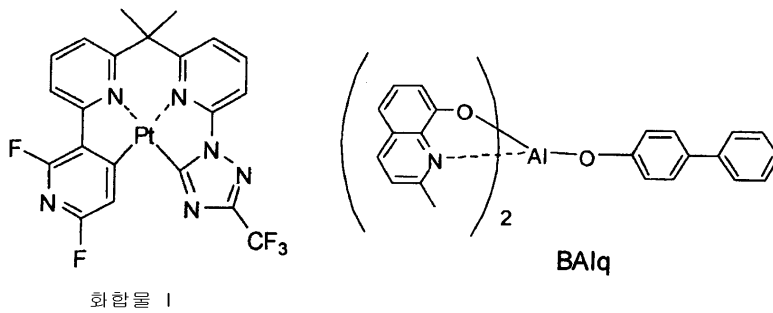
<583>

<584> 상기 실시예에서 사용된 화합물 각각의 화학적 구조를 하기에 나타낸다.



<585>

<586> 화합물 130 은 JP-A-2006-261623 에 개시되어 있음

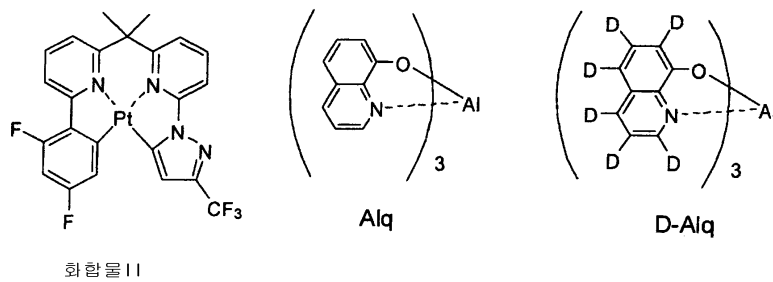


<587>

<588> 화합물 176 은 JP-A-2006-261623 에 개시되어 있음

<589> 본 발명에 따른 상기 실시예로부터, 특히 고휘도에서 내구성이 우수한 유기 전계발광 소자가 수득된다는 것이 명백해졌다.

<590> 외국 우선권의 이점을 본 명세서에서 청구하는 외국 특허 출원 모두의 전체 명세서는, 충분히 설명한 바와 같이, 본원에 참고로서 포함된다.



专利名称(译)	有机电致发光器件，新型铂络合物化合物和可以是其配体的新化合物		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020090111779A</a>	公开(公告)日	2009-10-27
申请号	KR1020090034194	申请日	2009-04-20
[标]申请(专利权)人(译)	UDC爱尔兰有限公司		
申请(专利权)人(译)	玉，DC爱尔兰有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	玉，DC爱尔兰有限公司		
[标]发明人	MURAKAMI TAKESHI 무라카미다케시 ISE TOSHIHIRO 이세도시히로 KINOSHITA IKUO 기노시타이쿠오 TAKADA SAKI 다카다사키 TAKEDA AKIRA 다케다아키라 TAKIZAWA HIROO 다키자와히로오		
发明人	무라카미다케시 이세도시히로 기노시타이쿠오 다카다사키 다케다아키라 다키자와히로오		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	C09K11/06 H05B33/14 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/185 Y10S428/917		
优先权	2008310220 2008-12-04 JP 2008111799 2008-04-22 JP		
其他公开文献	KR101841763B1		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

有机电致发光器件包括一对电极;并且至少一个有机层包括设置在该对电极之间的发光层。 [化学式1]

