



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0034900
(43) 공개일자 2020년04월01일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) C07F 15/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류
H01L 51/0084 (2013.01)
C07F 15/0006 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0114361
(22) 출원일자 2018년09월21일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
머티어리얼사이언스 주식회사
서울특별시 금천구 가산디지털1로 196, 805(가산동, 에이스테크노타워10차)

(72) 발명자
김명숙
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
예지명
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(뒷면에 계속)

(74) 대리인
리엔목록특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 유기 발광 소자, 이를 포함한 장치 및 유기금속 화합물

(57) 요약

유기 발광 소자, 이를 포함한 장치 및 유기금속 화합물이 개시된다.

대표도 - 도1

10

190
150
110

(52) CPC특허분류

H01L 51/0087 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

(72) 발명자

유병욱

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

조일훈

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

강선우

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

김선재

경기도 고양시 일산서구 탄중로101번길 33-32, 11
0동 102호 (덕이동)

정재호

인천광역시 연수구 독배로40번길 18, 2동 609호(옥
련동, 삼성아파트)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 S2516546

부처명 중소벤처기업부

연구관리전문기관 중소기업기술정보진흥원

연구사업명 구매조건부 신제품 개발사업

연구과제명 근적외선 발광재료 개발

기 여 율 1/1

주관기관 머티어리얼사이언스

연구기간 2017.09.01 ~ 2018.08.31

명세서

청구범위

청구항 1

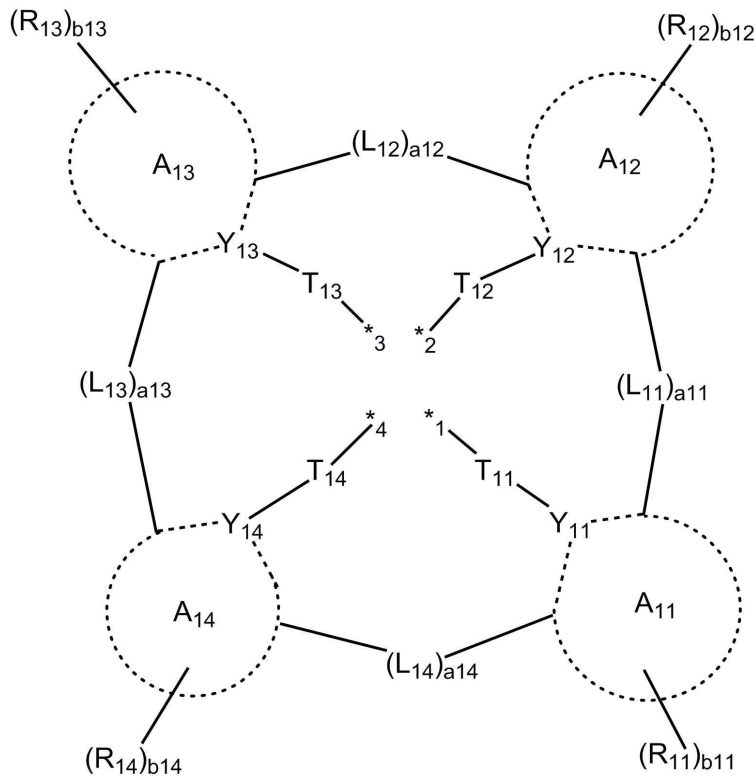
제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 발광층을 포함한 유기층을 포함하고;

상기 유기층은 하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자:

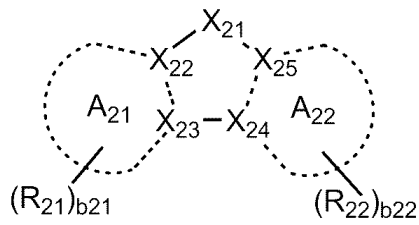
<화학식 1>

$M_1(L_1)_{n1}(L_2)_{n2}$

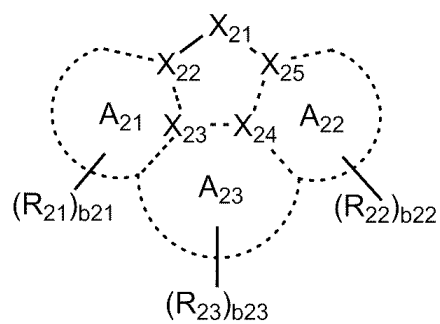
<화학식 1-1>



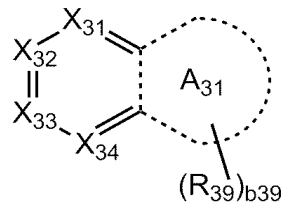
<화학식 2-1>



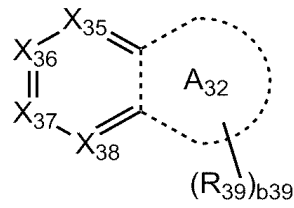
<화학식 2-2>



<화학식 3-1>



<화학식 3-2>



상기 화학식 1, 2-1, 2-2, 3-1 및 3-2 중,

M₁은 1주기 전이금속, 2주기 전이금속 및 3주기 전이금속 중에서 선택되고;

*1 내지 *4는 서로 독립적으로 M₁과의 결합 사이트이고;

L₁은 상기 화학식 1-1로 표시되는 리간드이고;

L₂는 1자리(monodentate) 리간드 및 2자리(bidentate) 리간드 중에서 선택되고;

n₁은 1이고,

n₂는 0, 1 및 2 중에서 선택되고;

A₁₁ 내지 A₁₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되되;

A₁₁ 내지 A₁₄ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

A₁₁ 내지 A₁₄ 중 적어도 하나는 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

Y₁₁ 내지 Y₁₄는 서로 독립적으로, N 및 C 중에서 선택되고;

T₁₁ 내지 T₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*' 및 *-S-*' 중에서 선택되고;

L₁₁ 내지 L₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*', *-S-*', *-C(R₁₇)(R₁₈)-*', *-C(R₁₇)=*', *=C(R₁₇)-*', *-C(R₁₇)=C(R₁₈)-*', *-C(=O)-*', *-C(=S)-*', *-C≡C-*', *-B(R₁₇)-*', *-N(R₁₇)-*', *-P(R₁₇)-*', *-Si(R₁₇)(R₁₈)-*', *-P(R₁₇)(R₁₈)-*' 및 *-Ge(R₁₇)(R₁₈)-*' 중에서 선택되고;

a₁₁ 내지 a₁₄는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되되, a₁₁ 내지 a₁₄ 중 적어도 3개는 1, 2 및 3 중에서 선택되고;

a₁₁이 0이면 A₁₁ 및 A₁₂는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₂이 0이면 A₁₂ 및 A₁₃는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₃가 0이면, A₁₃ 및 A₁₄는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₄가 0이면 A₁₄ 및 A₁₁는 서로 연결되어 있지 않고,

R₁₁ 내지 R₁₄, R₁₇ 및 R₁₈은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그

룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되고;

R₁₇과 R₁₁, R₁₇과 R₁₂, R₁₇과 R₁₃ 및/또는 R₁₇과 R₁₄는 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

R₁₇ 및 R₁₈은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

b₁₁ 내지 b₁₄는 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 중에서 선택되고;

X₂₁은 O, S, N(R₂₄) 및 C(R₂₄)(R₂₅) 중에서 선택되고;

X₂₂ 내지 X₂₅는 서로 독립적으로, N 및 C 중에서 선택되고

A₂₁ 및 A₂₂는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

X₃₁은 N, N-* 또는 C(R₃₁)이고, X₃₂는 N, N-* 또는 C(R₃₂)이고, X₃₃은 N, N-* 또는 C(R₃₃)이고, X₃₄는 N, N-* 또는 C(R₃₄)이고, X₃₅는 N, N-* 또는 C(R₃₅)이고, X₃₆은 N, N-* 또는 C(R₃₆)이고, X₃₇은 N, N-* 또는 C(R₃₇)이고, X₃₈은 N, N-* 또는 C(R₃₈)이고,

X₃₁ 내지 X₃₄ 중 2 이상은 N 또는 N-*이고,

X₃₅ 내지 X₃₈ 중 1 이상은 N 또는 N-*이고,

A₃₁은 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

A₃₂는 적어도 하나의 N 포함-C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고

R₂₁ 내지 R₂₅ 및 R₃₁ 내지 R₃₉는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되

되;

R₂₁ 내지 R₂₅ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

R₃₁ 내지 R₃₄ 및 R₃₉ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

R₃₅ 내지 R₃₉ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고;

* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

M₁은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되는, 유기 발광 소자.

청구항 3

제1항에 있어서,

M₁은 Pt, Pd, Ru 및 Os 중에서 선택되는, 유기 발광 소자.

청구항 4

제1항에 있어서,

A₁₁ 내지 A₁₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 페날렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 피아렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 인데노피리딘 그룹, 인돌로피리딘 그룹, 벤조퓨로피리딘 그룹, 벤조티에노피리딘 그룹, 벤조실롤로피리딘 그룹, 인데노피리미딘 그룹, 인돌로피리미딘 그룹, 벤조퓨로피리미딘 그룹, 벤조티에노피리미딘 그룹, 벤조실롤로피리미딘 그룹, 디히드로피리딘 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 2,3-디하이드로이미다졸(2,3-dihydroimidazole) 그룹, 트리아졸 그룹, 2,3-디하이드로트리아졸(2,3-dihydrotriazole) 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 2,3-디하이드로벤즈이미다졸(2,3-dihydrobenzimidazole) 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피리딘(2,3-dihydroimidazopyridine) 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피리미딘(2,3-dihydroimidazopyrimidine) 그룹, 이미다조피라진 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피라진(2,3-dihydroimidazopyrazine) 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 중에서 선택되는, 유기 발광 소자.

청구항 5

제1항에 있어서,

A₁₁ 내지 A₁₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택되는, 유기 발광 소자.

청구항 6

제1항에 있어서,

Y₁₁ 내지 Y₁₄ 중에서 선택된 둘은 C이고, 나머지 둘은 N인, 유기 발광 소자.

청구항 7

제1항에 있어서,

T₁₁ 내지 T₁₄는 단일 결합인, 유기 발광 소자.

청구항 8

제1항에 있어서,

L₁₁ 내지 L₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택되는, 유기 발광 소자.

청구항 9

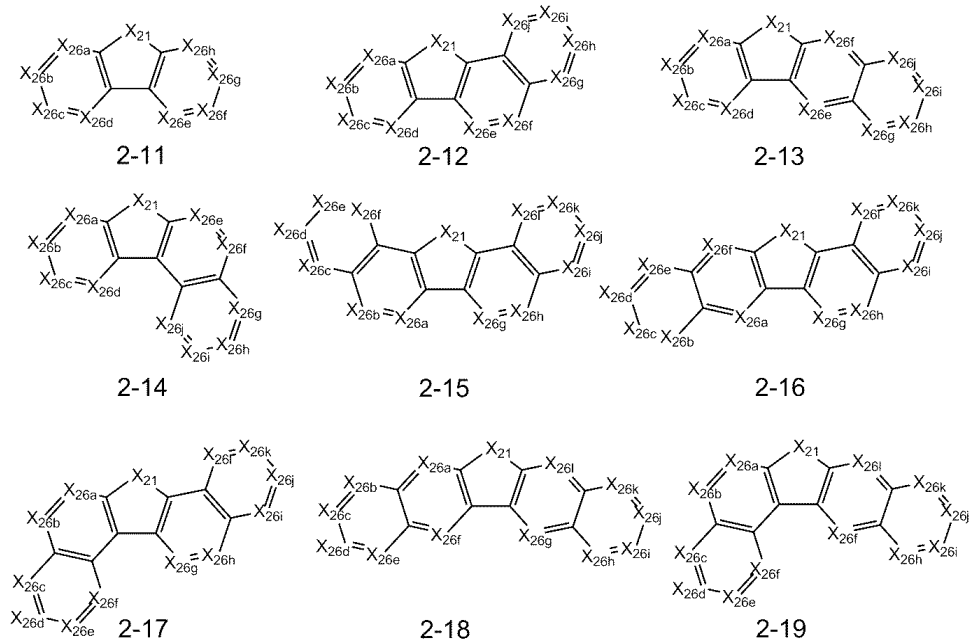
제1항에 있어서,

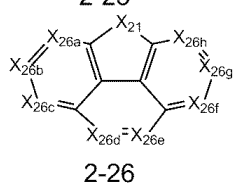
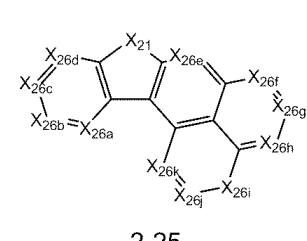
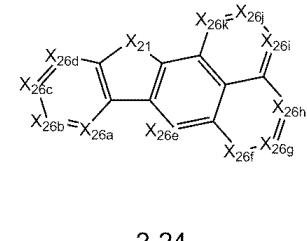
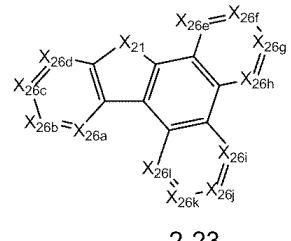
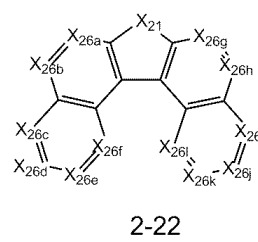
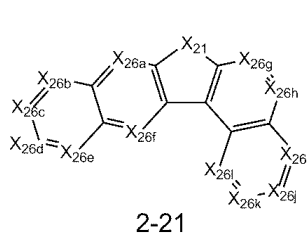
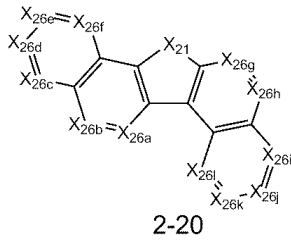
A₂₁ 및 A₂₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 페날렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹 및 퀴나졸린 그룹 중에서 선택되는, 유기 발광 소자.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹은 서로 독립적으로, 하기 화학식 2-11 내지 2-26 중 어느 하나로 표시되는, 유기 발광 소자:





상기 화학식 2-11 내지 2-26 중,

X_{21} 은 O, S, $N(R_{24})$ 및 $C(R_{24})(R_{25})$ 중에서 선택되고;

X_{26a} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26a})$ 이고, X_{26b} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26b})$ 이고, X_{26c} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26c})$ 이고, X_{26d} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26d})$ 이고, X_{26e} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26e})$ 이고, X_{26f} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26f})$ 이고, X_{26g} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26g})$ 이고, X_{26h} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26h})$ 이고, X_{26i} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26i})$ 이고, X_{26j} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26j})$ 이고, X_{26k} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26k})$ 이고, X_{26l} 는 N, N^* 또는 $C(R_{26l})$ 이고,

R_{24} , R_{25} 및 R_{26a} 내지 R_{26l} 은 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중의 R_{21} 의 정의를 참조하고;

상기 화학식 2-11 중, R_{24} , R_{25} 및 R_{26a} 내지 R_{26h} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

상기 화학식 2-12 내지 2-14 중, R_{24} , R_{25} 및 R_{26a} 내지 R_{26j} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

상기 화학식 2-15 내지 2-23 중, R_{24} , R_{25} 및 R_{26a} 내지 R_{26l} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

상기 화학식 2-24 및 2-25 중, R_{24} , R_{25} 및 R_{26a} 내지 R_{26k} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

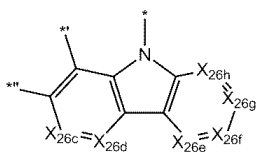
상기 화학식 2-26 중, R_{24} , R_{25} 및 R_{26a} 내지 R_{26h} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

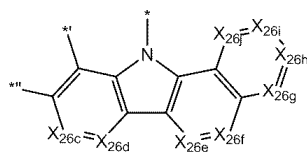
청구항 11

제1항에 있어서,

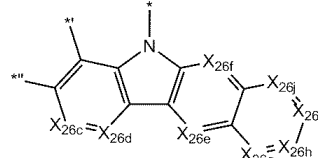
상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹은 서로 독립적으로, 하기 화학식 2-31 내지 2-44 중 어느 하나로 표시되는, 유기 발광 소자:



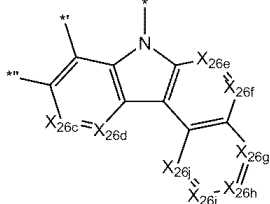
2-31



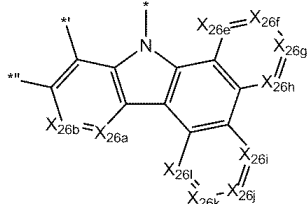
2-32



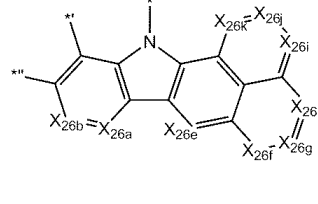
2-33



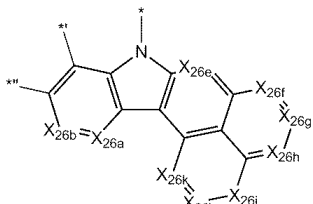
2-34



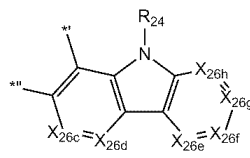
2-35



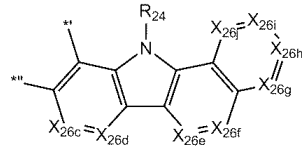
2-36



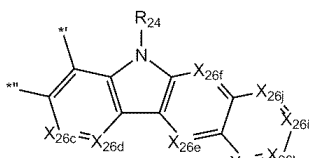
2-37



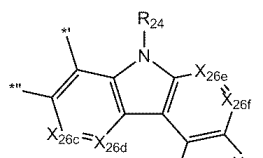
2-38



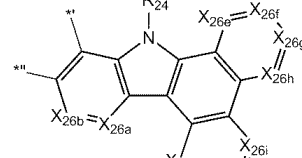
2-39



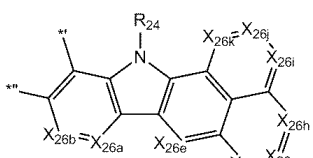
2-40



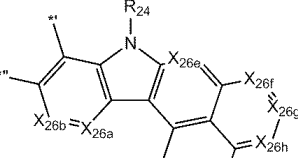
2-41



2-42



2-43



2-44

상기 화학식 2-31 내지 2-44 중,

X_{26c} 는 N 또는 $C(R_{26c})$ 이고, X_{26d} 는 N 또는 $C(R_{26d})$ 이고, X_{26e} 는 N 또는 $C(R_{26e})$ 이고, X_{26f} 는 N 또는 $C(R_{26f})$ 이고, X_{26g} 는 N 또는 $C(R_{26g})$ 이고, X_{26h} 는 N 또는 $C(R_{26h})$ 이고, X_{26i} 는 N 또는 $C(R_{26i})$ 이고, X_{26j} 는 N 또는 $C(R_{26j})$ 이고, X_{26k} 는 N 또는 $C(R_{26k})$ 이고, X_{26l} 는 N 또는 $C(R_{26l})$ 이고,

R_{26c} 내지 R_{26l} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되고;

Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 테페닐기 중에서 선택되고;

*, *' 및 *''은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 12

제1항에 있어서,

A₃₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택되고;

A₃₂는 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택되는, 유기 발광 소자.

청구항 13

제1항에 있어서,

상기 화학식 3-1 중,

X₃₁ 및 X₃₂가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;

X₃₁ 및 X₃₃이 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;

X₃₁ 및 X₃₄가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;

X₃₂ 및 X₃₃이 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;

X₃₂ 및 X₃₄가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나; 또는

X₃₃ 및 X₃₄가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이고;

A₃₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택되고;

상기 화학식 3-2 중,

X₃₅가 N 또는 N-*이거나;

X₃₆이 N 또는 N-*이거나;

X₃₇이 N 또는 N-*이거나; 또는

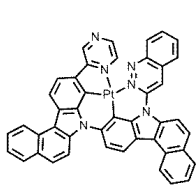
X₃₈이 N 또는 N-*이고;

A₃₂는 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택되는, 유기 발광 소자.

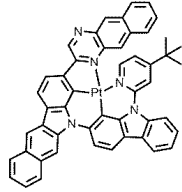
청구항 14

제1항에 있어서,

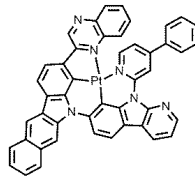
상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 50 중에서 선택되는, 유기 발광 소자:



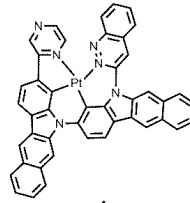
1



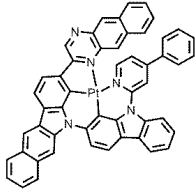
2



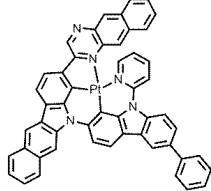
3



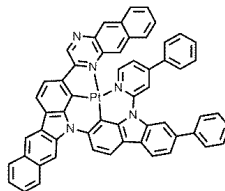
4



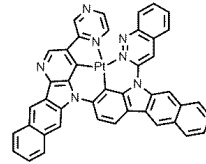
5



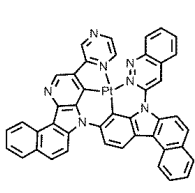
6



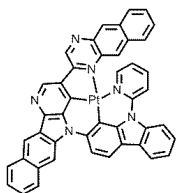
7



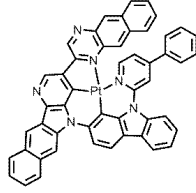
8



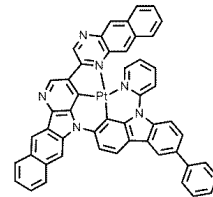
9



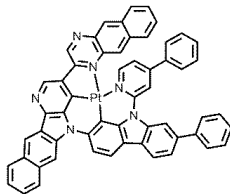
10



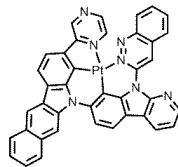
11



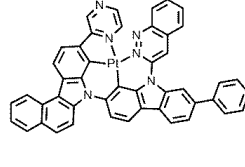
12



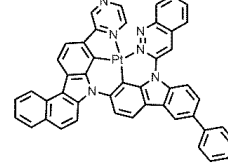
13



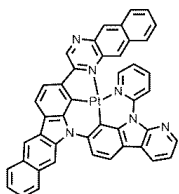
14



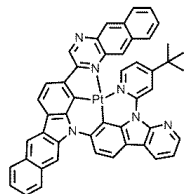
15



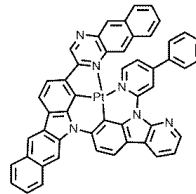
16



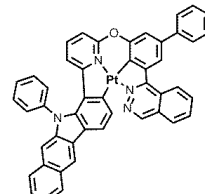
17



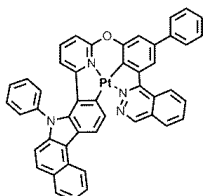
18



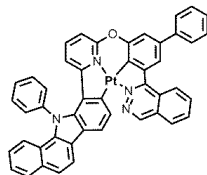
19



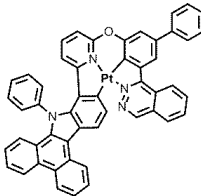
20



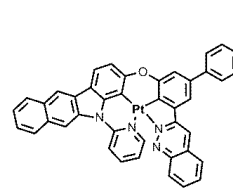
21



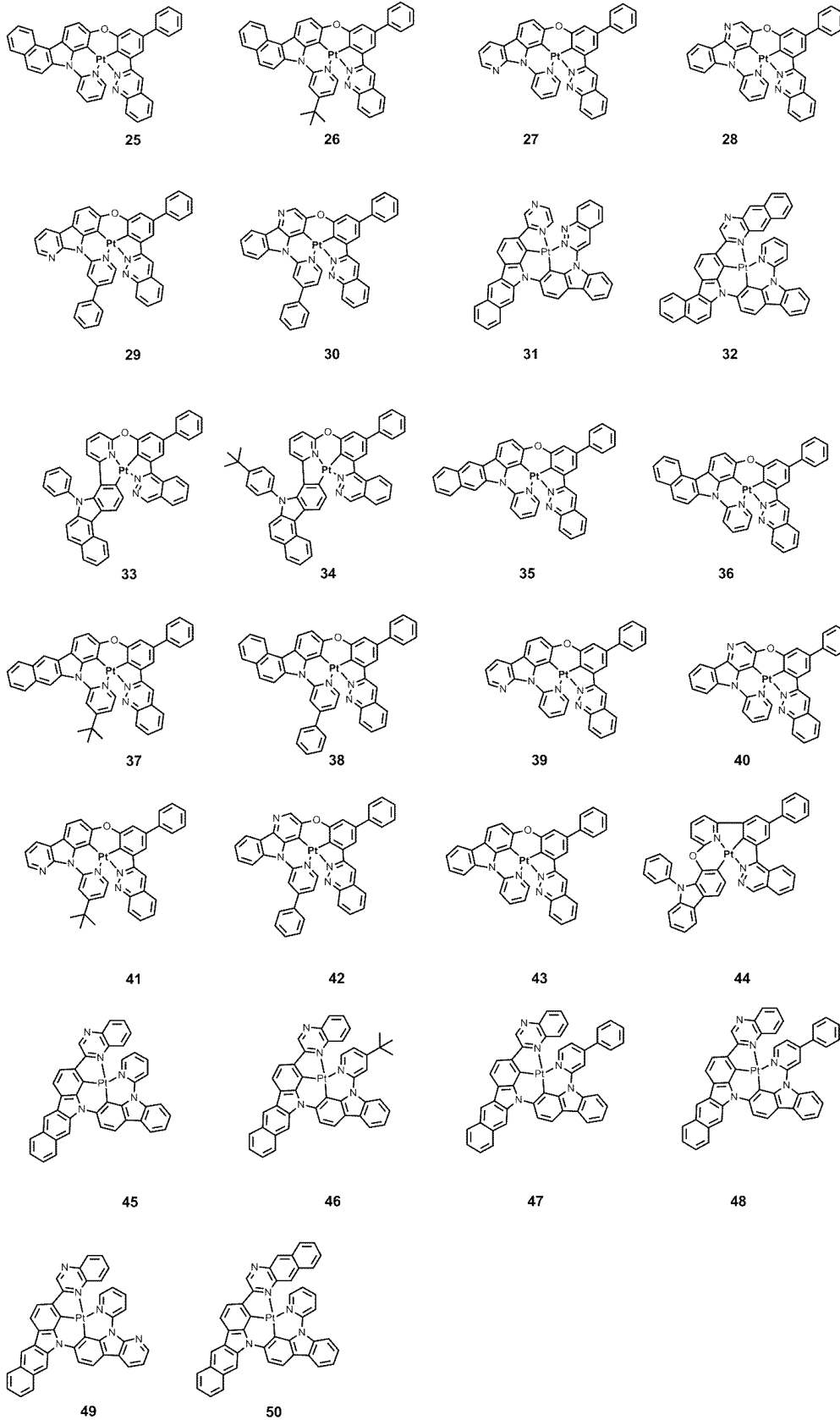
22



23



24



청구항 15

제1항에 있어서,

상기 유기금속 화합물이 720nm 이상 및 2500nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 적색광 또는 근적외선광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 16

제1항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

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

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

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

청구항 17

제1항에 있어서,

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

청구항 18

제1항 내지 제17항 중 어느 한 항의 유기 발광 소자를 포함한, 장치.

청구항 19

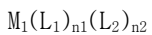
제18항에 있어서,

상기 장치가 발광 장치, 인증 장치 또는 전자 장치인, 장치.

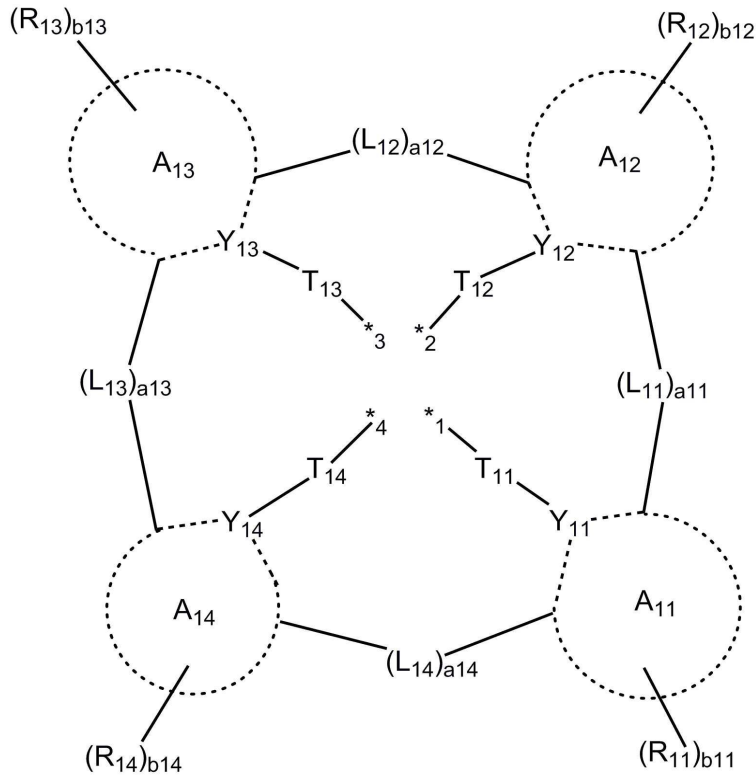
청구항 20

하기 화학식 1로 표시되는, 유기금속 화합물:

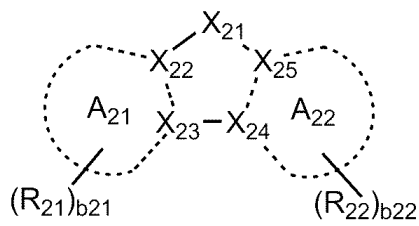
<화학식 1>



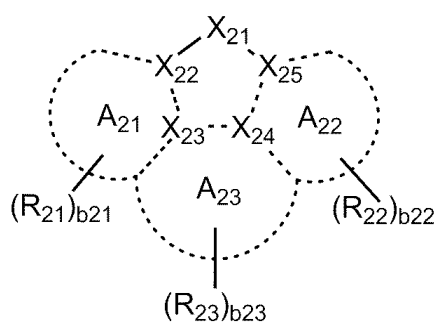
<화학식 1-1>



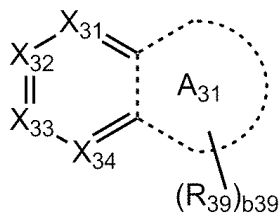
<화학식 2-1>



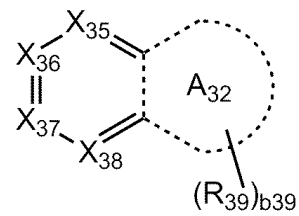
<화학식 2-2>



<화학식 3-1>



<화학식 3-2>



상기 화학식 1, 2-1, 2-2, 3-1 및 3-2 중,

M₁은 1주기 전이금속, 2주기 전이금속 및 3주기 전이금속 중에서 선택되고;

*1 내지 *4는 서로 독립적으로 M₁과의 결합 사이트이고;

L₁은 상기 화학식 1-1로 표시되는 리간드이고;

L₂는 1자리(monodentate) 리간드 및 2자리(bidentate) 리간드 중에서 선택되고;

n1은 1이고,

n2는 0, 1 및 2 중에서 선택되고;

A₁₁ 내지 A₁₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되되;

A₁₁ 내지 A₁₄ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

A₁₁ 내지 A₁₄ 중 적어도 하나는 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

Y₁₁ 내지 Y₁₄는 서로 독립적으로, N 및 C 중에서 선택되고;

T₁₁ 내지 T₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*' 및 *-S-*' 중에서 선택되고;

L₁₁ 내지 L₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*', *-S-*', *-C(R₁₇)(R₁₈)-*', *-C(R₁₇)=*', *=C(R₁₇)-*', *-C(R₁₇)=C(R₁₈)-*', *-C(=O)-*', *-C(=S)-*', *-C≡C-*', *-B(R₁₇)-*', *-N(R₁₇)-*', *-P(R₁₇)-*', *-Si(R₁₇)(R₁₈)-*', *-P(R₁₇)(R₁₈)-*' 및 *-Ge(R₁₇)(R₁₈)-*' 중에서 선택되고;

a₁₁ 내지 a₁₄는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되되, a₁₁ 내지 a₁₄ 중 적어도 3개는 1, 2 및 3 중에서 선택되고;

a₁₁이 0이면 A₁₁ 및 A₁₂는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₂이 0이면 A₁₂ 및 A₁₃는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₃가 0이면, A₁₃ 및 A₁₄는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₄가 0이면 A₁₄ 및 A₁₁는 서로 연결되어 있지 않고,

R₁₁ 내지 R₁₄, R₁₇ 및 R₁₈은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고;

R₁₇과 R₁₁, R₁₇과 R₁₂, R₁₇과 R₁₃ 및/또는 R₁₇과 R₁₄는 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

R₁₇ 및 R₁₈은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

b₁₁ 내지 b₁₄는 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 중에서 선택되고;

X₂₁은 O, S, N(R₂₄) 및 C(R₂₄)(R₂₅) 중에서 선택되고;

X₂₂ 내지 X₂₅는 서로 독립적으로, N 및 C 중에서 선택되고

A₂₁ 및 A₂₂는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

X₃₁은 N, N-* 또는 C(R₃₁)이고, X₃₂는 N, N-* 또는 C(R₃₂)이고, X₃₃은 N, N-* 또는 C(R₃₃)이고, X₃₄는 N, N-* 또는

C(R₃₄)이고, X₃₅는 N, N-* 또는 C(R₃₅)이고, X₃₆은 N, N-* 또는 C(R₃₆)이고, X₃₇은 N, N-* 또는 C(R₃₇)이고, X₃₈은 N, N-* 또는 C(R₃₈)이고,

X₃₁ 내지 X₃₄ 중 2 이상은 N 또는 N-*이고,

X₃₅ 내지 X₃₈ 중 1 이상은 N 또는 N-*이고,

A₃₁은 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

A₃₂는 적어도 하나의 N 포함-C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고

R₂₁ 내지 R₂₅ 및 R₃₁ 내지 R₃₉는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되
되;

R₂₁ 내지 R₂₅ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

R₃₁ 내지 R₃₄ 및 R₃₉ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

R₃₅ 내지 R₃₉ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고;

* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기 발광 소자, 이를 포함한 장치 및 유기금속 화합물에 관한 것이다.

배경 기술

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

[0003] 상기 유기 발광 소자는 기관 상부에 제1전극이 배치되어 있고, 상기 제1전극 상부에 정공 수송 영역(hole transport region), 발광층, 전자 수송 영역(electron transport region) 및 제2전극이 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 상기 제1전극으로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 제2전극으로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상

태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0004] 유기 발광 소자, 이를 포함한 장치 및 신규 유기금속 화합물을 제공하는 것이다.

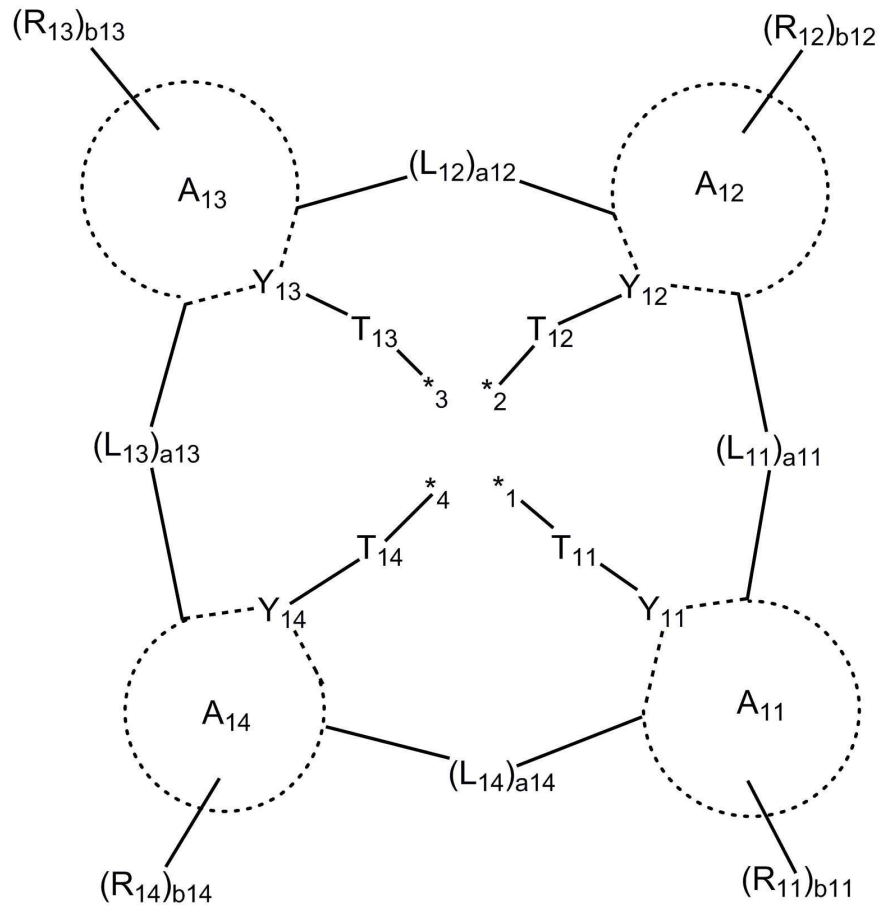
과제의 해결 수단

[0005] 일 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 발광층을 포함한 유기층을 포함하고; 상기 유기층은 하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자가 제공된다:

[0006] <화학식 1>

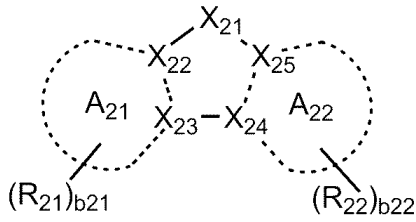
[0007] $M_1(L_1)_{n1}(L_2)_{n2}$

[0008] <화학식 1-1>

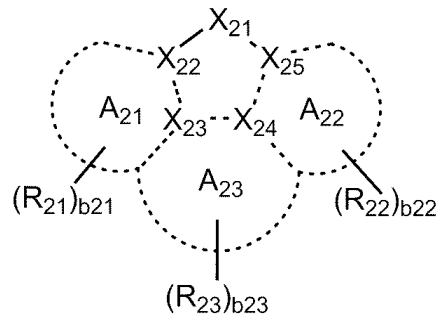


[0009]

[0010] <화학식 2-1>

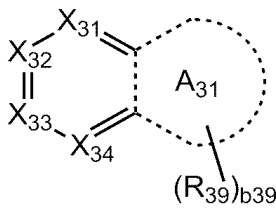


<화학식 2-2>

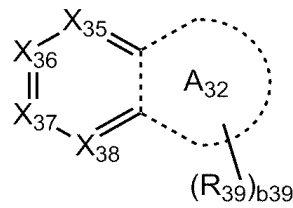


[0011]

[0012] <화학식 3-1>



<화학식 3-2>



[0013]

[0014] 상기 화학식 1, 2-1, 2-2, 3-1 및 3-2 중,

[0015] M₁은 1주기 전이금속, 2주기 전이금속 및 3주기 전이금속 중에서 선택되고;

[0016] *1 내지 *4는 서로 독립적으로 M₁과의 결합 사이트이고;

[0017] L₁은 상기 화학식 1-1로 표시되는 리간드이고;

[0018] L₂는 1자리(monodentate) 리간드 및 2자리(bidentate) 리간드 중에서 선택되고;

[0019] n₁은 1이고,

[0020] n₂는 0, 1 및 2 중에서 선택되고;

[0021] A₁₁ 내지 A₁₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되되;

[0022] A₁₁ 내지 A₁₄ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

[0023] A₁₁ 내지 A₁₄ 중 적어도 하나는 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

[0024] Y₁₁ 내지 Y₁₄는 서로 독립적으로, N 및 C 중에서 선택되고;

[0025] T₁₁ 내지 T₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택되고;

[0026] L₁₁ 내지 L₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-* , *-S-* , *-C(R₁₇)(R₁₈)-* , *-C(R₁₇)=* , *=C(R₁₇)-* , *-C(R₁₇)=C(R₁₈)-* , *-C(=O)-* , *-C(=S)-* , *-C≡C-* , *-B(R₁₇)-* , *-N(R₁₇)-* , *-P(R₁₇)-* , *-Si(R₁₇)(R₁₈)-* , *-P(R₁₇)(R₁₈)-* 및 *-Ge(R₁₇)(R₁₈)-* 중에서 선택되고;

[0027] a₁₁ 내지 a₁₄는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되되, a₁₁ 내지 a₁₄ 중 적어도 3개는 1, 2 및 3 중에서 선택되고;

[0028] a₁₁이 0이면 A₁₁ 및 A₁₂는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₂이 0이면 A₁₂ 및 A₁₃는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₃가 0

이면, A₁₃ 및 A₁₄는 서로 연결되어 있지 않고, a₁₄가 0이면 A₁₄ 및 A₁₁는 서로 연결되어 있지 않고,

[0029] R₁₁ 내지 R₁₄, R₁₇ 및 R₁₈은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고;

[0030] R₁₇과 R₁₁, R₁₇과 R₁₂, R₁₇과 R₁₃ 및/또는 R₁₇과 R₁₄는 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

[0031] R₁₇ 및 R₁₈은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

[0032] b₁₁ 내지 b₁₄는 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 중에서 선택되고;

[0033] X₂₁은 O, S, N(R₂₄) 및 C(R₂₄)(R₂₅) 중에서 선택되고;

[0034] X₂₂ 내지 X₂₅는 서로 독립적으로, N 및 C 중에서 선택되고

[0035] A₂₁ 및 A₂₂는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

[0036] X₃₁은 N, N-* 또는 C(R₃₁)이고, X₃₂는 N, N-* 또는 C(R₃₂)이고, X₃₃은 N, N-* 또는 C(R₃₃)이고, X₃₄는 N, N-* 또는 C(R₃₄)이고, X₃₅는 N, N-* 또는 C(R₃₅)이고, X₃₆은 N, N-* 또는 C(R₃₆)이고, X₃₇은 N, N-* 또는 C(R₃₇)이고, X₃₈은 N, N-* 또는 C(R₃₈)이고,

[0037] X₃₁ 내지 X₃₄ 중 2 이상은 N 또는 N-*이고,

[0038] X₃₅ 내지 X₃₈ 중 1 이상은 N 또는 N-*이고,

[0039] A₃₁은 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

[0040] A₃₂는 적어도 하나의 N 포함-C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고

[0041] R₂₁ 내지 R₂₅ 및 R₃₁ 내지 R₃₉는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되
 되;

- [0042] R₂₁ 내지 R₂₅ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,
- [0043] R₃₁ 내지 R₃₄ 및 R₃₉ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,
- [0044] R₃₅ 내지 R₃₉ 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,
- [0045] Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고;
- [0046] * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0047] 다른 측면에 따르면, 상기 유기 발광 소자를 포함한, 장치가 제공된다.
- [0048] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물이 제공된다.

발명의 효과

- [0049] 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 예를 들면, 720nm 이상 및 2500nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 적색광 또는 근적외선광의 방출이 가능하면서, 저구동 전압 및 고외부 양자 발광 효율을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0050] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.
- 도 2는 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.
- 도 3은 본 발명의 또 다른 실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.
- 도 4는 본 발명의 또 다른 실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0051] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다. 본 발명의 효과 및 특징, 그리고 그것들을 달성하는 방법은 도면과 함께 상세하게 후술되어 있는 실시예들을 참조하면 명확해질 것이다. 그러나 본 발명은 이하에서 개시되는 실시예들에 한정되는 것이 아니라 다양한 형태로 구현될 수 있다.
- [0052] 이하, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시예들을 상세히 설명하기로 하며, 도면을 참조하여 설명할 때 동일하거나 대응하는 구성 요소는 동일한 도면부호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다.
- [0053] 이하의 실시예에서, 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0054] 이하의 실시예에서, 포함하다 또는 가지다 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 또는 구성요소가 존재함을 의미하는 것이고, 하나 이상의 다른 특징들 또는 구성요소가 부가될 가능성을 미리 배제하는 것은 아니다.
- [0055] 이하의 실시예에서, 막, 영역, 구성 요소 등의 부분이 다른 부분 위에 또는 상에 있다고 할 때, 다른 부분의 바로 위에 있는 경우뿐만 아니라, 그 중간에 다른 막, 영역, 구성 요소 등이 개재되어 있는 경우도 포함한다.
- [0056] 도면에서는 설명의 편의를 위하여 구성 요소들이 그 크기가 과장 또는 축소될 수 있다. 예컨대, 도면에서 나타난 각 구성의 크기 및 두께는 설명의 편의를 위해 임의로 나타내었으므로, 본 발명이 반드시 도시된 바에 한정되지 않는다.
- [0057] 일 측면에 따르면, 상기 유기 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 상기 제1전극 및 상기 제2전극 사이에 개재된 발광층을 포함한 유기층을 포함하고; 상기 유기층은 하기 화학식 1로 표시되는, 유기금속 화합물을 포함한다:
- [0058] <화학식 1>

[0059] $M_1(L_1)_{n1}(L_2)_{n2}$

[0060] 상기 화학식 1 중, M_1 은 1주기 전이금속, 2주기 전이금속 및 3주기 전이금속 중에서 선택될 수 있다.

[0061] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, M_1 은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

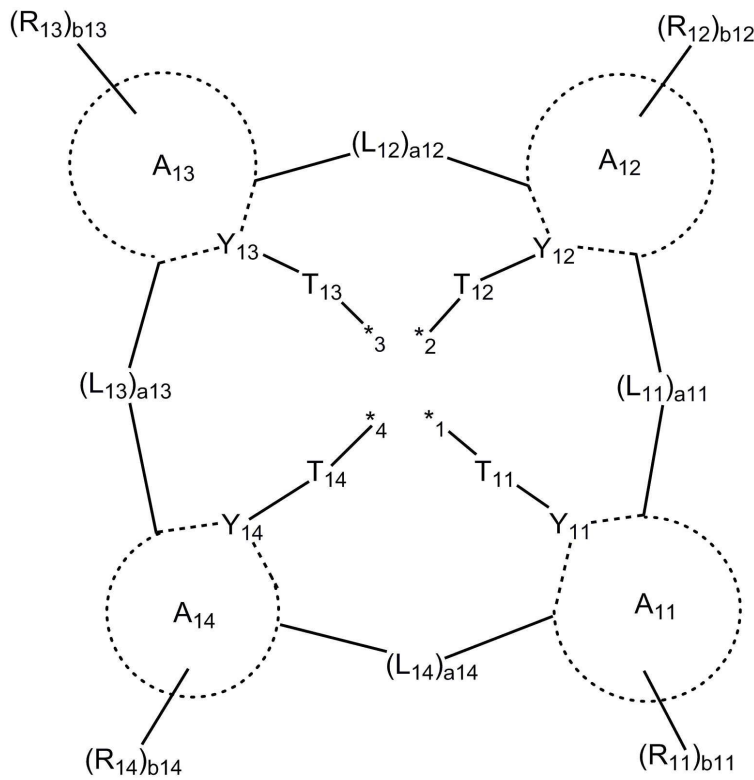
[0062] 다른 예로서, 상기 화학식 1 중, M_1 은 Pt, Pd, Cu, Ag, Au, Rh, Ir, Ru 및 Os 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0063] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중, M_1 은 Pt, Pd, Cu, Ag, Au, Ru 및 Os 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0064] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중, M_1 은 Pt, Pd, Ru 및 Os 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0065] 상기 화학식 1 중, L_1 은 하기 화학식 1-1로 표시되는 리간드이다:

[0066] <화학식 1-1>



[0067]

[0068] 상기 화학식 1-1 중, *1 내지 *4는 서로 독립적으로 M_1 과의 결합 사이트이고; A_{11} 내지 A_{14} , Y_{11} 내지 Y_{14} , T_{11} 내지 T_{14} , L_{11} 내지 L_{14} , a11 내지 a14, R_{11} 내지 R_{14} 및 b11 내지 b14에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다.

[0069] 상기 화학식 1 중, n_1 은 L_1 의 개수를 의미하며, n_1 은 1일 수 있다.

[0070] 상기 화학식 1 중 L_2 는 1자리(monodentate) 리간드 및 2자리(bidentate) 리간드 중에서 선택될 수 있다.

[0071] 상기 화학식 1 중, n_2 는 L_2 의 개수를 의미하며, n_2 는 0, 1 및 2 중에서 선택될 수 있다.

[0072] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, n_2 는 0 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0073] 상기 화학식 1-1 중, A_{11} 내지 A_{14} 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표

시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되되;

[0074] A₁₁ 내지 A₁₄ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹 중에서 선택되고;

[0075] A₁₁ 내지 A₁₄ 중 적어도 하나는 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0076] 예를 들어, 상기 화학식 1-1 중, A₁₁ 내지 A₁₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 페날렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 인데노피리딘 그룹, 인돌로피리딘 그룹, 벤조퓨로피리딘 그룹, 벤조티에노피리딘 그룹, 벤조실롤로피리딘 그룹, 인데노피리미딘 그룹, 인돌로피리미딘 그룹, 벤조퓨로피리미딘 그룹, 벤조티에노피리미딘 그룹, 벤조실롤로피리미딘 그룹, 디히드로피리딘 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 2,3-디하이드로이미다졸(2,3-dihydroimidazole) 그룹, 트리아졸 그룹, 2,3-디하이드로트리아졸(2,3-dihydrotriazole) 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 2,3-디하이드로벤즈이미다졸(2,3-dihydrobenzimidazole) 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피리딘(2,3-dihydroimidazopyridine) 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피리미딘(2,3-dihydroimidazopyrimidine) 그룹, 이미다조피라진 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피라진(2,3-dihydroimidazopyrazine) 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0077] 다른 예로서, 상기 화학식 1-1 중, A₁₁ 내지 A₁₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 페날렌 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 인데노피리딘 그룹, 인돌로피리딘 그룹, 벤조퓨로피리딘 그룹, 벤조티에노피리딘 그룹, 인데노피리미딘 그룹, 인돌로피리미딘 그룹, 벤조퓨로피리미딘 그룹, 벤조티에노피리미딘 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹 및 벤즈이미다졸 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0078] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1-1 중, A₁₁ 내지 A₁₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-1로 표시되는 그룹, 상기 화학식 3-2로 표시되는 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0079] 상기 화학식 1-1 중, Y₁₁ 내지 Y₁₄는 서로 독립적으로, N 및 C 중에서 선택될 수 있다.

[0080] 예를 들어, 상기 화학식 1-1 중, Y₁₁ 내지 Y₁₄ 중에서 선택된 2개는 C이고, 나머지 2개는 N일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0081] 상기 화학식 1-1 중, T₁₁ 내지 T₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택될 수 있다.

시아노기, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0097] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0098] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토피라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기;

[0099] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토피라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁), -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -P(S)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토피라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기

기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조푸라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기; 및

[0100] $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되고;

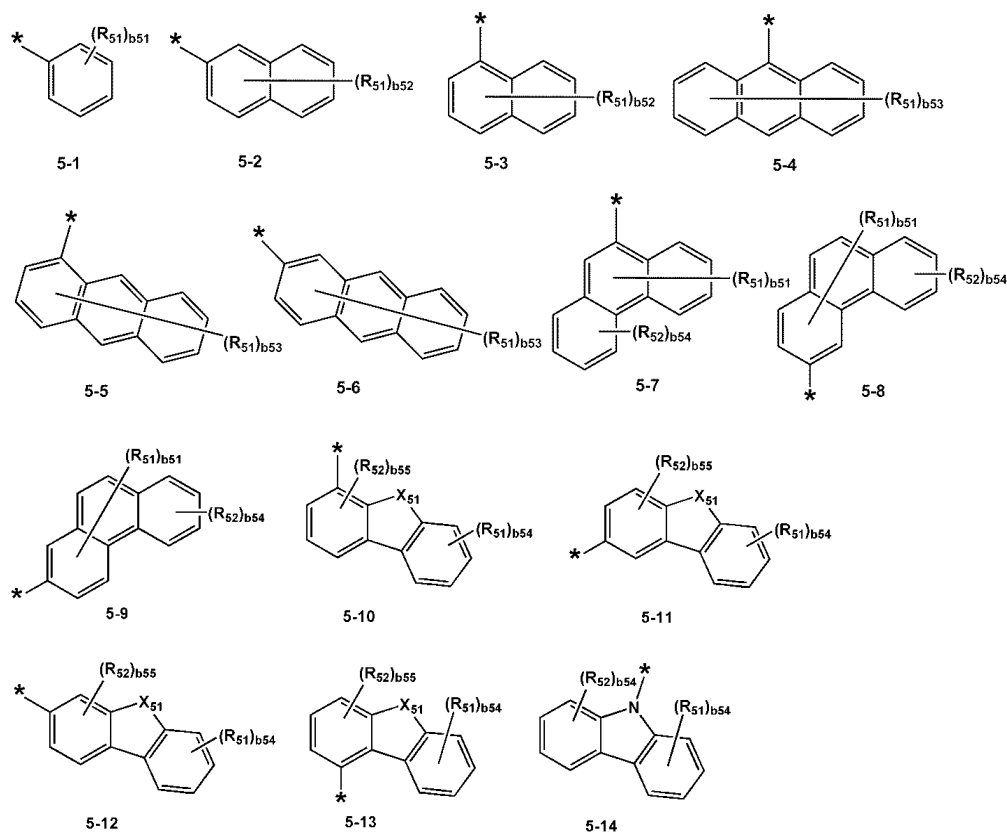
[0101] Q_1 내지 Q_3 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알킬닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0102] 다른 예로서, 상기 화학식 1-1 중, R_{11} 내지 R_{14} , R_{17} 및 R_{18} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C_1-C_{20} 알킬기;

[0103] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기;

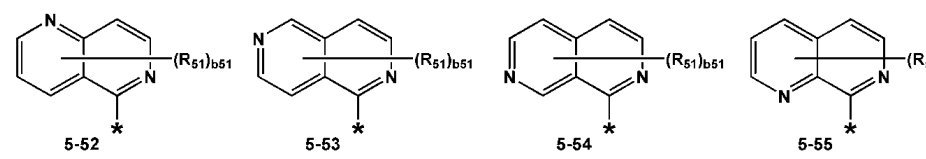
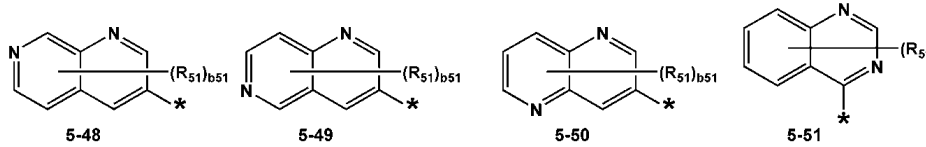
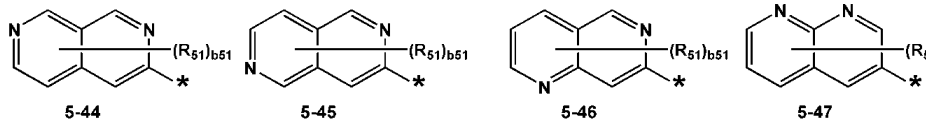
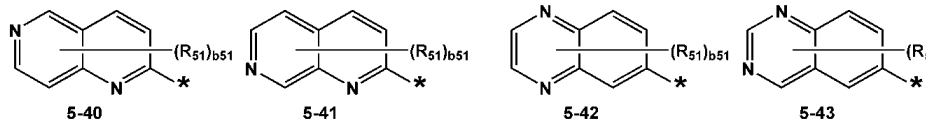
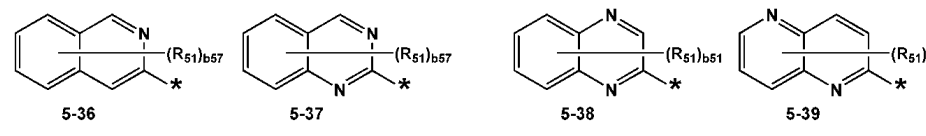
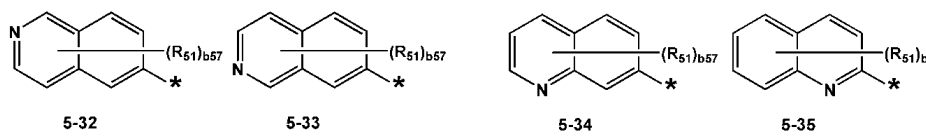
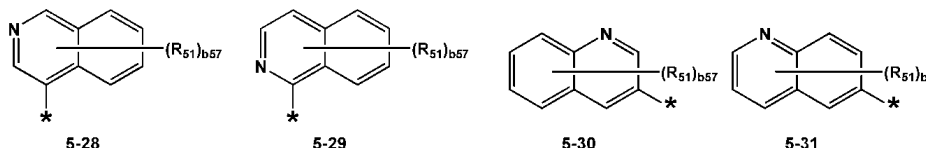
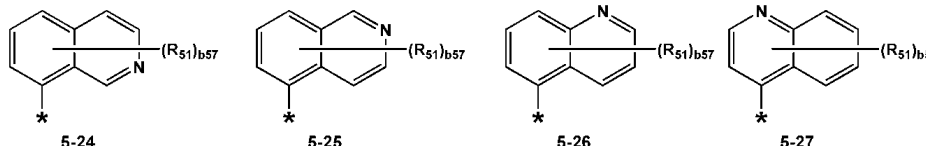
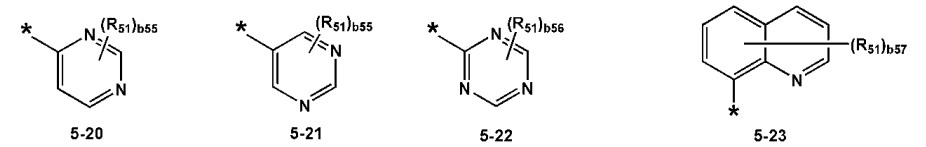
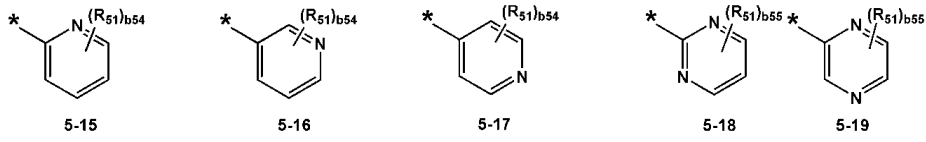
[0104] 하기 화학식 5-1 내지 5-13로 표시되는 기; 및

[0105] $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0106]

[0107]

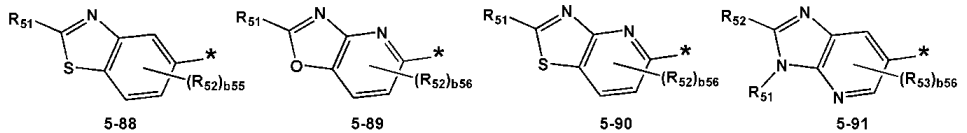
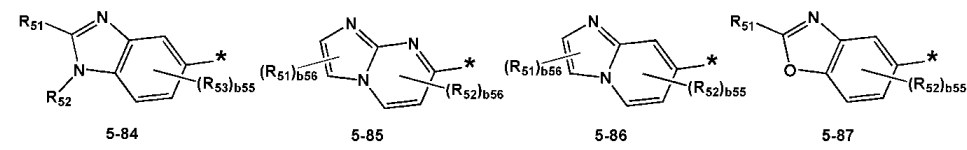
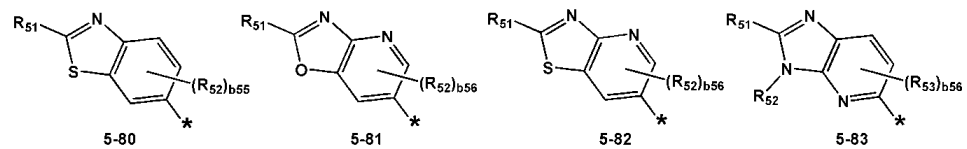
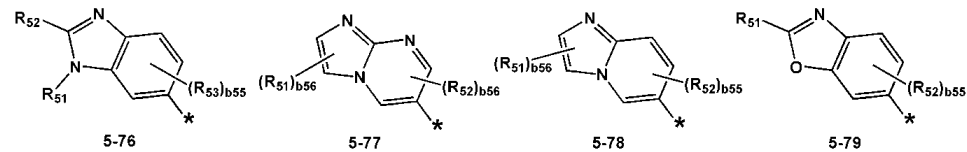
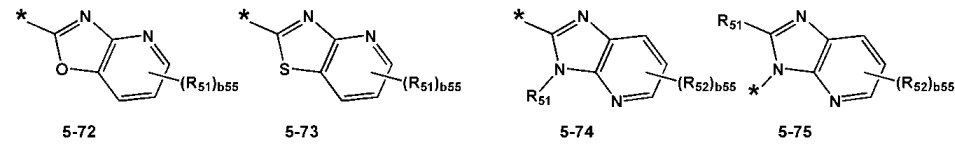
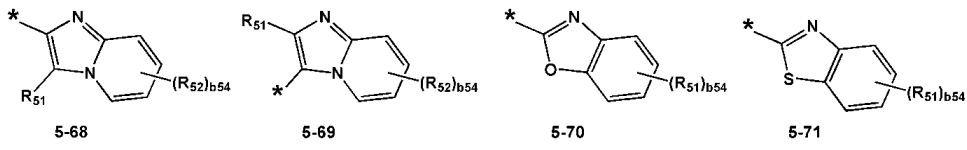
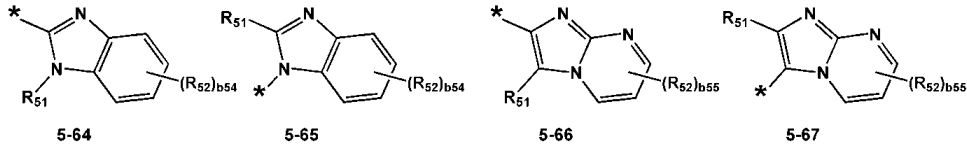
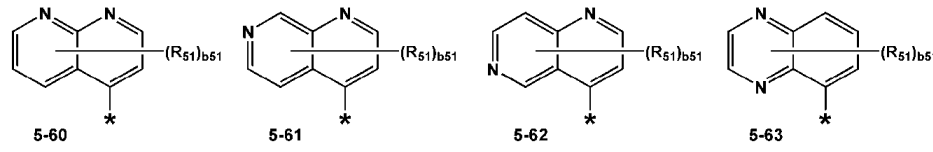
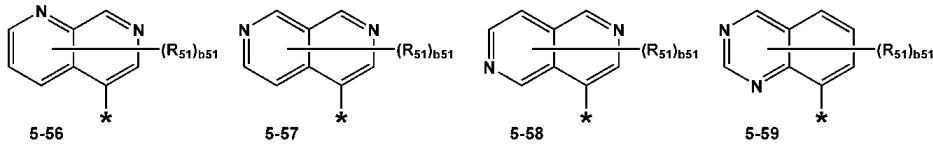


[0108]

[0109]

[0110]

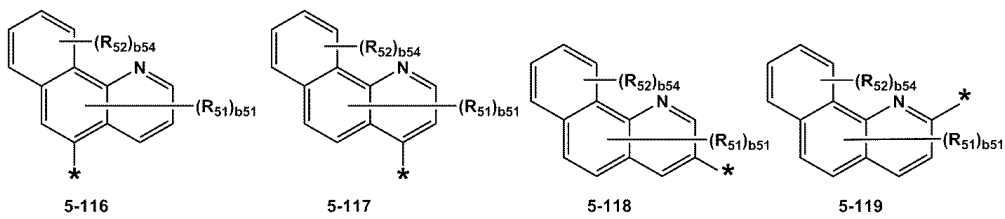
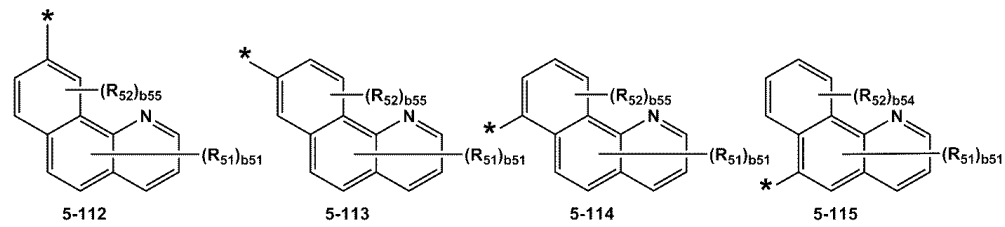
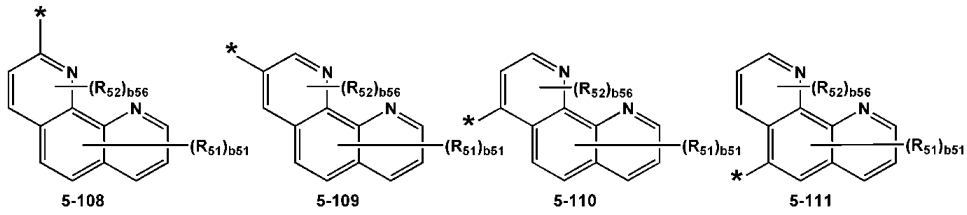
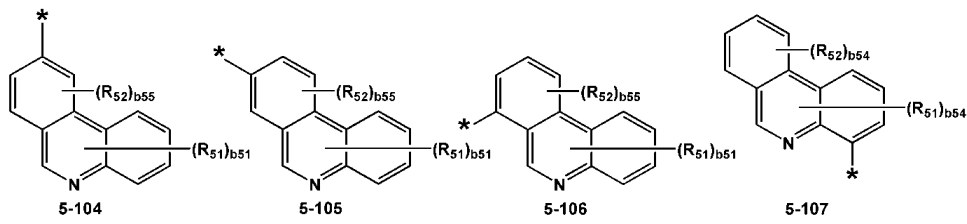
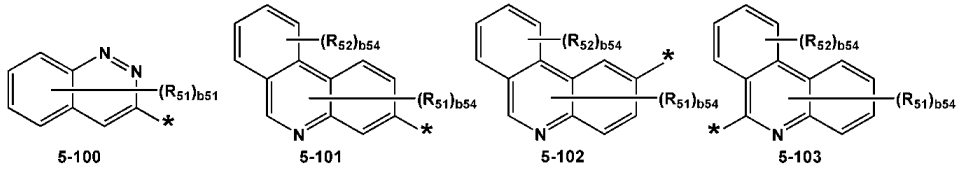
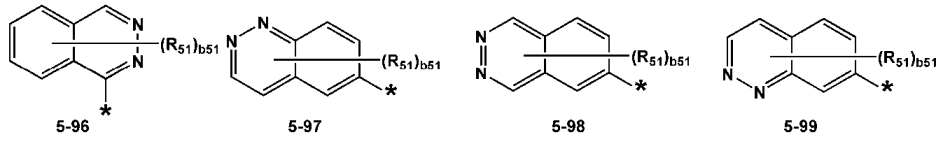
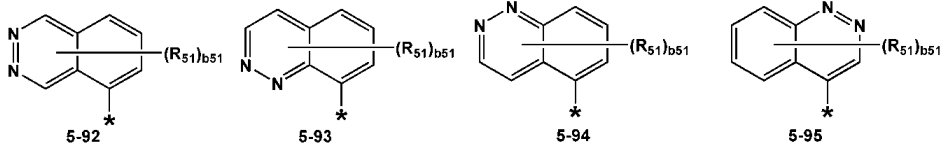
[0111]



[0112]

[0113]

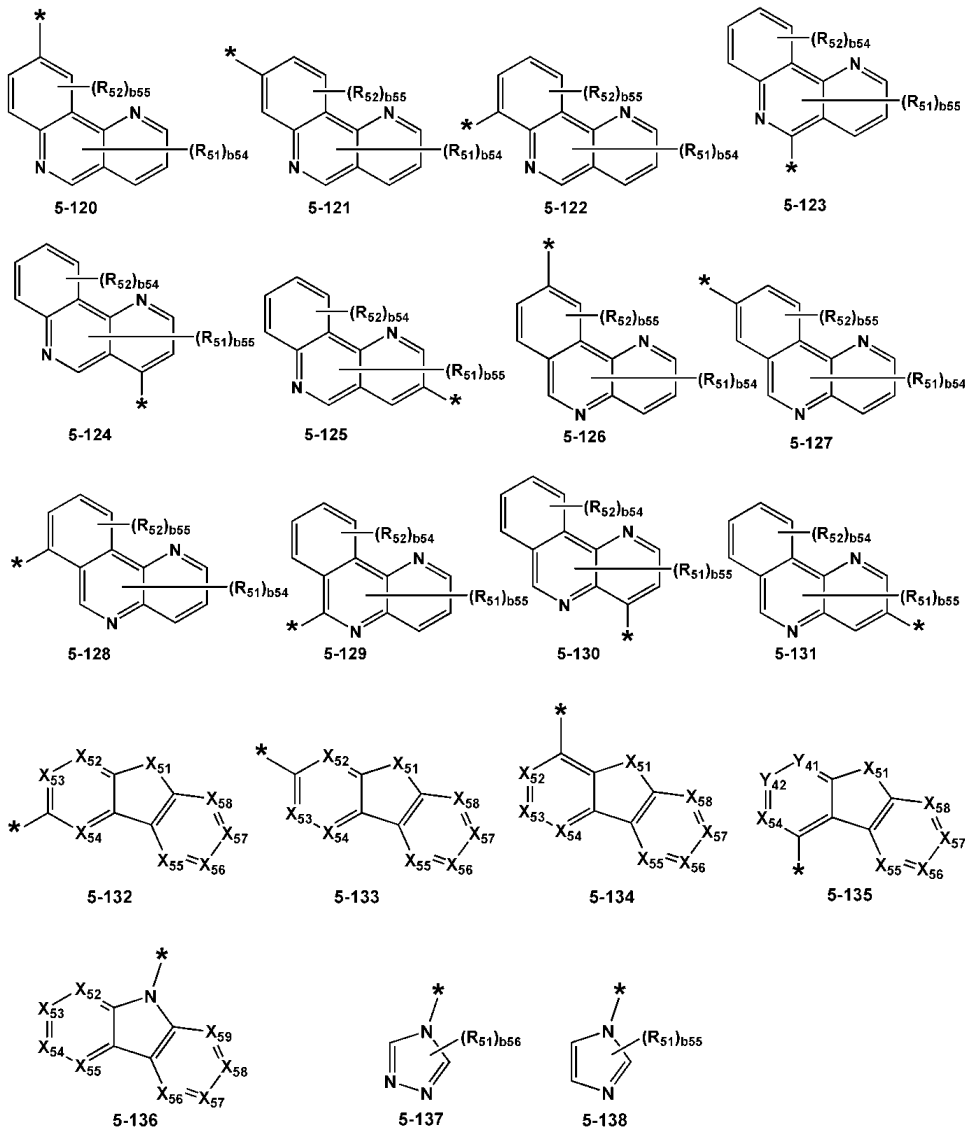
[0114]



[0115]

[0116]

[0117]



[0118]

[0119]

[0120]

[0121]

[0122]

[0123]

[0124]

[0125]

[0126]

[0127]

상기 화학식 5-1 내지 5-138 중,

R_{51} 은 O, S, $N(R_{51})$ 및 $C(R_{51})(R_{60})$ 중에서 선택되고;

X_{52} 는 N 또는 $C(R_{52})$ 이고, X_{53} 은 N 또는 $C(R_{53})$ 이고, X_{54} 는 N 또는 $C(R_{54})$ 이고, X_{55} 는 N 또는 $C(R_{55})$ 이고, X_{56} 은 N 또는 $C(R_{56})$ 이고, X_{57} 은 N 또는 $C(R_{57})$ 이고, X_{58} 은 N 또는 $C(R_{58})$ 이고, X_{59} 는 N 또는 $C(R_{59})$ 이고;

R_{51} 내지 R_{60} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 실롤일기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 벤조실롤일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, -Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}), -N(Q_{31})(Q_{32}), -B(Q_{31})(Q_{32}), -C(=O)(Q_{31}), -S(=O)(Q_{31}), -S(=O)₂(Q_{31}), -P(=O)(Q_{31})(Q_{32}) 및 -P(=S)(Q_{31})(Q_{32}) 중에서 선택되고;

Q_1 내지 Q_3 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{60} 알킬기, 페닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고;

b_{51} 은 1, 2, 3, 4 및 5 중에서 선택되고;

b_{52} 는 1, 2, 3, 4, 5, 6 및 7 중에서 선택되고;

b_{53} 은 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 및 9 중에서 선택되고;

[0128] b54는 1, 2, 3 및 4 중에서 선택되고;

[0129] b55는 1, 2 및 3 중에서 선택되고;

[0130] b56은 1 및 2 중에서 선택되고;

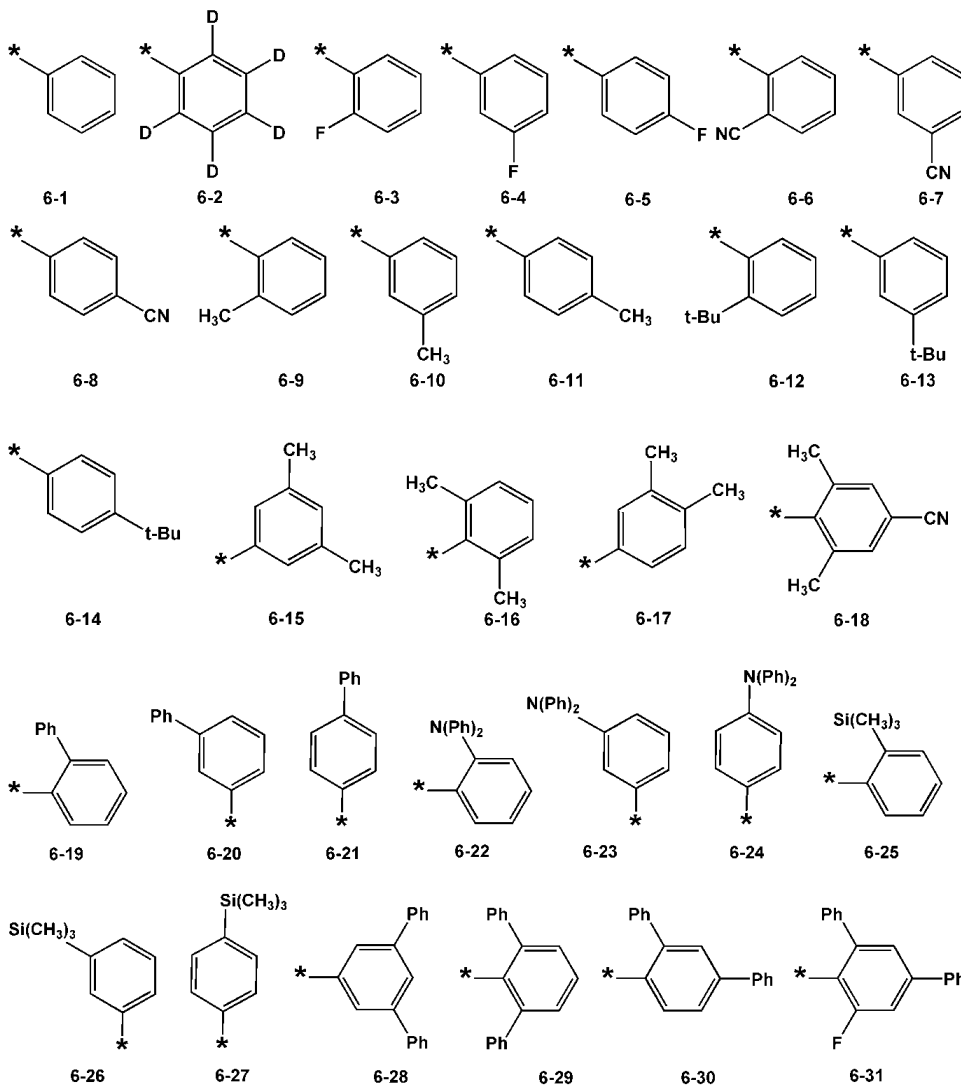
[0131] b57은 1, 2, 3, 4, 5 및 6 중에서 선택되고;

[0132] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

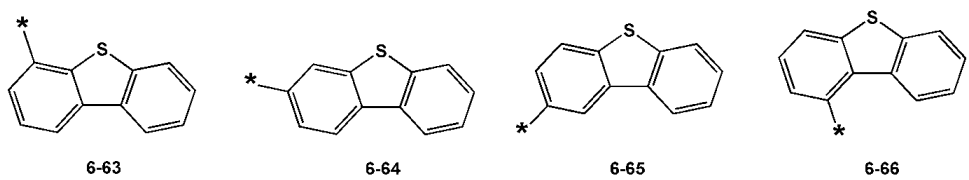
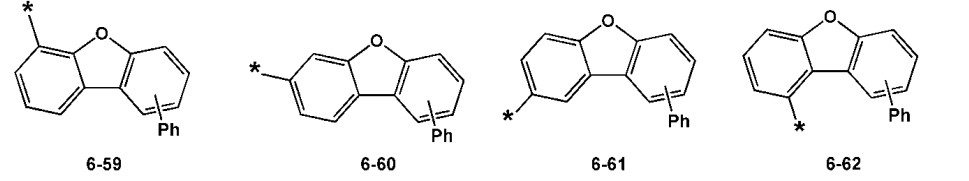
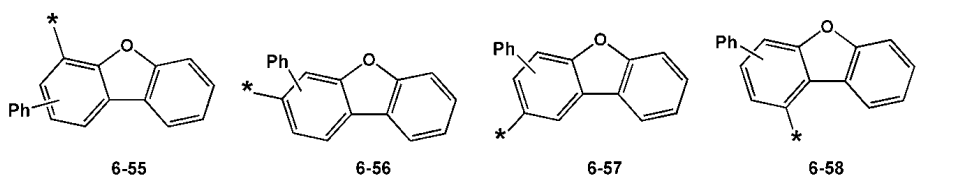
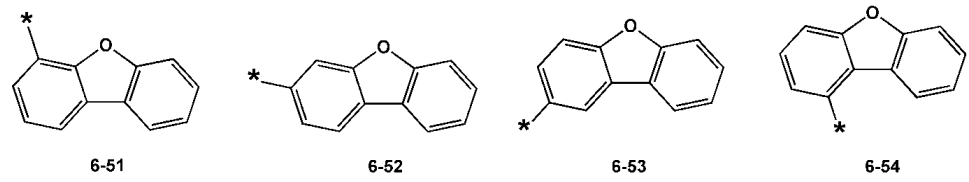
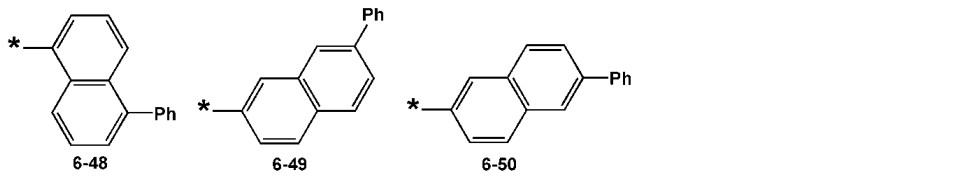
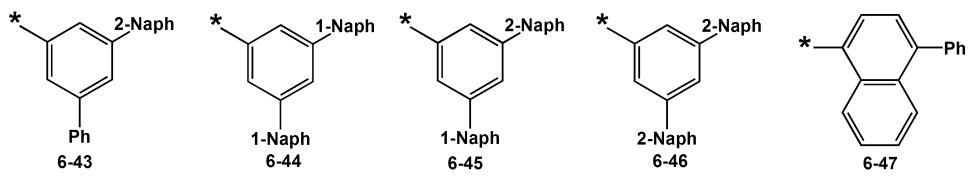
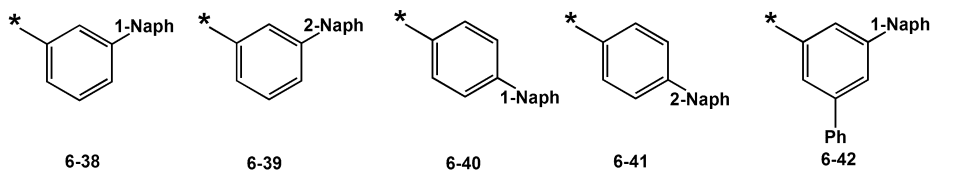
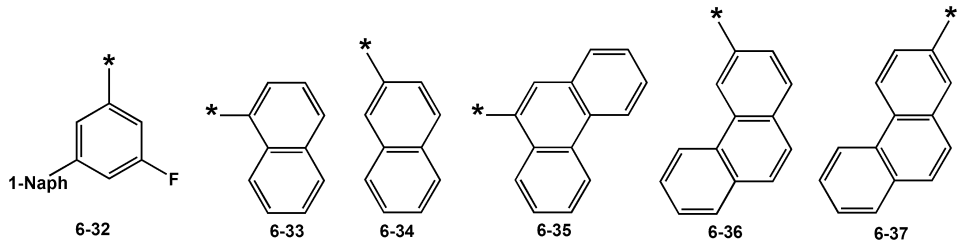
[0133] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1-1 중, R₁₁ 내지 R₁₄, R₁₇ 및 R₁₈은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기;

[0134] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기; 및

[0135] 하기 화학식 6-1 내지 6-257로 표시되는 기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0137]

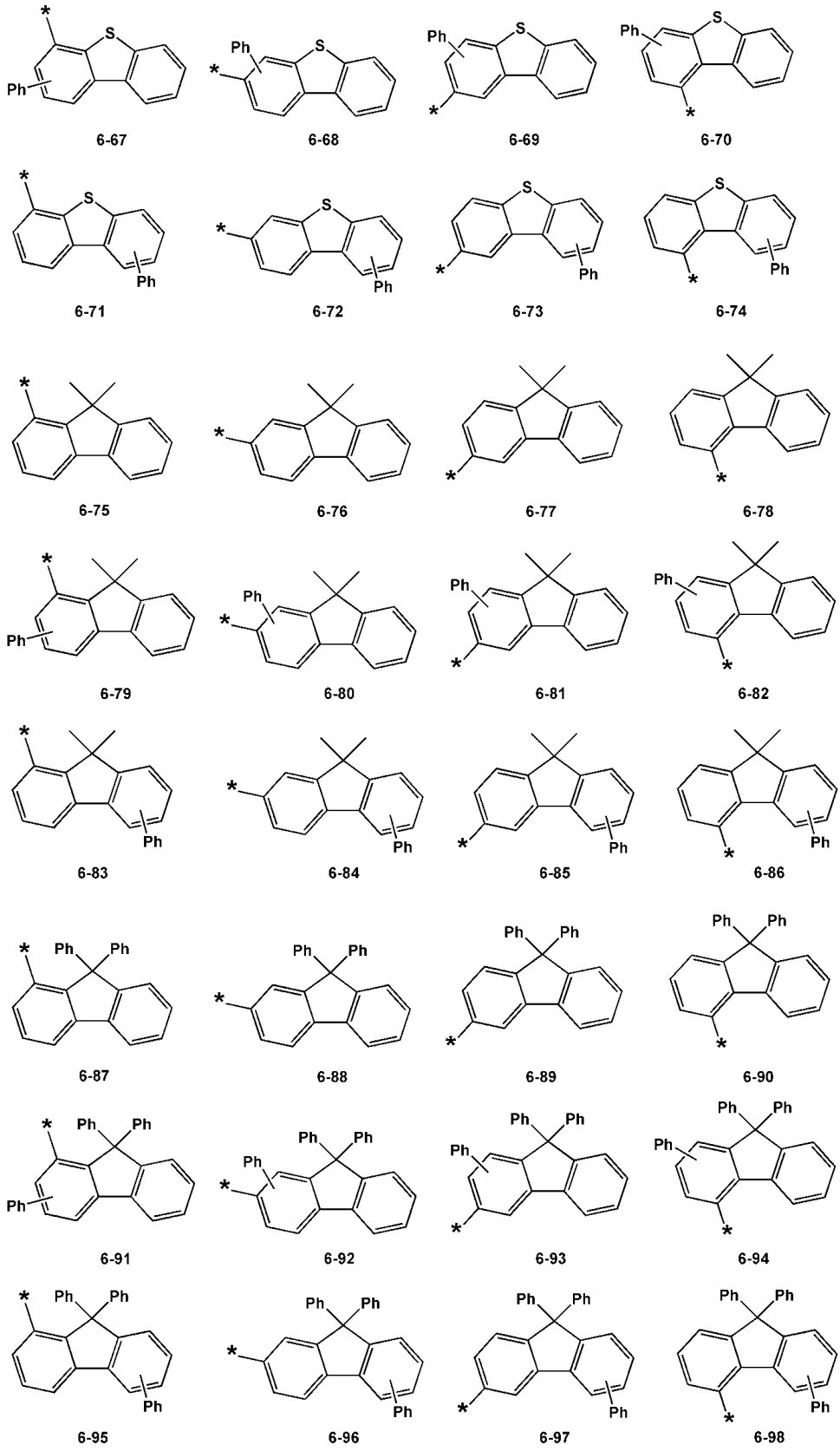


[0138]

[0139]

[0140]

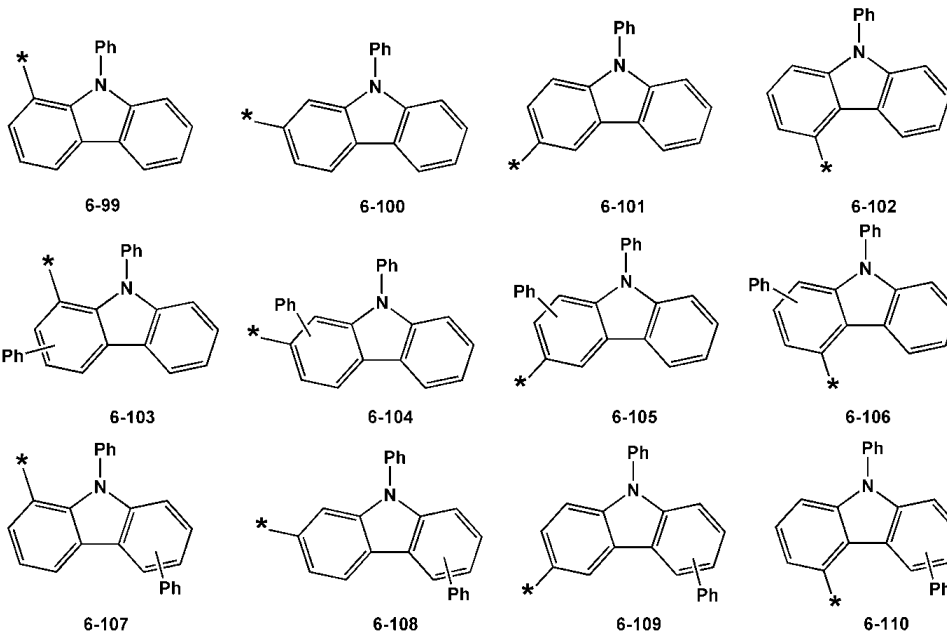
[0141]



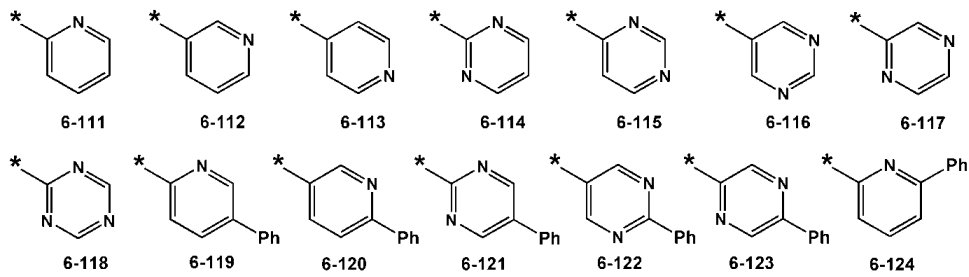
[0142]

[0143]

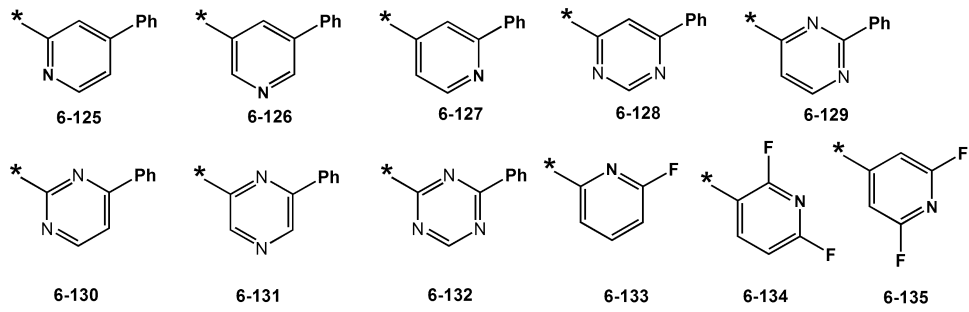
[0144]



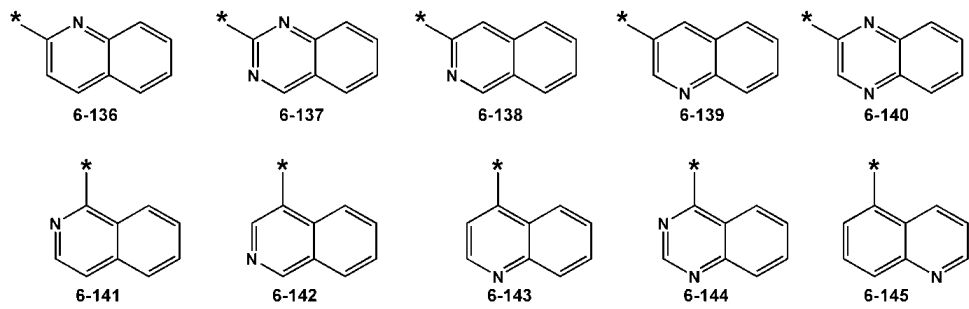
[0145]



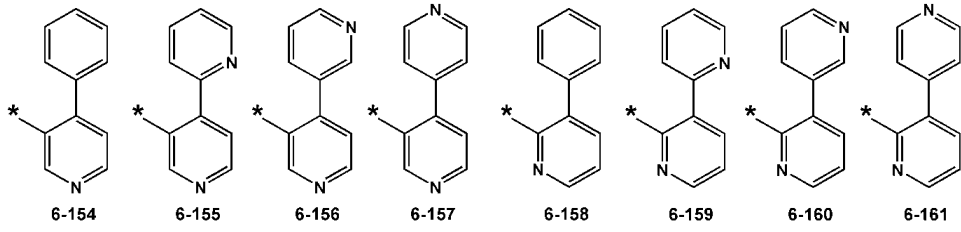
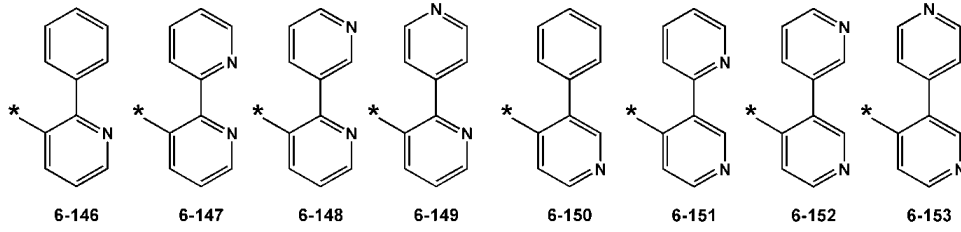
[0146]



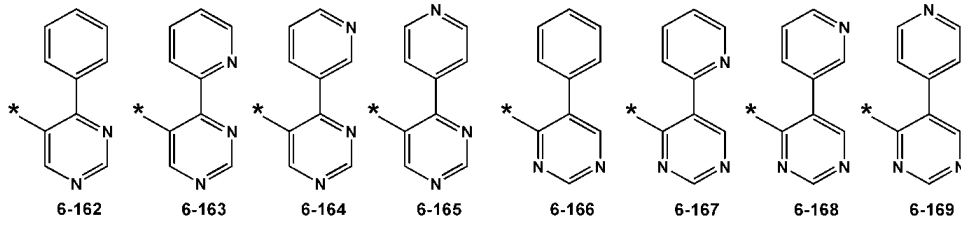
[0147]



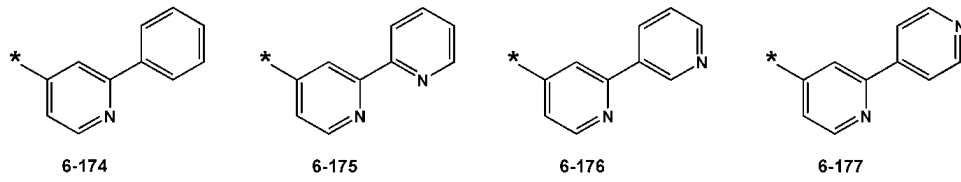
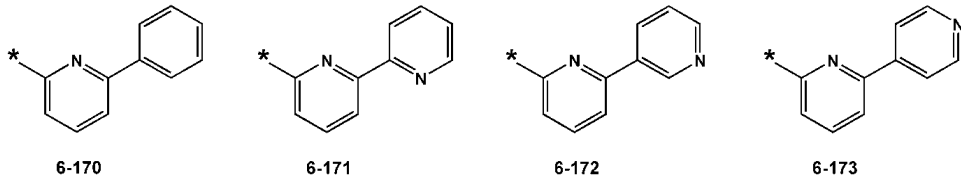
[0148]



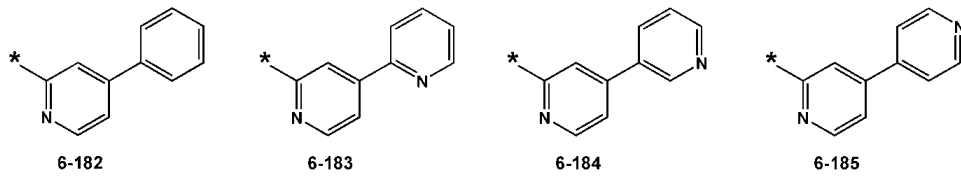
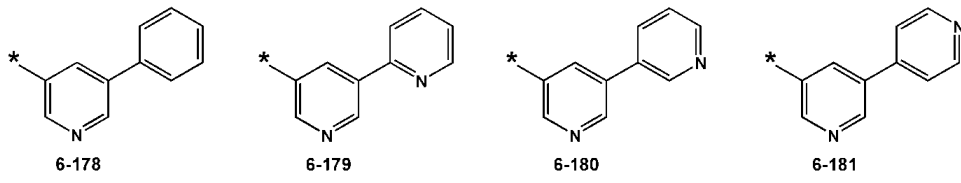
[0149]



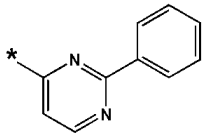
[0150]



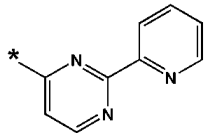
[0151]



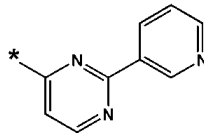
[0152]



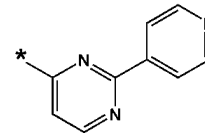
6-186



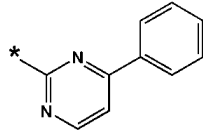
6-187



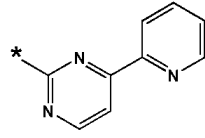
6-188



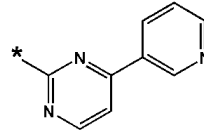
6-189



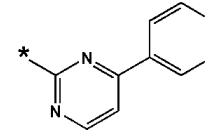
6-190



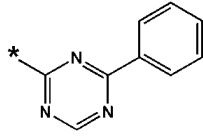
6-191



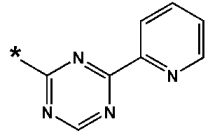
6-192



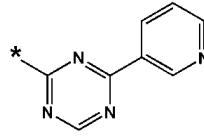
6-193



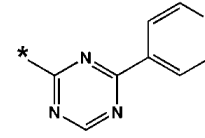
6-194



6-195

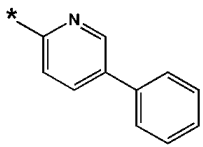


6-196

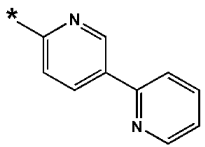


6-197

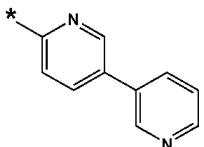
[0153]



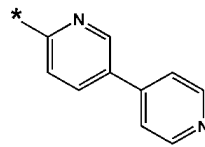
6-198



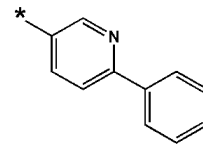
6-199



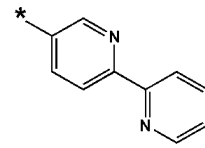
6-200



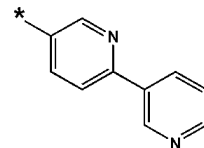
6-201



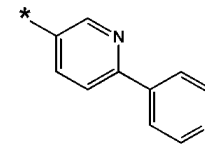
6-202



6-203

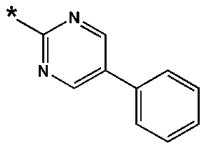


6-204

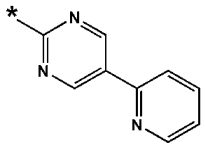


6-205

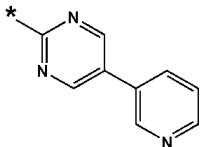
[0154]



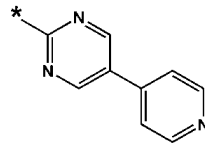
6-206



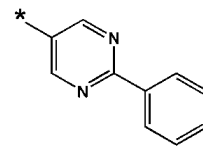
6-207



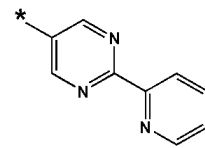
6-208



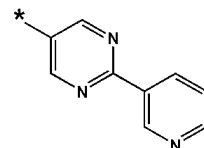
6-209



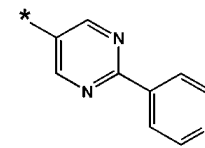
6-210



6-211

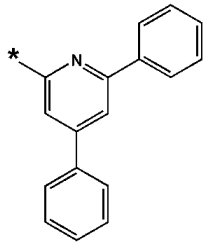


6-212

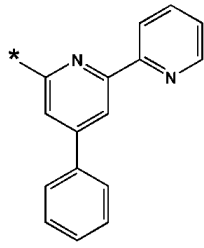


6-213

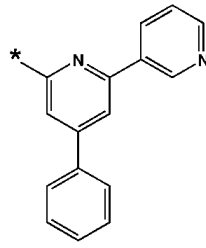
[0155]



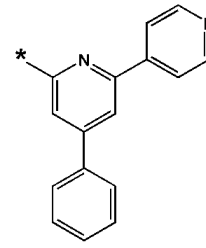
6-214



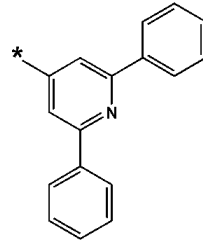
6-215



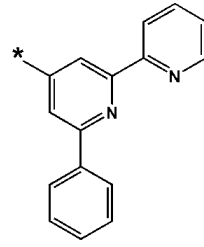
6-216



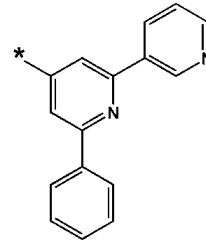
6-217



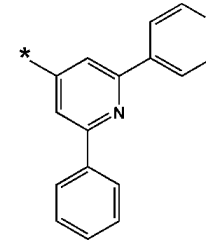
6-218



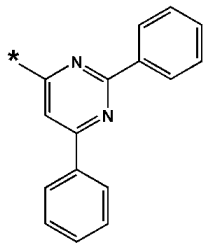
6-219



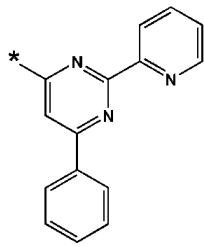
6-220



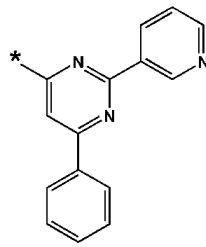
6-221



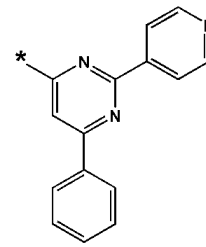
6-222



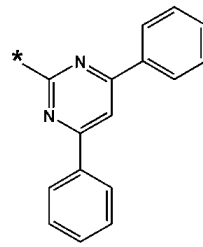
6-223



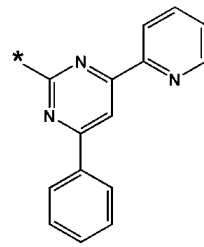
6-224



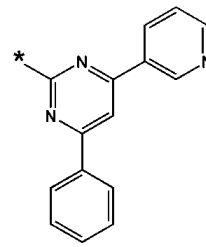
6-225



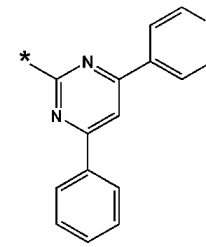
6-226



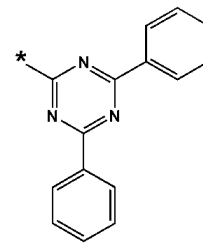
6-227



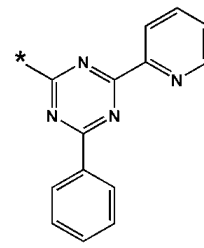
6-228



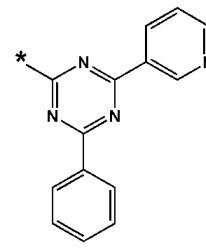
6-229



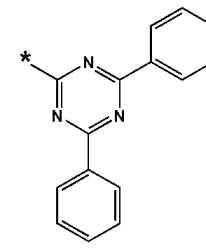
6-230



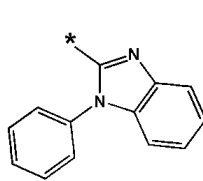
6-231



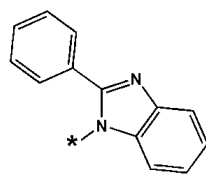
6-232



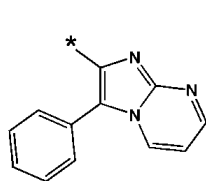
6-233



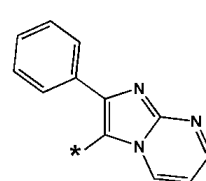
6-234



6-235



6-236

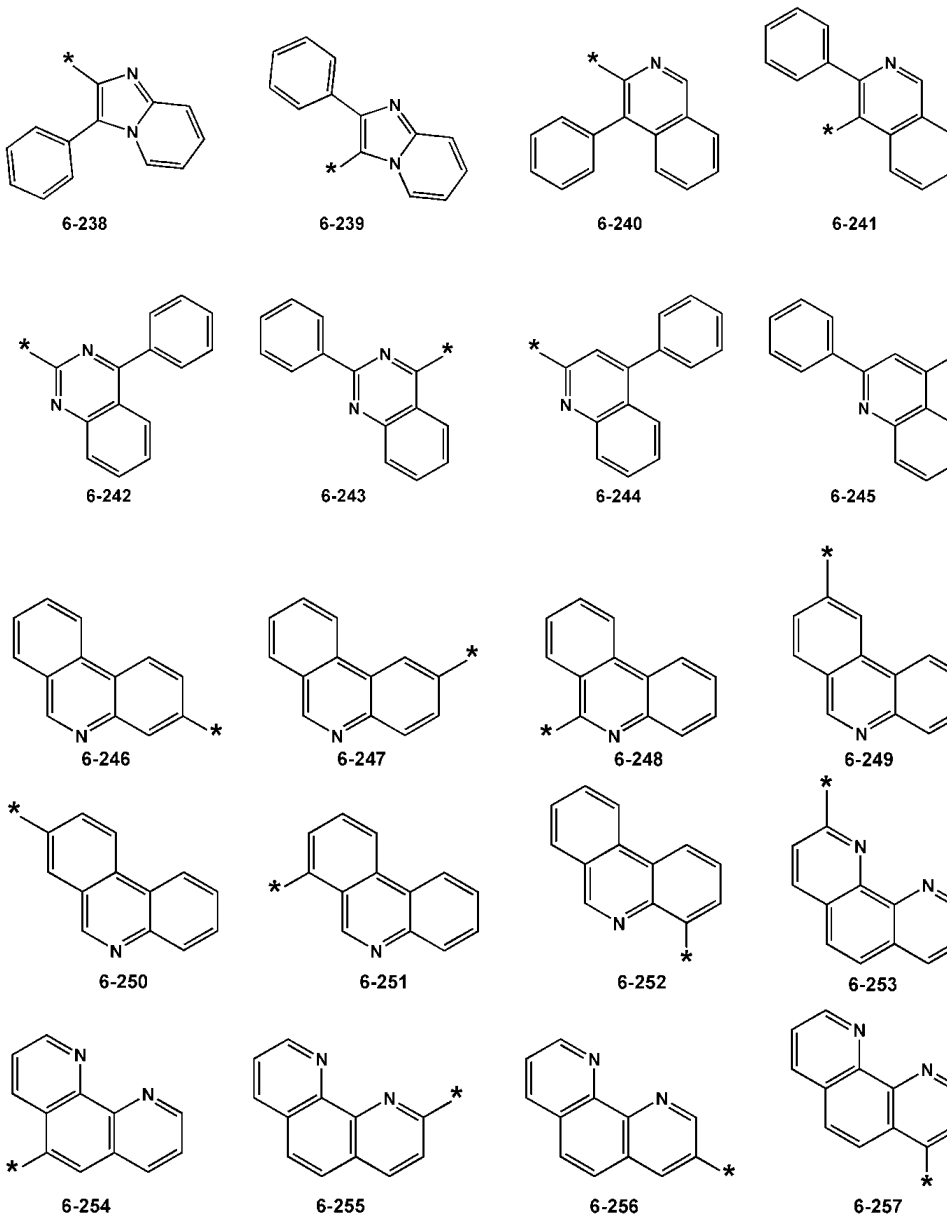


6-237

[0156]

[0157]

[0158]



[0159]

[0160]

[0161]

[0162]

[0163]

[0164]

[0165]

[0166]

[0167]

[0168]

[0169]

[0170]

[0171]

상기 화학식 6-1 내지 6-257 중,

t-Bu은 tert-부틸기이고;

Ph는 페닐기이고;

1-Naph는 1-나프틸기이고;

2-Naph는 2-나프틸기이고;

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

상기 화학식 1-1 중, b11 내지 b14는 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 중에서 선택될 수 있다.

상기 화학식 2-1 및 2-2 중, X_{21} 은 O, S, $N(R_{24})$ 및 $C(R_{24})(R_{25})$ 중에서 선택될 수 있고;

R_{24} 및 R_{25} 에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다.

예를 들어, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, X_{21} 은 $N(R_{24})$ 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

상기 화학식 2-1 및 2-2 중, X_{22} 내지 X_{25} 는 서로 독립적으로, N 및 C 중에서 선택될 수 있다.

- [0172] 예를 들어, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, X_{22} 내지 X_{25} 는 C일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0173] 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, A_{21} 및 A_{22} 는 서로 독립적으로, C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0174] 예를 들어, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, A_{21} 및 A_{22} 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 페날렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹 및 퀴나졸린 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0175] 다른 예로서, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, A_{21} 및 A_{22} 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 페날렌 그룹, 피리딘 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0176] 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, R_{21} 내지 R_{25} 는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되
되;
- [0177] R_{21} 내지 R_{25} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,
- [0178] Q_1 내지 Q_3 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0179] 예를 들어, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, R_{21} 내지 R_{25} 는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0180] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0181] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오페닐기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포라닐기, 디나프토티오페닐기, 디나프토실롤

일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기;

[0182] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 벤조퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토피라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁), -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -P(=S)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 벤조퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토피라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기; 및

[0183] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고;

[0184] Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0185] 다른 예로서, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기;

[0186] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기;

[0187] 상기 화학식 5-1 내지 5-138로 표시되는 기; 및

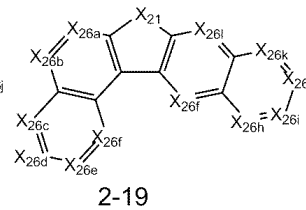
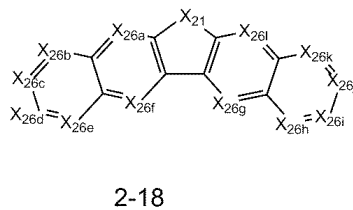
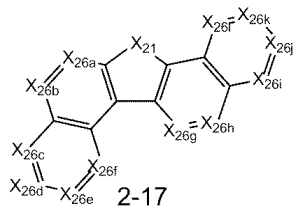
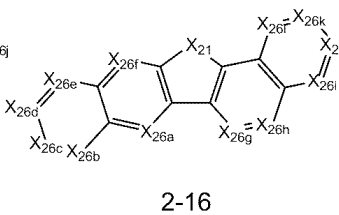
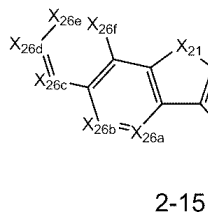
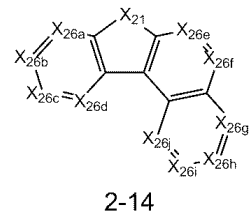
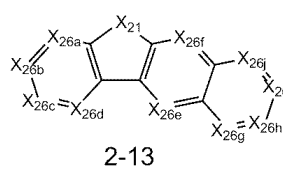
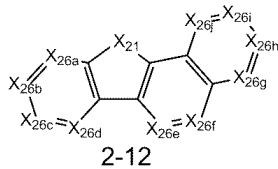
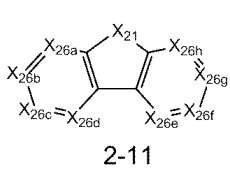
[0188] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0189] 또 다른 예로서, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기;

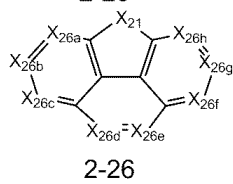
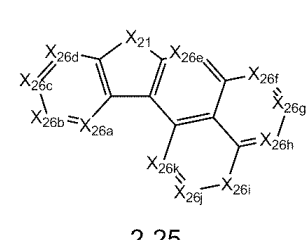
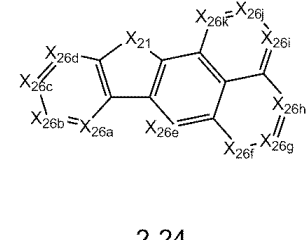
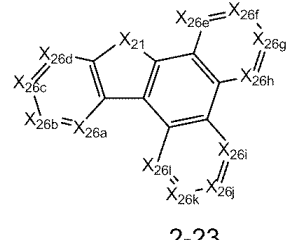
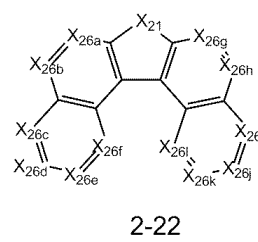
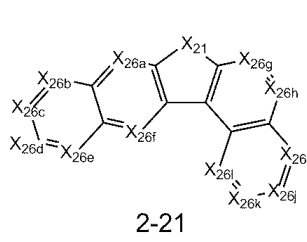
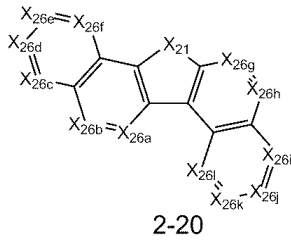
[0190] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기; 및

[0191] 상기 화학식 6-1 내지 6-257로 표시되는 기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0192] 일 실시예에 있어서, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹은 서로 독립적으로, 하기 화학식 2-11 내지 2-26 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0193]



[0194]

상기 화학식 2-11 내지 2-26 중,

[0195]

X₂₁은 O, S, N(R₂₄) 및 C(R₂₄)(R₂₅) 중에서 선택되고;

[0196]

[0197]

X_{26a}는 N, N-* 또는 C(R_{26a})이고, X_{26b}는 N, N-* 또는 C(R_{26b})이고, X_{26c}는 N, N-* 또는 C(R_{26c})이고, X_{26d}는 N, N-* 또는 C(R_{26d})이고, X_{26e}는 N, N-* 또는 C(R_{26e})이고, X_{26f}는 N, N-* 또는 C(R_{26f})이고, X_{26g}는 N, N-* 또는 C(R_{26g})이고, X_{26h}는 N, N-* 또는 C(R_{26h})이고, X_{26i}는 N, N-* 또는 C(R_{26i})이고, X_{26j}는 N, N-* 또는 C(R_{26j})이고, X_{26k}는 N, N-* 또는 C(R_{26k})이고, X_{26l}는 N, N-* 또는 C(R_{26l})이고,

[0198]

R₂₄, R₂₅ 및 R_{26a} 내지 R_{26l}은 서로 독립적으로, 상기 화학식 2-1 및 2-2 중의 R₂₁의 정의를 참조하고;

[0199]

상기 화학식 2-11 중, R₂₄, R₂₅ 및 R_{26a} 내지 R_{26h} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

[0200]

상기 화학식 2-12 내지 2-14 중, R₂₄, R₂₅ 및 R_{26a} 내지 R_{26j} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

[0201]

상기 화학식 2-15 내지 2-23 중, R₂₄, R₂₅ 및 R_{26a} 내지 R_{26l} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

[0202]

상기 화학식 2-24 및 2-25 중, R₂₄, R₂₅ 및 R_{26a} 내지 R_{26k} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

[0203]

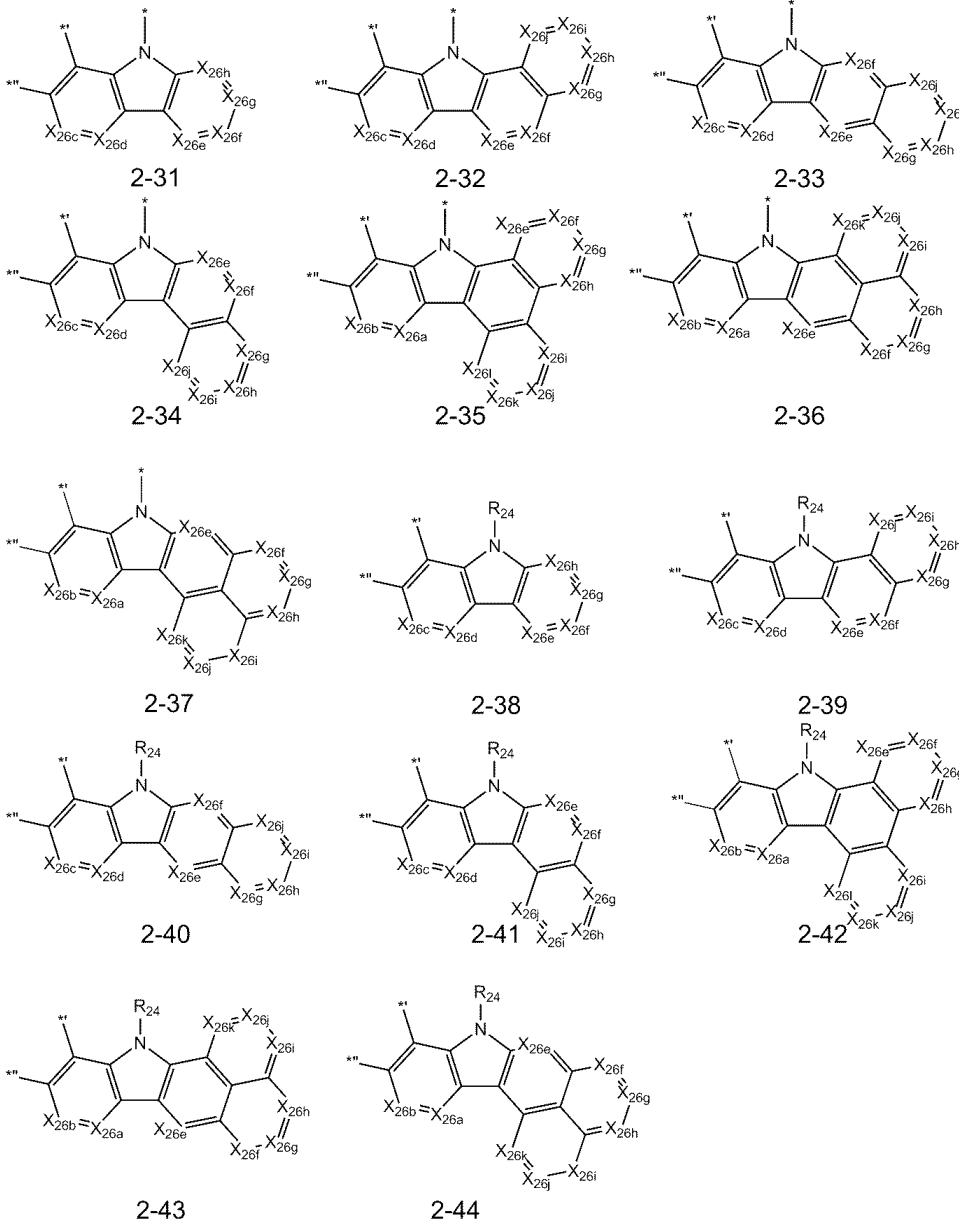
상기 화학식 2-26 중, R₂₄, R₂₅ 및 R_{26a} 내지 R_{26h} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,

[0204]

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0205]

또 다른 실시예에 있어서, 상기 화학식 2-1로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 2-2로 표시되는 그룹은 서로 독립적으로, 하기 화학식 2-31 내지 2-44 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0206]

[0207]

[0208]

[0209]

[0210]

[0211]

상기 화학식 2-31 내지 2-44 중,

X_{26c} 는 N 또는 $C(R_{26c})$ 이고, X_{26d} 는 N 또는 $C(R_{26d})$ 이고, X_{26e} 는 N 또는 $C(R_{26e})$ 이고, X_{26f} 는 N 또는 $C(R_{26f})$ 이고, X_{26g} 는 N 또는 $C(R_{26g})$ 이고, X_{26h} 는 N 또는 $C(R_{26h})$ 이고, X_{26i} 는 N 또는 $C(R_{26i})$ 이고, X_{26j} 는 N 또는 $C(R_{26j})$ 이고, X_{26k} 는 N 또는 $C(R_{26k})$ 이고, X_{26l} 는 N 또는 $C(R_{26l})$ 이고,

R_{26c} 내지 R_{26l} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q_1)(Q_2)(Q_3), -B(Q_1)(Q_2), -N(Q_1)(Q_2), -P(Q_1)(Q_2), -C(=O)(Q_1), -S(=O)(Q_1), -S(=O)₂(Q_1), -P(=O)(Q_1)(Q_2) 및 -P(=S)(Q_1)(Q_2) 중에서 선택되고;

- [0212] Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 티페닐기 중에서 선택되고;
- [0213] *, *' 및 *"은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0214] 상기 화학식 3-1 및 3-2 중, X₃₁은 N, N-* 또는 C(R₃₁)이고, X₃₂는 N, N-* 또는 C(R₃₂)이고, X₃₃은 N, N-* 또는 C(R₃₃)이고, X₃₄는 N, N-* 또는 C(R₃₄)이고, X₃₅는 N, N-* 또는 C(R₃₅)이고, X₃₆은 N, N-* 또는 C(R₃₆)이고, X₃₇은 N, N-* 또는 C(R₃₇)이고, X₃₈은 N, N-* 또는 C(R₃₈)이고,
- [0215] X₃₁ 내지 X₃₄ 중 2 이상은 N 또는 N-*이고,
- [0216] X₃₅ 내지 X₃₈ 중 1 이상은 N 또는 N-*일 수 있다.
- [0217] 예를 들어, 상기 화학식 3-1 중,
- [0218] X₃₁ 및 X₃₂가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;
- [0219] X₃₁ 및 X₃₃이 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;
- [0220] X₃₁ 및 X₃₄가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;
- [0221] X₃₂ 및 X₃₃이 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;
- [0222] X₃₂ 및 X₃₄가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나; 또는
- [0223] X₃₃ 및 X₃₄가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이고;
- [0224] 상기 화학식 3-2 중,
- [0225] X₃₅가 N 또는 N-*이거나;
- [0226] X₃₆이 N 또는 N-*이거나;
- [0227] X₃₇이 N 또는 N-*이거나; 또는
- [0228] X₃₈이 N 또는 N-*일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0229] 상기 화학식 3-1 중, A₃₁은 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0230] 예를 들어, 상기 화학식 3-1 중, A₃₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 페날렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로헥타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 인데노피리딘 그룹, 인돌로피리딘 그룹, 벤조퓨로피리딘 그룹, 벤조티에노피리딘 그룹, 벤조실롤로피리딘 그룹, 인데노피리미딘 그룹, 인돌로피리미딘 그룹, 벤조퓨로피리미딘 그룹, 벤조티에노피리미딘 그룹, 벤조실롤로피리미딘 그룹, 디히드로피리딘 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 2,3-디하이드로이미다졸(2,3-dihydroimidazole) 그룹, 트리아졸 그룹, 2,3-디하이드로트리아졸(2,3-dihydrotriazole) 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 2,3-디하이드로벤즈이미다졸(2,3-dihydrobenzimidazole) 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피리딘(2,3-dihydroimidazopyridine) 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 2,3-디하이드

로이미다조피리미딘(2,3-dihydroimidazopyrimidine) 그룹, 이미다조피라진 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피라진(2,3-dihydroimidazopyrazine) 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0231] 다른 예로서, 상기 화학식 3-1 중, A₃₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 페날렌 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 인데노피리딘 그룹, 인돌로피리딘 그룹, 벤조퓨로피리딘 그룹, 벤조티에노피리딘 그룹, 인데노피리미딘 그룹, 인돌로피리미딘 그룹, 벤조퓨로피리미딘 그룹, 벤조티에노피리미딘 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹 및 벤즈이미다졸 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0232] 또 다른 예로서, 상기 화학식 3-1 중, A₃₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0233] 상기 화학식 3-2 중, A₃₂는 적어도 하나의 N 포함-C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0234] 예를 들어, 상기 화학식 3-2 중, A₃₂는 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 인데노피리딘 그룹, 인돌로피리딘 그룹, 벤조퓨로피리딘 그룹, 벤조티에노피리딘 그룹, 벤조실롤로피리딘 그룹, 인데노피리미딘 그룹, 인돌로피리미딘 그룹, 벤조퓨로피리미딘 그룹, 벤조티에노피리미딘 그룹, 벤조실롤로피리미딘 그룹, 디히드로피리딘 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 2,3-디하이드로이미다졸(2,3-dihydroimidazole) 그룹, 트리아졸 그룹, 2,3-디하이드로트리아졸(2,3-dihydrotriazole) 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 2,3-디하이드로벤즈이미다졸(2,3-dihydrobenzimidazole) 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피리딘(2,3-dihydroimidazopyridine) 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피리미딘(2,3-dihydroimidazopyrimidine) 그룹, 이미다조피라진 그룹, 2,3-디하이드로이미다조피라진(2,3-dihydroimidazopyrazine) 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0235] 다른 예로서, 상기 화학식 3-2 중, A₃₂는 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 인데노피리딘 그룹, 인돌로피리딘 그룹, 벤조퓨로피리딘 그룹, 벤조티에노피리딘 그룹, 인데노피리미딘 그룹, 인돌로피리미딘 그룹, 벤조퓨로피리미딘 그룹, 벤조티에노피리미딘 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 벤조이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴녹살린 그룹, 벤조퀴나졸린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹 및 벤즈이미다졸 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0236] 또 다른 예로서, 상기 화학식 3-2 중, A₃₂는 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0237] 일 실시예에 있어서, 상기 화학식 3-1 중,

[0238] X₃₁ 및 X₃₂가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;

[0239] X₃₁ 및 X₃₃이 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;

[0240] X₃₁ 및 X₃₄가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;

- [0241] X_{32} 및 X_{33} 이 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나;
- [0242] X_{32} 및 X_{34} 가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이거나; 또는
- [0243] X_{33} 및 X_{34} 가 서로 독립적으로, N 또는 N-*이고;
- [0244] A_{31} 은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택되고;
- [0245] 상기 화학식 3-2 중,
- [0246] X_{35} 가 N 또는 N-*이거나;
- [0247] X_{36} 이 N 또는 N-*이거나;
- [0248] X_{37} 이 N 또는 N-*이거나; 또는
- [0249] X_{38} 이 N 또는 N-*이고;
- [0250] A_{32} 는 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0251] 상기 화학식 3-1 및 3-2 중, R_{31} 내지 R_{39} 는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되
되;
- [0252] R_{31} 내지 R_{34} 및 R_{39} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,
- [0253] R_{35} 내지 R_{39} 중 1개, 2개 또는 3개는 결합 사이트이고,
- [0254] Q_1 내지 Q_3 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, C_1-C_{60} 헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60} 헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0255] 예를 들어, 상기 화학식 3-1 및 3-2 중, R_{31} 내지 R_{39} 는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C_1-C_{20} 알킬기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;
- [0256] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;
- [0257] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리

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

[0258] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜텐일기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 벤조퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토피라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁), -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -P(=S)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜텐일기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 벤조퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜일기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토피라닐기, 디나프토티오펜일기, 디나프토실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜일기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기; 및

[0259] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고;

[0260] Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로

기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아틸기, C₁-C₆₀헤테로아틸기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0261] 다른 예로서, 상기 화학식 3-1 및 3-2 중, R₃₁ 내지 R₃₉는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기;

[0262] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기;

[0263] 상기 화학식 5-1 내지 5-13로 표시되는 기; 및

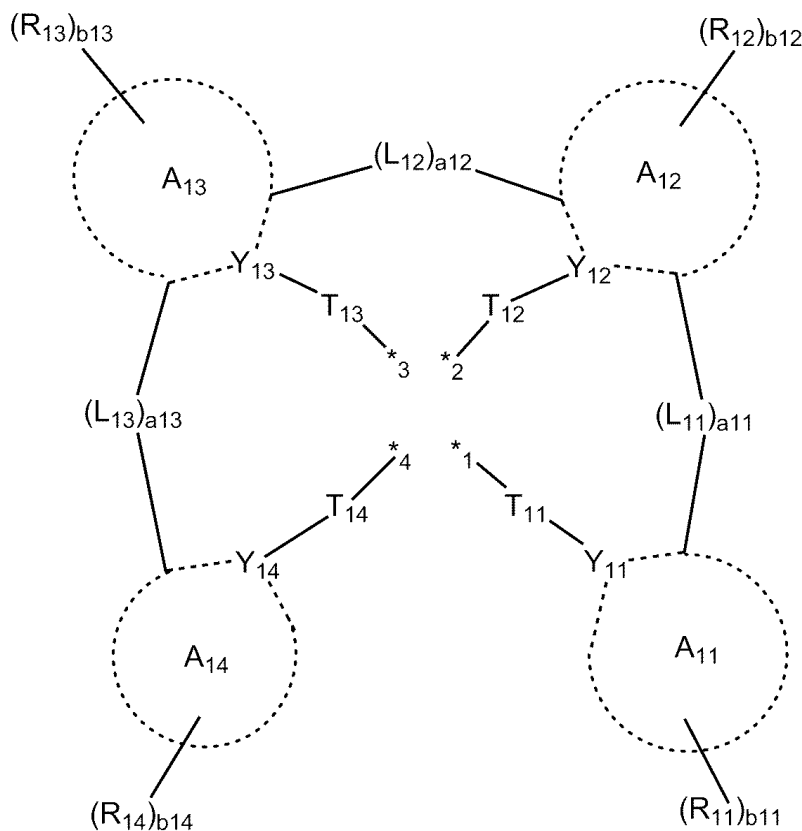
[0264] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0265] 또 다른 예로서, 상기 화학식 3-1 및 3-2 중, R₃₁ 내지 R₃₉는 서로 독립적으로, 결합 사이트, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기;

[0266] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기; 및

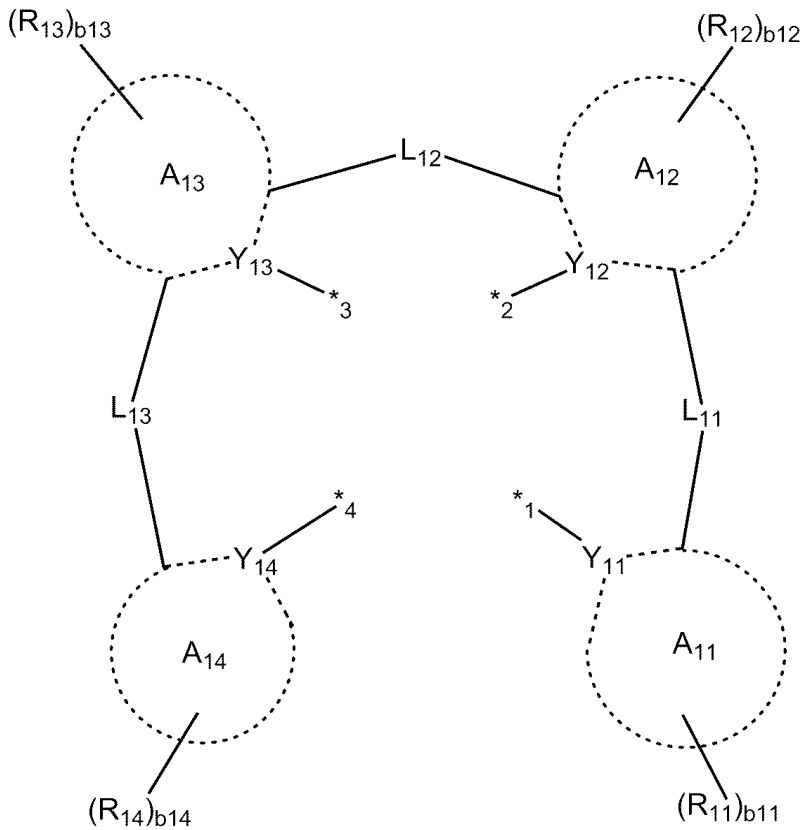
[0267] 상기 화학식 6-1 내지 6-257로 표시되는 기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0268] 일 실시예에 있어서, 상기 화학식 1 중, L₁은 하기 화학식 1-11로 표시되는 리간드일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0269] 상기 화학식 1-11 중,
 [0270] *1 내지 *4, A₁₁ 내지 A₁₄, Y₁₁ 내지 Y₁₄, T₁₁ 내지 T₁₄, L₁₁ 내지 L₁₃, a₁₁ 내지 a₁₃, R₁₁ 내지 R₁₄ 및 b₁₁ 내지 b₁₄에 대한 설명은 상기 화학식 1-1을 참조한다.

[0272] 다른 실시예에 있어서, 상기 화학식 1 중, L₁은 하기 화학식 1-21로 표시되는 리간드일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

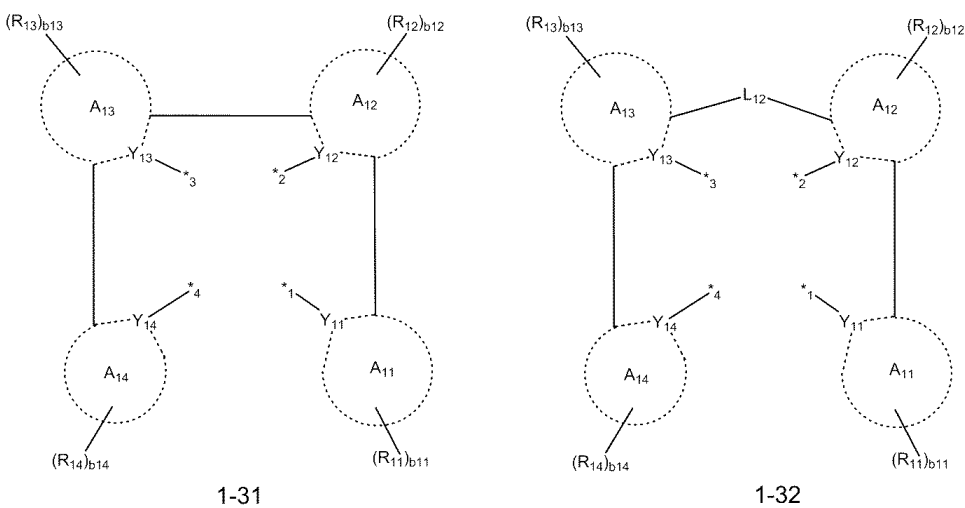


[0273]

[0274] 상기 화학식 1-21 중,

[0275] *1 내지 *4, A₁₁ 내지 A₁₄, Y₁₁ 내지 Y₁₄, L₁₁ 내지 L₁₃, R₁₁ 내지 R₁₄ 및 b₁₁ 내지 b₁₄에 대한 설명은 상기 화학식 1-1을 참조한다.

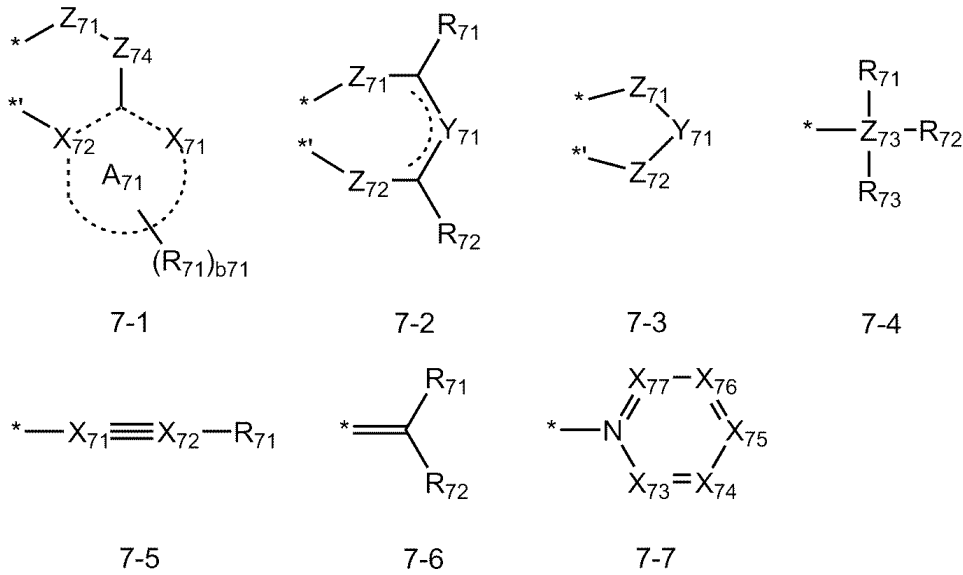
[0276] 또 다른 실시예에 있어서, 상기 화학식 1 중, L₁은 하기 화학식 1-31 또는 1-32로 표시되는 리간드일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



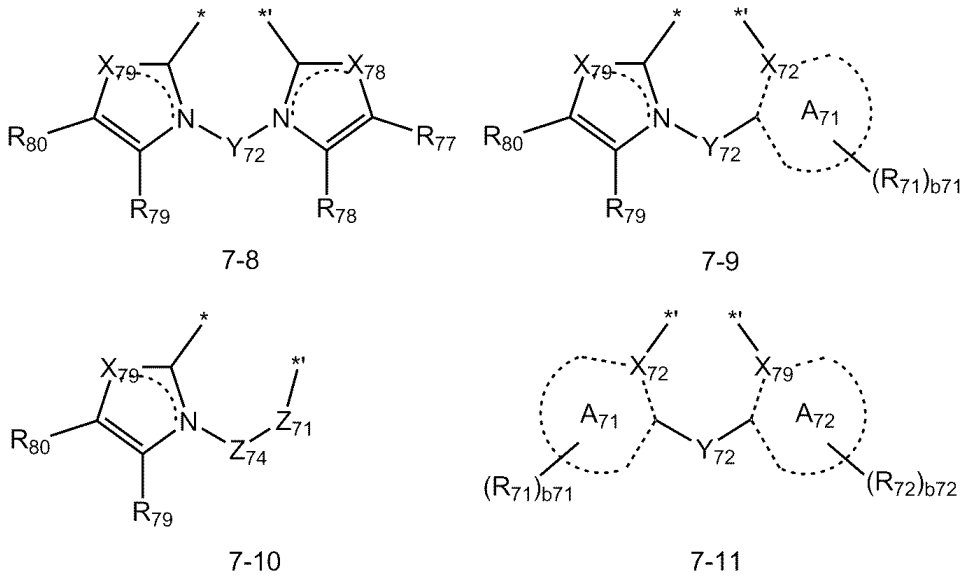
[0277]

[0278] 상기 화학식 1-31 및 1-32 중, *1 내지 *4, A₁₁ 내지 A₁₄, Y₁₁ 내지 Y₁₄, L₁₂ R₁₁ 내지 R₁₄ 및 b₁₁ 내지 b₁₄에 대한 설명은 상기 화학식 1-1을 참조한다.

[0279] 한편, 상기 화학식 1 중, L₂는 하기 화학식 7-1 내지 7-11 중 어느 하나로 표시되는 리간드일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0280]



[0281]

[0282] 상기 화학식 7-1 내지 7-11 중,

[0283] A₇₁ 및 A₇₂는 서로 독립적으로, C₅-C₂₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₂₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

[0284] X₇₁ 및 X₇₂는 서로 독립적으로, C 및 N 중에서 선택되고;

[0285] X₇₃은 N 또는 C(Q₇₃)이고; X₂₄는 N 또는 C(Q₇₄)이고; X₇₅는 N 또는 C(Q₇₅)이고; X₇₆은 N 또는 C(Q₇₆)이고; X₂₇은 N 또는 C(Q₇₇)이고;

[0286] X₇₈은 O, S 또는 N(Q₇₈)이고; X₂₉는 O, S 또는 N(Q₇₉)이고;

[0287] Y₇₁ 및 Y₇₂는 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅알케닐렌기 및 치환 또는 비치환된 C₆-C₁₀아릴렌기 중에서 선택되고;

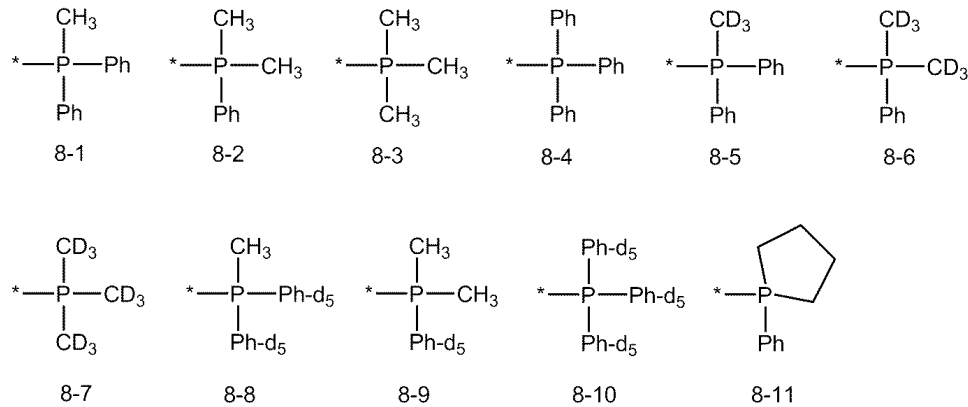
[0288] Z₇₁ 및 Z₇₂는 서로 독립적으로, N, O, N(R₇₅), P(R₇₅)(R₇₆) 및 As(R₇₅)(R₇₆) 중에서 선택되고;

[0289] Z₇₃은 P 및 As 중에서 선택되고;

- [0290] Z₇₄는 CO 및 CH₂ 중에서 선택되고;
- [0291] R₇₁ 내지 R₈₀ 및 Q₇₃ 내지 Q₇₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 중에서 선택되고; R₇₁ 및 R₇₂는 선택적으로 결합하여 고리를 형성할 수 있고; R₇₇ 및 R₇₈은 선택적으로 결합하여 고리를 형성할 수 있고; R₇₈ 및 R₇₉는 선택적으로 결합하여 고리를 형성할 수 있고; R₇₉ 및 R₈₀은 선택적으로 결합하여 고리를 형성할 수 있고;
- [0292] b₇₁ 및 b₇₂는 서로 독립적으로, 1, 2 및 3 중에서 선택되고;
- [0293] * 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0294] 예를 들어, 상기 화학식 7-1 중, A₇₁ 및 A₇₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 이미다졸 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹 및 이소퀴놀린 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0295] 예를 들어, 상기 화학식 7-1 중, X₇₂ 및 X₇₉는 N일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0296] 예를 들어, 상기 화학식 7-7 중, X₇₃는 C(Q₇₃)이고; X₇₄는 C(Q₇₄)이고; X₇₅는 C(Q₇₅)이고; X₇₆는 C(Q₇₆)이고; X₇₇는 C(Q₇₇)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0297] 예를 들어, 상기 화학식 7-8 중, X₇₈는 N(Q₇₈)이고; X₇₉는 N(Q₇₉)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0298] 예를 들어, 상기 화학식 7-2, 7-3 및 7-8 중, Y₇₁ 및 Y₇₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 메틸렌기 및 치환 또는 비치환된 페닐렌기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0299] 예를 들어, 상기 화학식 7-1 및 7-2 중, Z₇₁ 및 Z₇₂는 O일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0300] 예를 들어, 상기 화학식 7-4 중, Z₇₃는 P일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0301] 예를 들어, 상기 화학식 7-1 내지 7-8 중, R₇₁ 내지 R₈₀ 및 Q₇₃ 내지 Q₇₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0302] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0303] 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 이미다조피리디닐기; 및
- [0304] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의

염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 이미다조피리디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 콰이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 및 이미다조피리디닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0305] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, L₂는 하기 화학식 8-1 내지 8-11 중 어느 하나로 표시되는 리간드일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

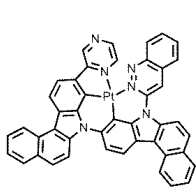


[0306]

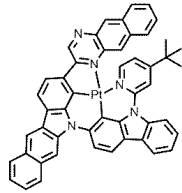
[0307] * 는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0308] 일 실시예에 있어서, 상기 화학식 1 중, n1은 1이고, n2는 0이거나; n1은 1이고, n2는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

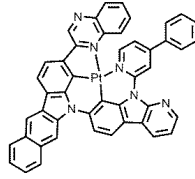
[0309] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 50 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



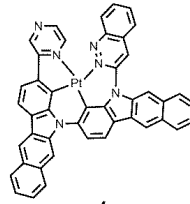
1



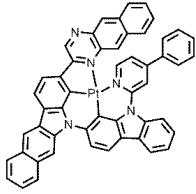
2



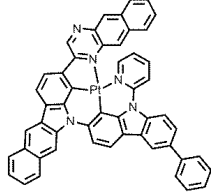
3



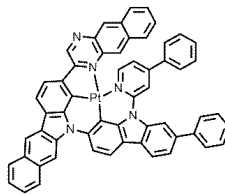
4



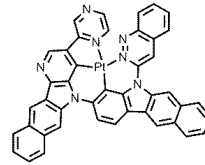
5



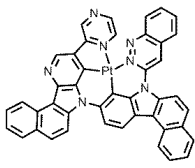
6



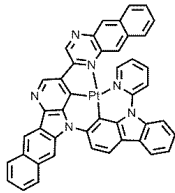
7



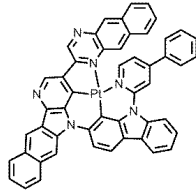
8



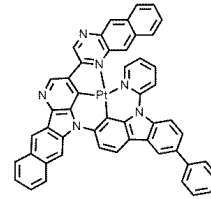
9



10

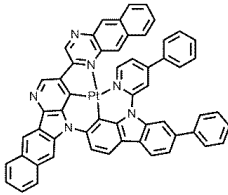


11

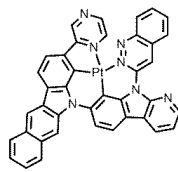


12

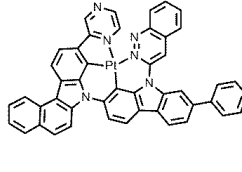
[0310]



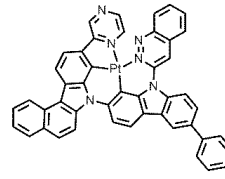
13



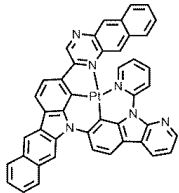
14



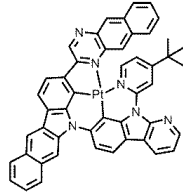
15



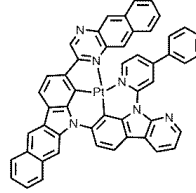
16



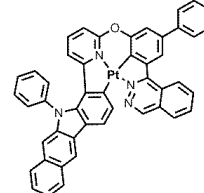
17



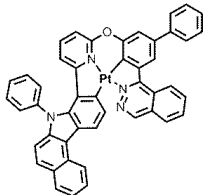
18



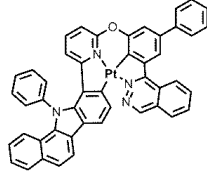
19



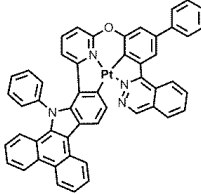
20



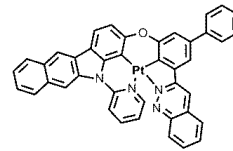
21



22

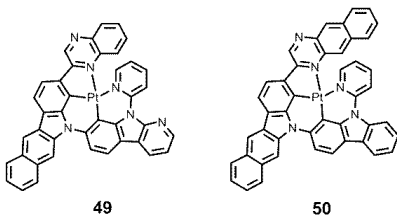
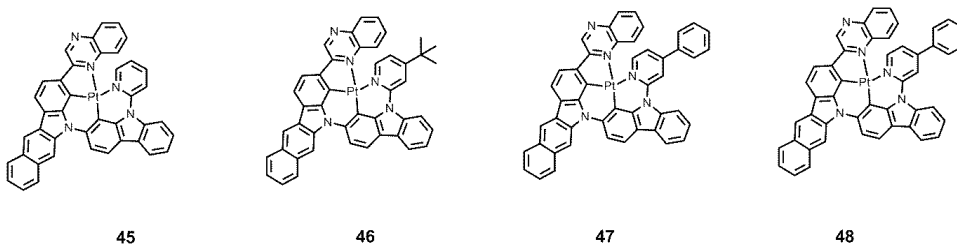
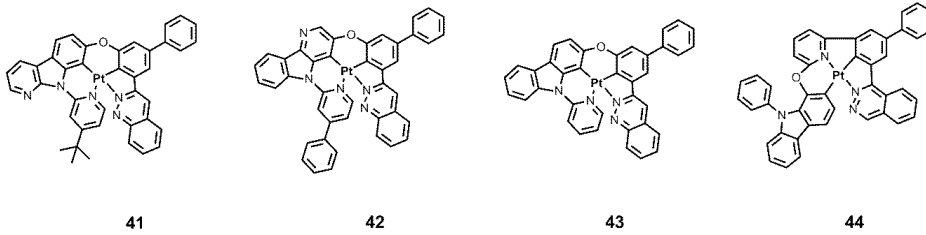
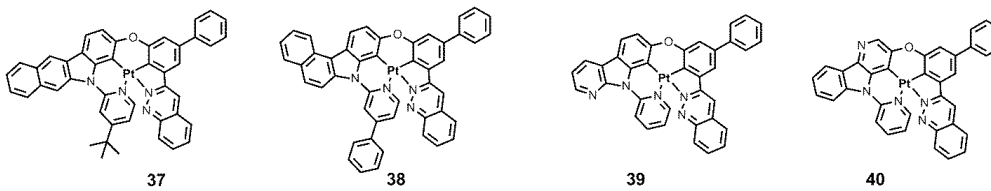
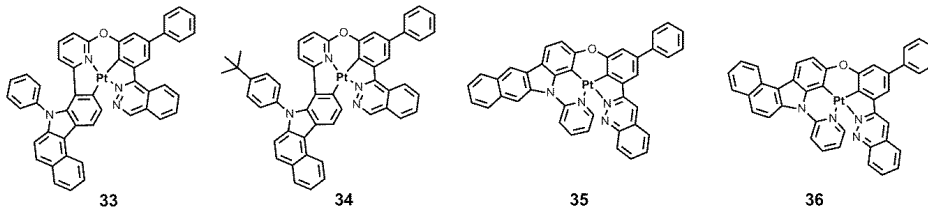
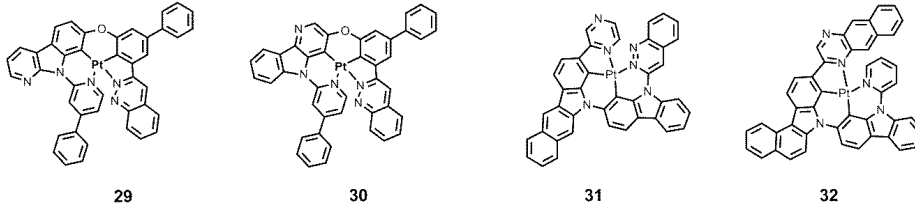
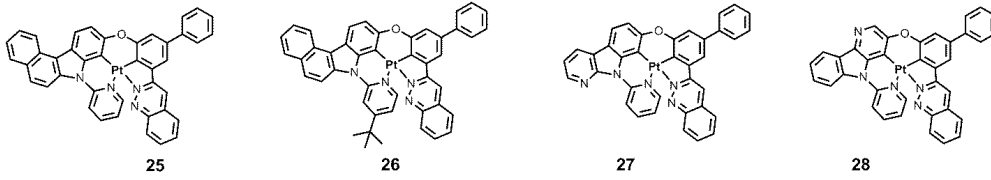


23



24

[0311]



[0312]

[0313]

[0314]

[0315]

[0316]

상기 유기금속 화합물은 예를 들면, 720nm 이상, 720nm 이상 및 2500nm 이하, 750nm 이상 및 2500nm 이하 또는 750nm 이상 및 1500nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 적색광 또는 근적외선(NIR)광을 방출할 수 있다.

일 실시예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 720nm 이상 및 2500nm 또는 750nm 이상 및 1500nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 근적외선광을 방출할 수 있다. 이와 같은 최대 발광 파장 범위를 갖는 근적외선을 방출하는 유기금속 화합물은, 예를 들면, 650nm 이상 및 720nm 미만의 최대 발광 파장을 갖는 적색 가시광선을 방출하는 유

기금속 화합물과는 명백히 구분되는 것이다.

- [0317] 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 720nm 이상, 720nm 이상 및 2500nm 이하, 750nm 이상 및 2500nm 이하 또는 750nm 이상 및 1500nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 적색광 또는 근적외선을 방출하면서, 동시에, 저구동 전압 및 고외부 양자 발광 효율을 가질 수 있다.
- [0318] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0319] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함하는, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0320] 본 명세서 중 "(유기층이) 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 유기금속 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 유기금속 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0321] 예를 들어, 상기 유기층은, 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1은 발광층에 존재하고 상기 화합물 2는 전자 수송 영역에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0322] 일 실시예에 따르면,
- [0323] 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 애노드이고,
- [0324] 상기 유기 발광 소자의 제2전극은 캐소드이고,
- [0325] 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고,
- [0326] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,
- [0327] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0328] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.
- [0329] 일 실시예에 따르면, 상기 발광층에 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물이 포함되어 있을 수 있다. 상기 발광층은 상기 유기금속 화합물 외에, 호스트를 더 포함할 수 있으며, 상기 발광층 중 상기 유기금속 화합물의 함량은 상기 호스트의 함량보다 작을 수 있다.
- [0330] 다른 실시예에 따르면, 상기 정공 수송 영역은 전자 저지층을 포함하고, 상기 전자 저지층에 상기 유기금속 화합물이 포함되어 있거나; 및/또는 상기 전자 수송 영역은 정공 저지층을 포함하고, 상기 정공 저지층에 상기 유기금속 화합물이 포함되어 있을 수 있다.
- [0331] 또 다른 실시예에 따르면, 상기 정공 수송 영역 및 발광층 중 적어도 하나는, 아릴아민-함유 화합물, 아크리딘-함유 화합물 및 카바졸-함유 화합물 중 적어도 하나를 포함하거나; 및/또는
- [0332] 상기 발광층 및 전자 수송 영역 중 적어도 하나는, 실리콘-함유 화합물, 포스핀 옥사이드-함유 화합물 산화황-함유 화합물, 산화인-함유 화합물, 트리아진-함유 화합물, 피리미딘-함유 화합물, 피리딘-함유 화합물, 디벤조퓨란-함유 화합물 및 디벤조티오펜-함유 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0333] [도 1에 대한 설명]
- [0334] 도 1은 본 발명의 일 실시예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 유기 발광 소자(10)는 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)을 포함한다.
- [0335] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 실시예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다

음과 같다.

- [0336] [제1전극(110)]
- [0337] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기관이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기관으로는, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기관 또는 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.
- [0338] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기관 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록, 제1전극용 물질은, 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다.
- [0339] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0340] 상기 제1전극(110)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0341] [유기층(150)]
- [0342] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.
- [0343] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극(110)과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.
- [0344] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]
- [0345] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0346] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.
- [0347] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조를 갖거나, 제1전극(110)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/발광 보조층, 정공 주입층/발광 보조층, 정공 수송층/발광 보조층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 다층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0348] 상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine (4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민)), PANI/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐린/도데실벤젠설포닉산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트))), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄퍼설포닉산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트))), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다:

환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0358] xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0359] xa5는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0360] R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 및 Q₂₀₁은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0361] 예를 들어, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁과 R₂₀₂는, 선택적으로(optionally), 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있고, R₂₀₃과 R₂₀₄는, 선택적으로, 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0362] 일 실시예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,

[0363] L₂₀₁ 내지 L₂₀₅는 서로 독립적으로,

[0364] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴어로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기; 및

[0365] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴어로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴어로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;

[0366] 중에서 선택되고,

[0367] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0368] 다른 실시예에 따르면, xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0369] 또 다른 실시예에 따르면, xa5는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.

[0370] 또 다른 실시예에 따르면, R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 및 Q₂₀₁은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기,

인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및

[0371] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;

[0372] 중에서 선택될 수 있고,

[0373] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0374] 또 다른 실시예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₃ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,

[0375] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및

[0376] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;

[0377] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0378] 또 다른 실시예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R₂₀₁과 R₂₀₂은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R₂₀₃과 R₂₀₄은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0379] 또 다른 실시예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 중 적어도 하나는,

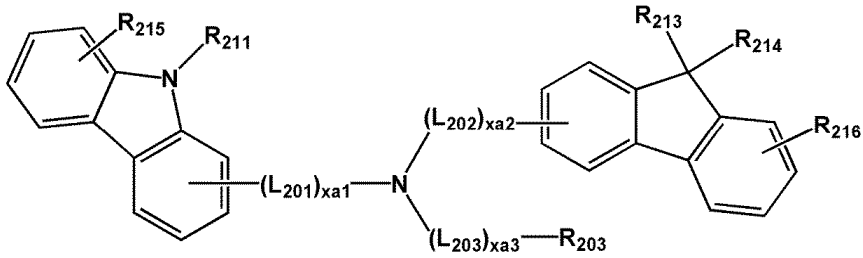
[0380] 카바졸일기; 및

[0381] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;

[0382] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0383] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:

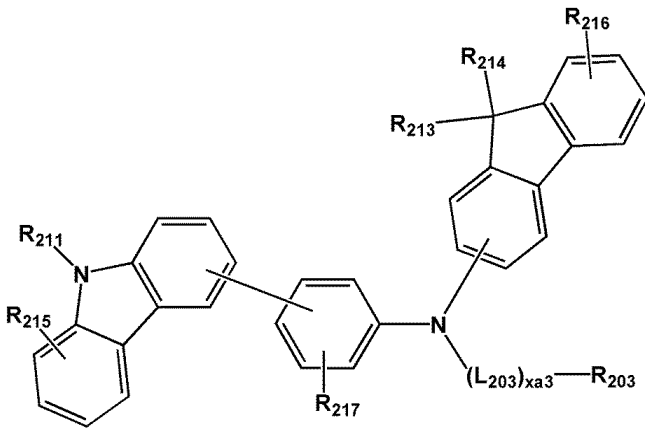
[0384] <화학식 201A>



[0385]

[0386] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

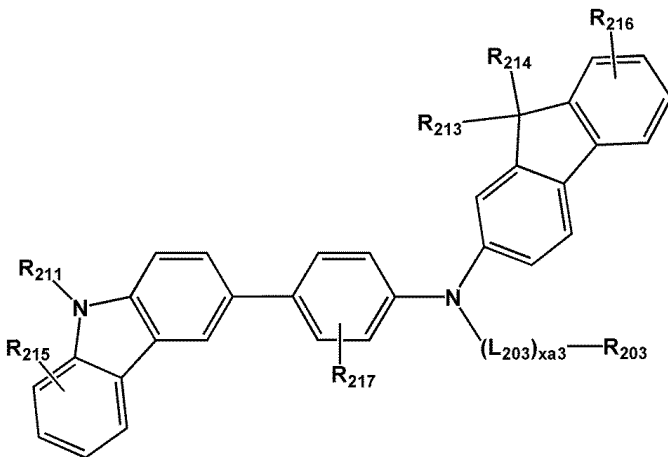
[0387] <화학식 201A(1)>



[0388]

[0389] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

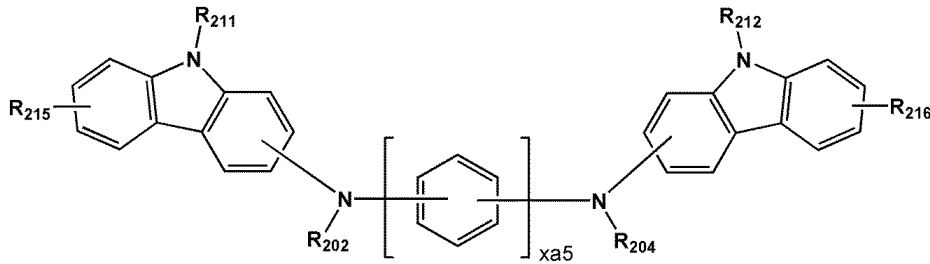
[0390] <화학식 201A-1>



[0391]

[0392] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

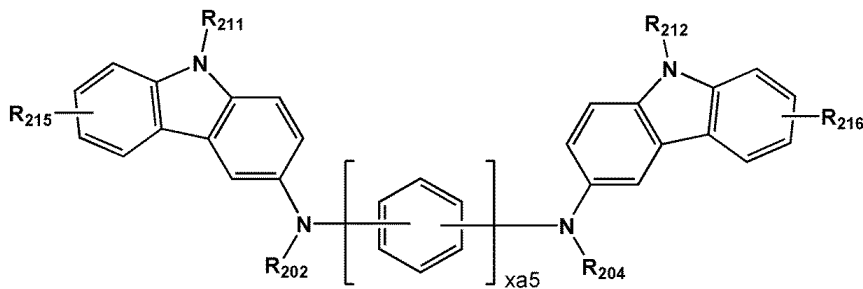
[0393] <화학식 202A>



[0394]

[0395] 또 다른 실시예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0396] <화학식 202A-1>



[0397]

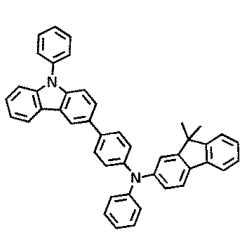
[0398] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

[0399] L₂₀₁ 내지 L₂₀₃, xa1 내지 xa3, xa5 및 R₂₀₂ 내지 R₂₀₄에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

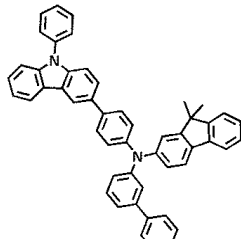
[0400] R₂₁₁ 및 R₂₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀₃에 대한 설명을 참조하고,

[0401] R₂₁₃ 내지 R₂₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헨테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

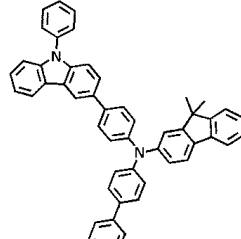
[0402] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



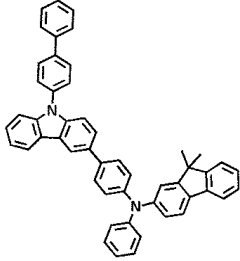
HT1



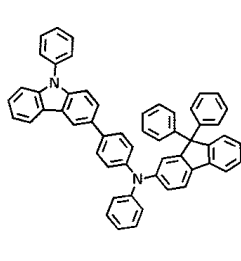
HT2



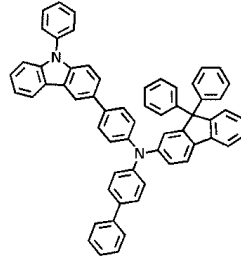
HT3



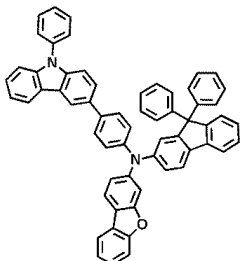
HT4



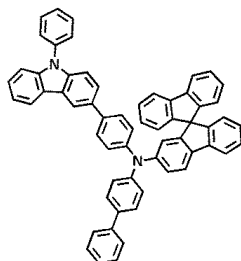
HT5



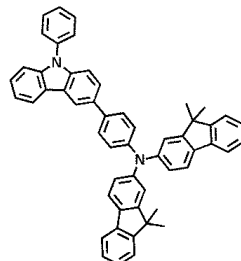
HT6



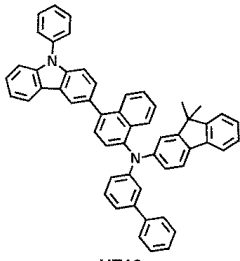
HT7



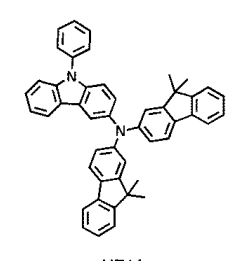
HT8



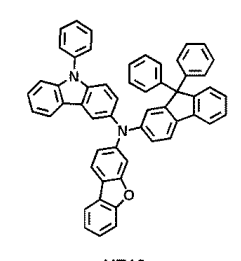
HT9



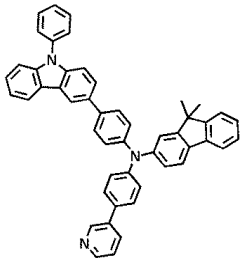
HT10



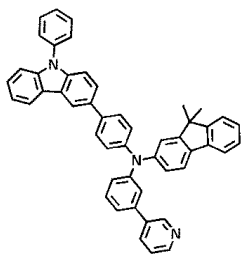
HT11



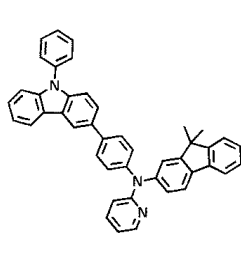
HT12



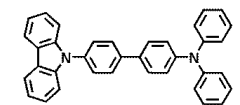
HT13



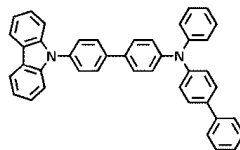
HT14



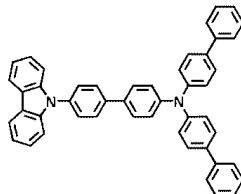
HT15



HT16



HT17

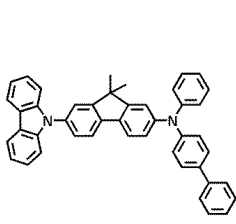


HT18

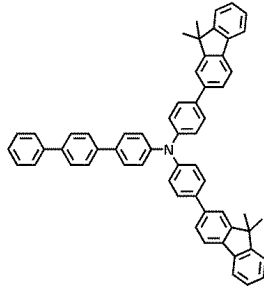
[0403]

[0404]

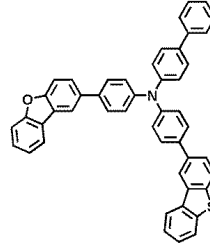
[0405]



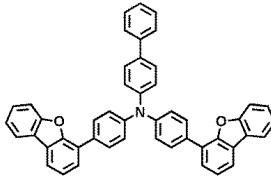
HT19



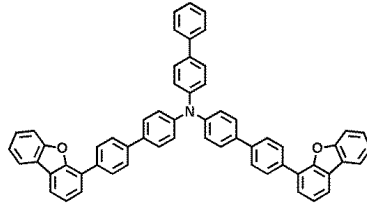
HT20



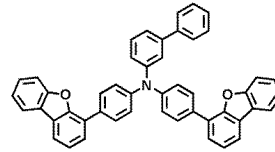
HT21



HT22

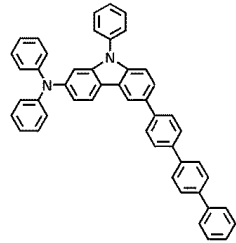


HT23

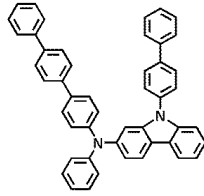


HT24

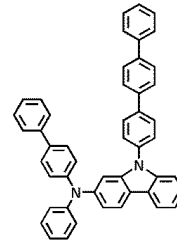
[0406]



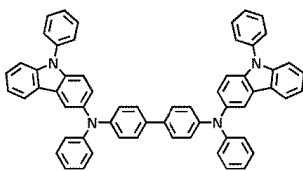
HT25



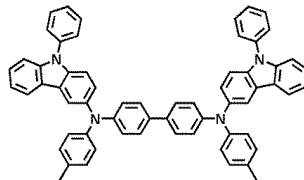
HT26



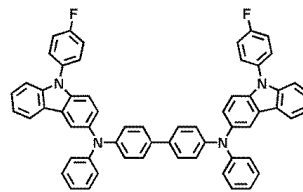
HT27



HT28

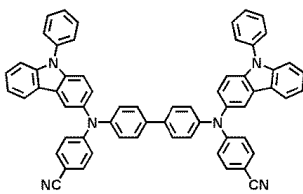


HT29

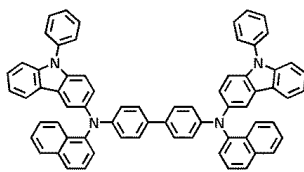


HT30

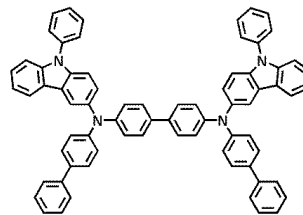
[0407]



HT31

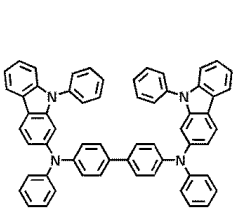


HT32

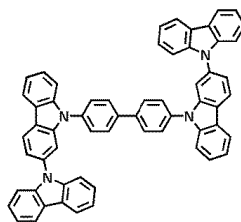


HT33

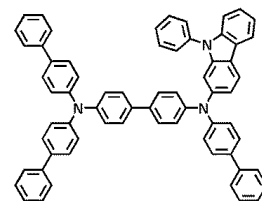
[0408]



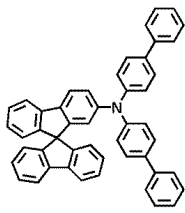
HT34



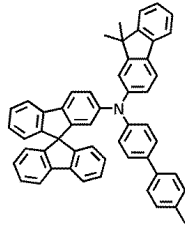
HT35



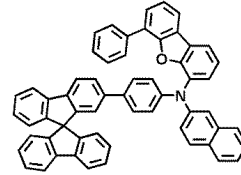
HT36



HT37



HT38



HT39

[0409]

[0410]

[0411]

[0412]

[0413]

[0414]

[0415]

[0416]

[0417]

[0418]

[0419]

[0420]

[0421]

[0422]

[0423]

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

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

[p-도펀트]

상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 전하-생성 물질은 상기 정공 수송 영역 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

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

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

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

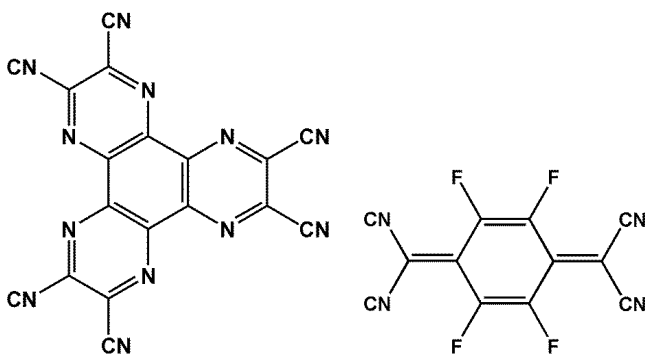
텅스텐 산화물 및 폴리브렌 산화물 등과 같은 금속 산화물;

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

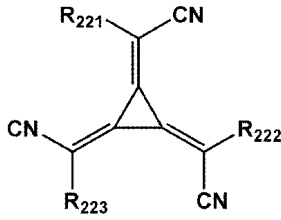
하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

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

<HAT-CN> <F4-TCNQ>



[0424] <화학식 221>



[0425]

[0426] 상기 화학식 221 중,

[0427] R_{221} 내지 R_{223} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R_{221} 내지 R_{223} 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기, -Cl로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기, -Br로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기 및 -I로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0428] [유기층(150) 중 발광층]

[0429] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 또는 적색 발광층, 녹색 발광층, 청색 발광층 및 NIR 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층, 청색 발광층 및/또는 NIR 발광층 중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질, 청색광 방출 물질 및/또는 NIR 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

[0430] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다. 또는, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물 외에, 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

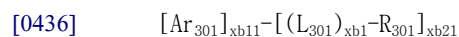
[0431] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0432] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0433] [발광층 중 호스트]

[0434] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0435] <화학식 301>



[0437] 상기 화학식 301 중,

[0438] Ar_{301} 은 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0439] $xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,

[0440] L_{301} 은, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0441] $xb1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0442] R₃₀₁은, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₃₀₁)(Q₃₀₂)(Q₃₀₃), -N(Q₃₀₁)(Q₃₀₂), -B(Q₃₀₁)(Q₃₀₂), -C(=O)(Q₃₀₁), -S(=O)₂(Q₃₀₁) 및 -P(=O)(Q₃₀₁)(Q₃₀₂) 중에서 선택되고,

[0443] xb21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0444] Q₃₀₁ 내지 Q₃₀₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0445] 일 실시예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar₃₀₁은,

[0446] 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹; 및

[0447] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;

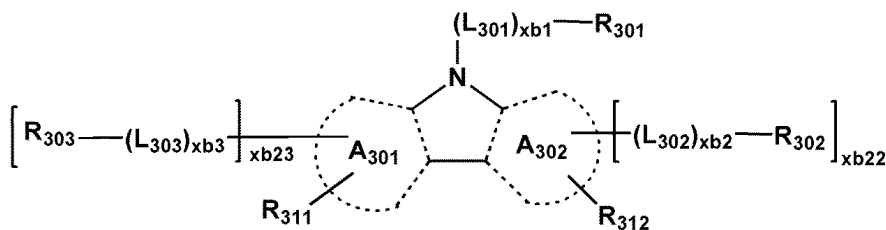
[0448] 중에서 선택되고,

[0449] Q₃₁ 내지 Q₃₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0450] 상기 화학식 301 중 xb11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₃₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

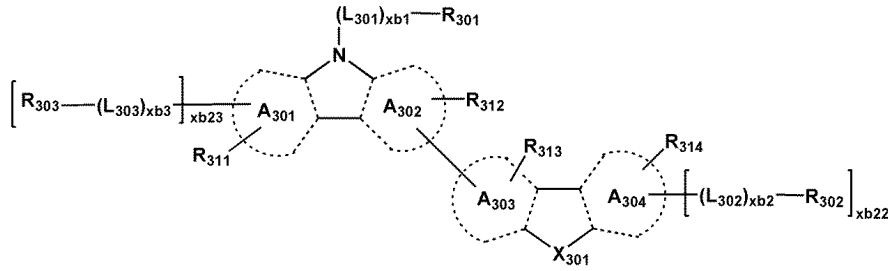
[0451] 다른 실시예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0452] <화학식 301-1>



[0453]

[0454] <화학식 301-2>



[0455]

[0456] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0457] A₃₀₁ 내지 A₃₀₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디벤조카바졸 그룹, 퓨란 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 나프토피란 그룹, 벤조나프토피란 그룹, 디나프토피란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 나프토티오펜 그룹, 벤조나프토티오펜 그룹 및 디나프토티오펜 그룹 중에서 선택되고,

[0458] X₃₀₁은 0, S 또는 N-[(L₃₀₄)_{xb4}-R₃₀₄]이고,

[0459] R₃₁₁ 내지 R₃₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택되고,

[0460] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0461] L₃₀₁, xb1, R₃₀₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0462] L₃₀₂ 내지 L₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L₃₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0463] xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,

[0464] R₃₀₂ 내지 R₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R₃₀₁에 대한 설명을 참조한다.

[0465] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L₃₀₁ 내지 L₃₀₄는 서로 독립적으로,

[0466] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0467] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일

기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜레닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜레닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜레닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

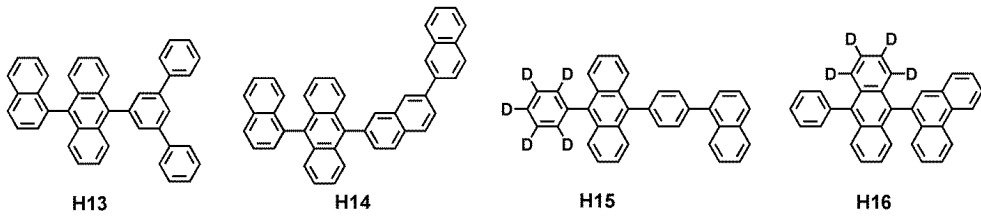
[0468] 중에서 선택되고,

[0469] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

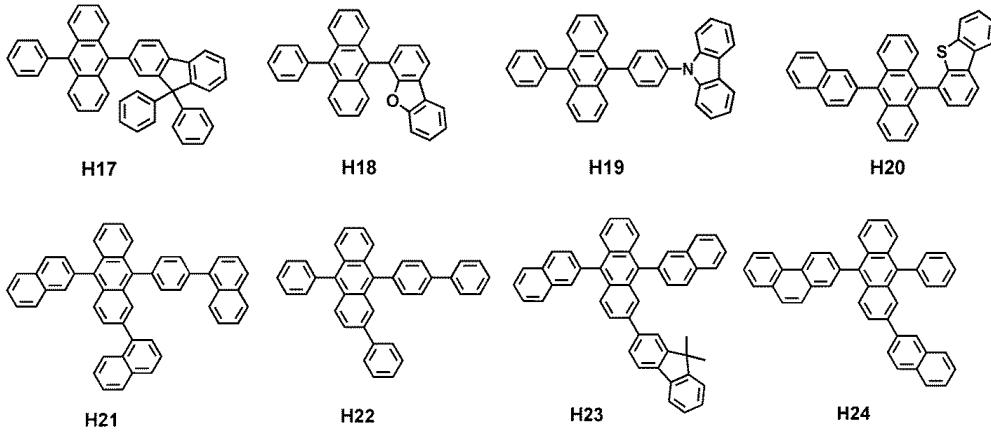
[0470] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R_{301} 내지 R_{304} 는 서로 독립적으로,

[0471] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

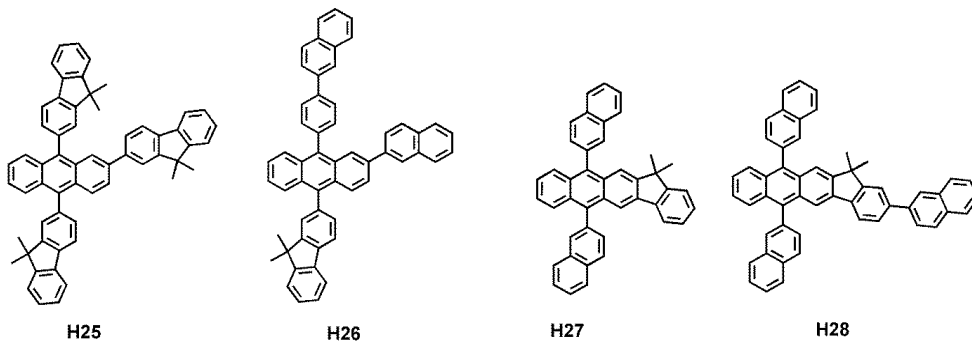
[0472] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_{1-20} 알킬기, C_{1-20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜레닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜레닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜레닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기,



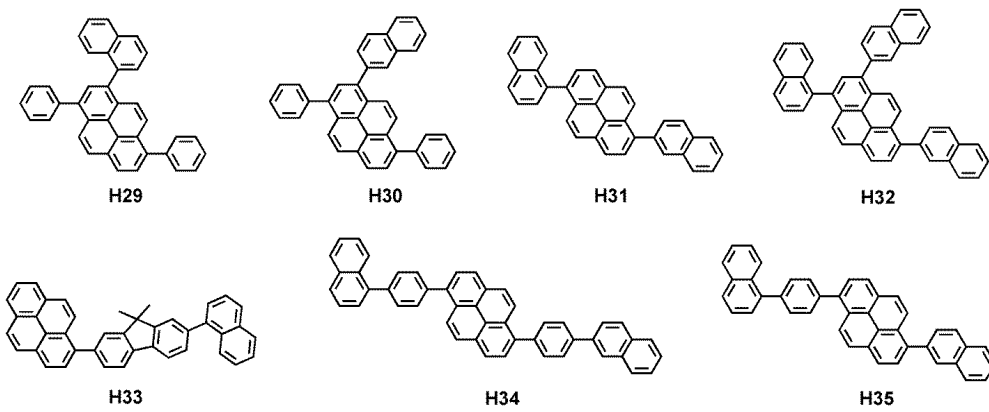
[0479]

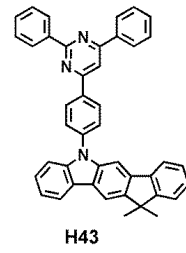
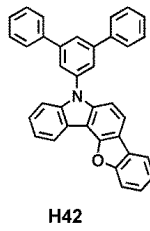
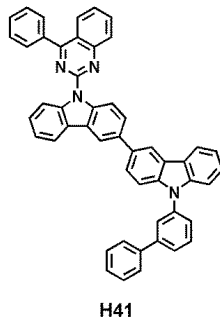
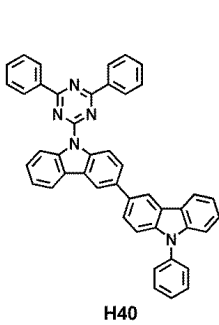
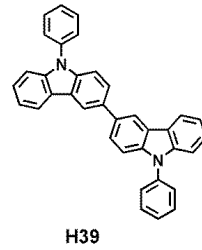
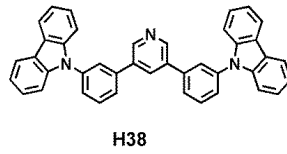
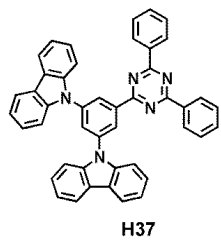
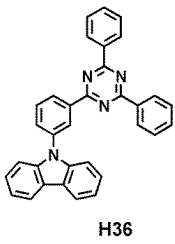


[0480]

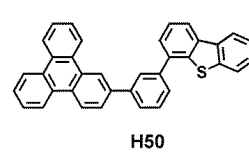
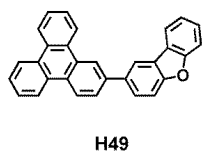
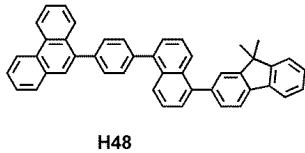
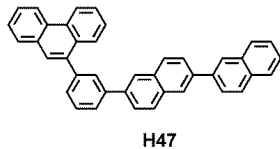
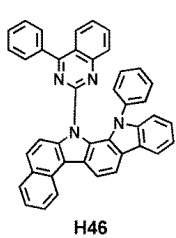
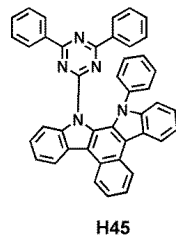
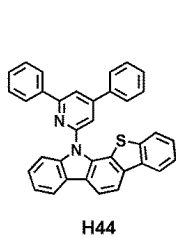


[0481]

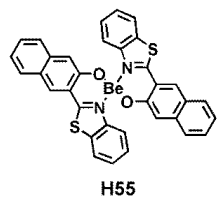
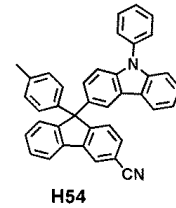
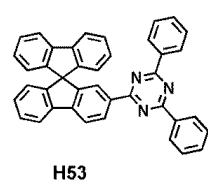
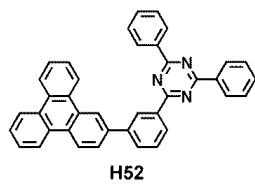
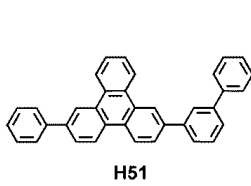




[0482]



[0483]



[0484]

[0485] 또는, 상기 호스트는 실리콘-함유 화합물(예를 들면, 하기 실시예에서 사용된 BCPDS 등) 및 포스핀 옥사이드-함유 화합물(예를 들면, 하기 실시예에서 사용된 POPCPA 등) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0486] 상기 호스트는 1종의 화합물만을 포함하거나, 서로 상이한 2종 이상의 화합물을 포함할 수 있는 등(예를 들면, 하기 실시예의 호스트는 BCPDS 및 POPCPA로 이루어짐), 다양한 변형이 가능하다.

[0487] [유기층(150) 중 발광층에 포함된 도펀트]

[0488] 상기 도펀트는 본 명세서 중 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다. 상기 유기금속 화합물에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

- [0489] 일 실시예에 따르면, 상기 발광층 중 호스트의 함량은 도펀트인 본 명세서의 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물의 함량보다 클 수 있다.
- [0490] [유기층(150) 중 전자 수송 영역]
- [0491] 상기 전자 수송 영역은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0492] 상기 전자 수송 영역은, 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0493] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적층된 전자 수송층/전자 주입층, 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층, 전자 조절층/전자 수송층/전자 주입층, 또는 버퍼층/전자 수송층/전자 주입층 등의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0494] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은, π 전자 결핍성 합질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0495] 상기 " π 전자 결핍성 합질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 의미한다.
- [0496] 예를 들어, 상기 " π 전자 결핍성 합질소 고리"는, i) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹이거나, ii) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 2 이상이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹이거나, 또는 iii) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 적어도 하나와, 적어도 하나의 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0497] 상기 π 전자 결핍성 합질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 인다졸, 푸린(purine), 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 퀴나졸린, 시놀린, 페난트리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 벤조이미다졸, 이소벤조티아졸, 벤조옥사졸, 이소벤조옥사졸, 트리아졸, 테트라졸, 옥사디아졸, 트리아진, 티아디아졸, 이미다조피리딘, 이미다조피리미딘, 아자카바졸 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0498] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0499] <화학식 601>
- [0500] [Ar₆₀₁]_{xe11}-[(L₆₀₁)_{xe1}-R₆₀₁]_{xe21}
- [0501] 상기 화학식 601 중,
- [0502] Ar₆₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0503] xe11은 1, 2 또는 3이고,
- [0504] L₆₀₁은, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0505] xe1는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0506] R₆₀₁은, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그

룹, $-\text{Si}(\text{Q}_{601})(\text{Q}_{602})(\text{Q}_{603})$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{601})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{601})$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{601})(\text{Q}_{602})$ 중에서 선택되고,

[0507] 상기 Q_{601} 내지 Q_{603} 은 서로 독립적으로, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 알킬기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,

[0508] xe21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.

[0509] 일 실시예에 따르면, 상기 xe11개의 Ar_{601} 및 xe21개의 R_{601} 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 합질소 고리를 포함할 수 있다.

[0510] 일 실시예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar_{601} 은,

[0511] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹; 및

[0512] 중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ 알킬기, $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, $-\text{Si}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})(\text{Q}_{33})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{31})$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹;

[0513] 중에서 선택될 수 있고,

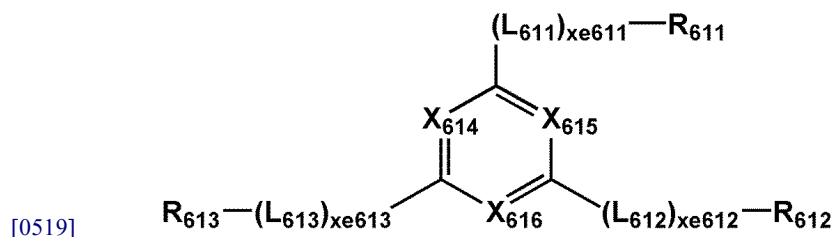
[0514] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 알킬기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0515] 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar_{601} 은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0516] 다른 실시예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar_{601} 은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0517] 또 다른 실시예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

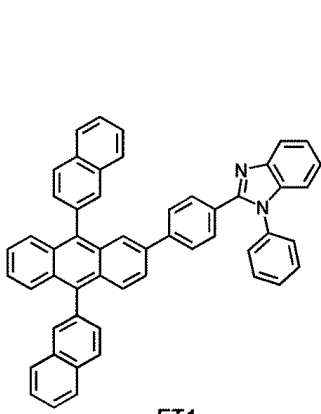
[0518] <화학식 601-1>



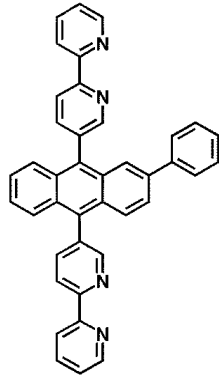
- [0520] 상기 화학식 601-1 중,
- [0521] X_{614} 는 N 또는 $C(R_{614})$ 이고, X_{615} 는 N 또는 $C(R_{615})$ 이고, X_{616} 은 N 또는 $C(R_{616})$ 이고, X_{614} 내지 X_{616} 중 적어도 하나는 N이고,
- [0522] L_{611} 내지 L_{613} 은 서로 독립적으로, 상기 L_{601} 에 대한 설명을 참조하고,
- [0523] xe_{611} 내지 xe_{613} 은 서로 독립적으로, 상기 xe_1 에 대한 설명을 참조하고,
- [0524] R_{611} 내지 R_{613} 은 서로 독립적으로, 상기 R_{601} 에 대한 설명을 참조하고,
- [0525] R_{614} 내지 R_{616} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0526] 일 실시예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L_{601} 및 L_{611} 내지 L_{613} 은 서로 독립적으로,
- [0527] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및
- [0528] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;
- [0529] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0530] 다른 실시예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe_1 및 xe_{611} 내지 xe_{613} 은 서로 독립적으로, 0, 1 또는

2일 수 있다.

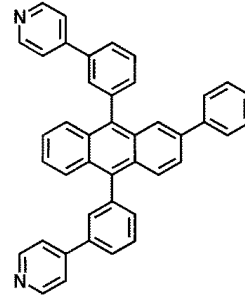
- [0531] 또 다른 실시예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R₆₀₁ 및 R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로,
- [0532] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;
- [0533] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및
- [0534] -S(=O)₂(Q₆₀₁) 및 -P(=O)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂);
- [0535] 중에서 선택되고,
- [0536] 상기 Q₆₀₁ 및 Q₆₀₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0537] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



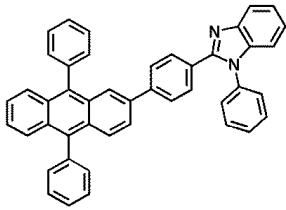
ET1



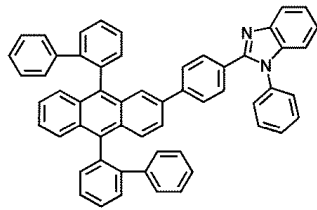
ET2



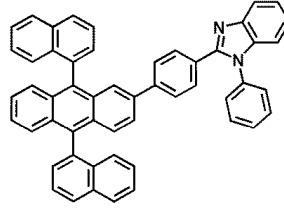
ET3



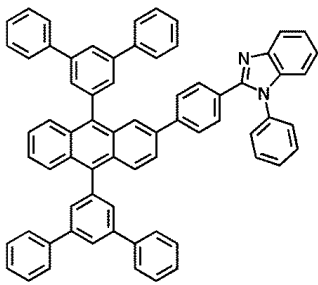
ET4



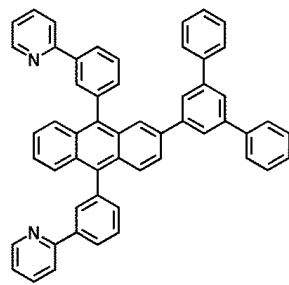
ET5



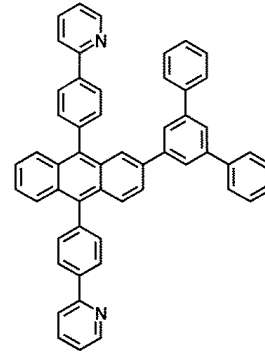
ET6



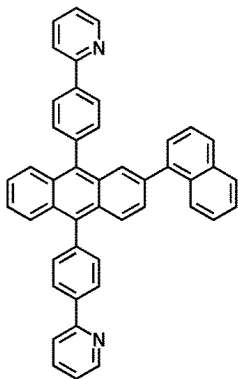
ET7



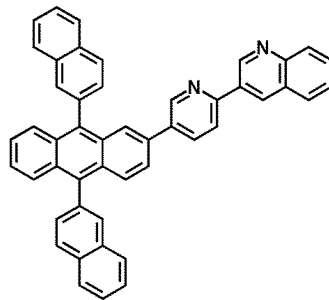
ET8



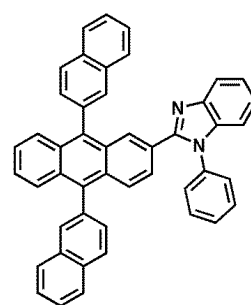
ET9



ET10



ET11



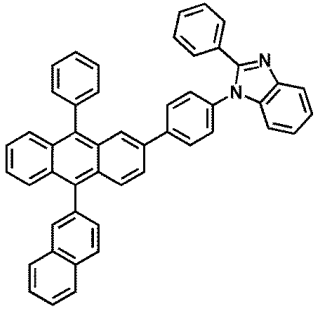
ET12

[0538]

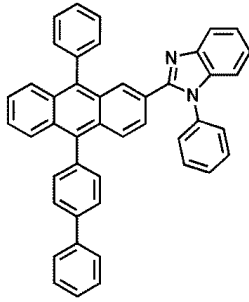
[0539]

[0540]

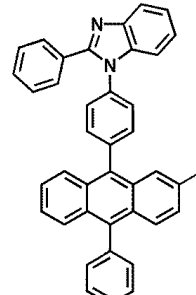
[0541]



ET13

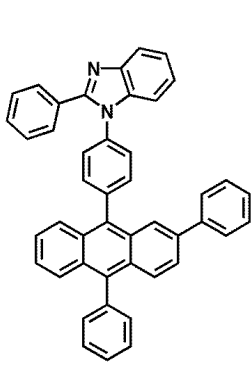


ET14

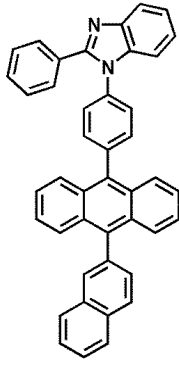


ET15

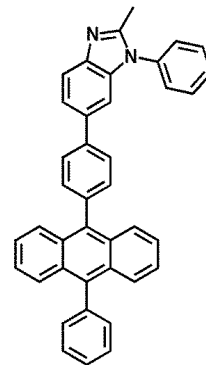
[0542]



ET16

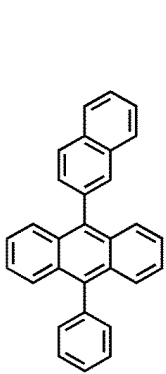


ET17

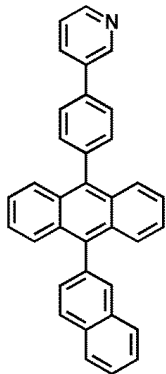


ET18

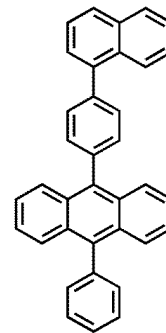
[0543]



ET19

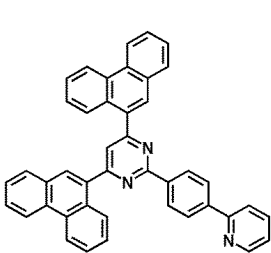


ET20

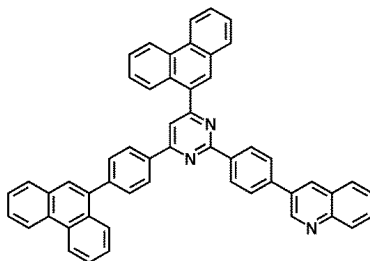


ET21

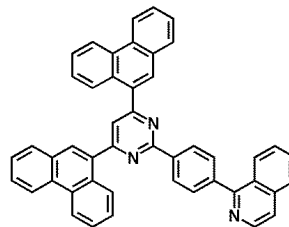
[0544]



ET22

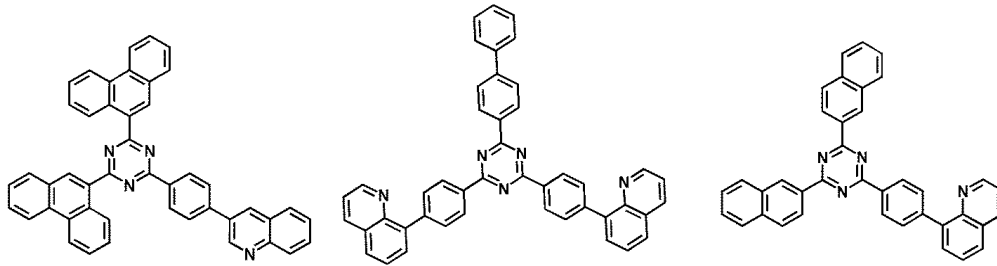


ET23

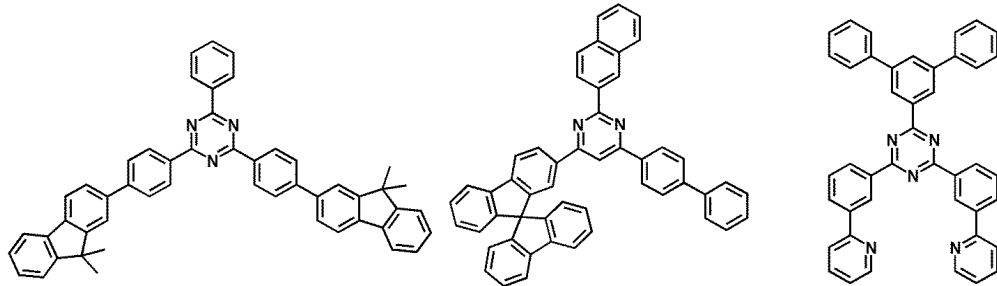


ET24

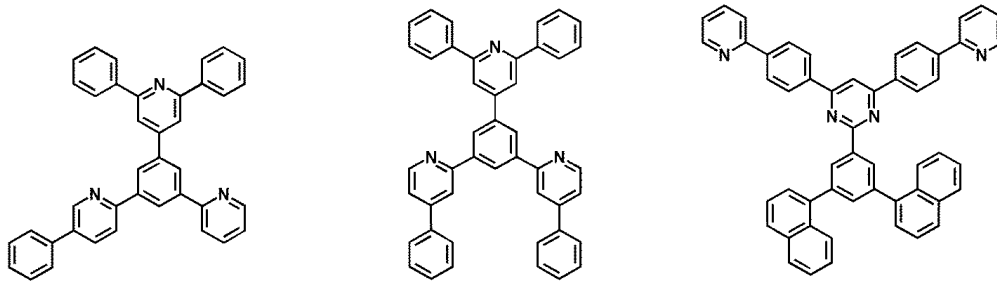
[0545]



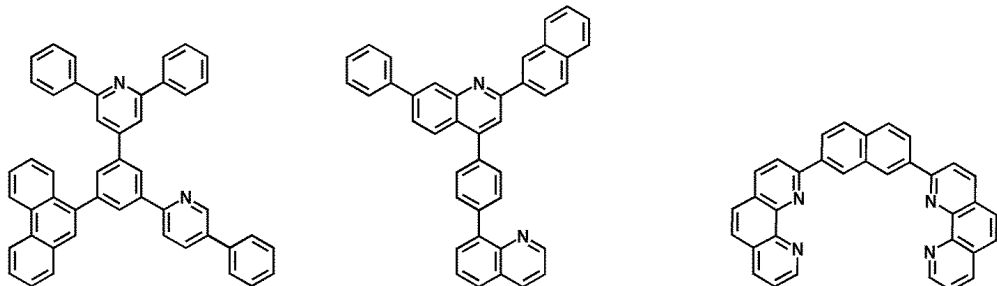
[0546]



[0547]



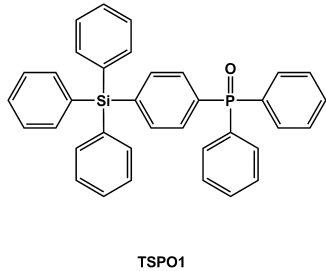
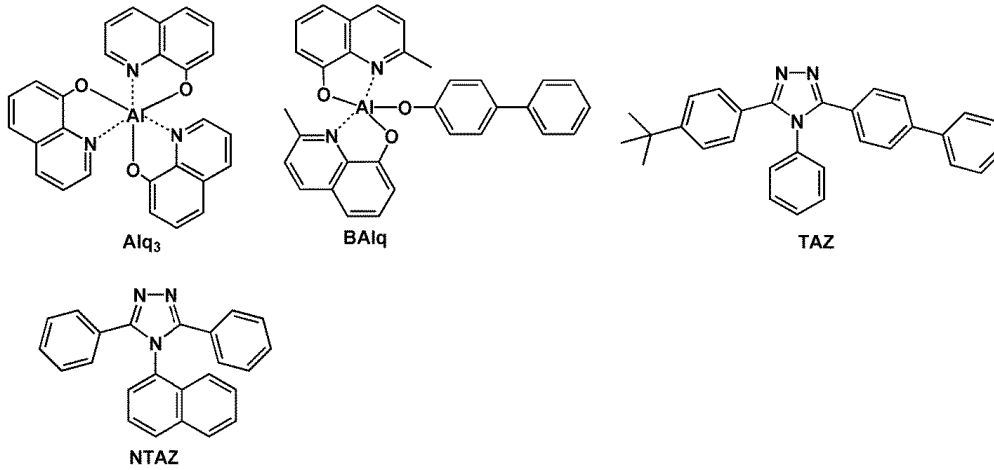
[0548]



[0549]

[0550]

또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, BAlq, TAZ(3-(Biphenyl-4-yl)-5-(4-*tert*-butylphenyl)-4-phenyl-4*H*-1,2,4-triazole), NTAZ 및 TSP01(diphenyl(4-(triphenylsilyl)phenyl)-phosphine oxide) 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다.



[0551]

[0552]

[0553]

[0554]

[0555]

[0556]

[0557]

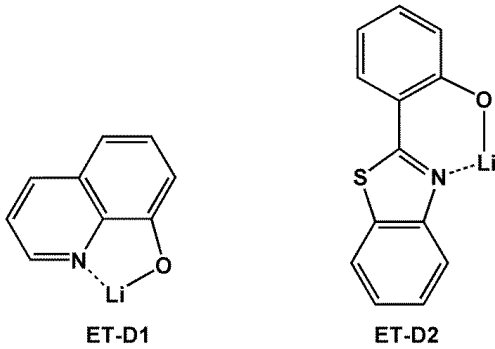
상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성 또는 전자 조절 특성을 얻을 수 있다.

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

상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

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

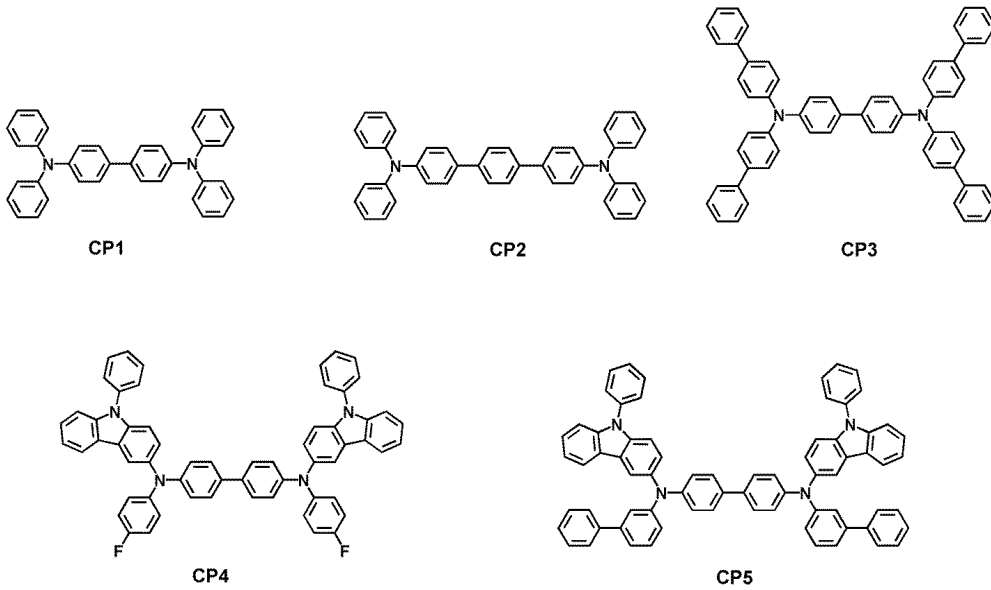
예를 들면, 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다.



- [0558]
- [0559] 상기 전자 수송 영역은, 제2전극(190)으로부터의 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층은 상기 제2전극(190)과 직접(directly) 접촉할 수 있다.
- [0560] 상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0561] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0562] 상기 알칼리 금속은, Li, Na, K, Rb 및 Cs 중에서 선택될 수 있다. 일 실시예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li, Na 또는 Cs일 수 있다. 다른 실시예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li 또는 Cs일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0563] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.
- [0564] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.
- [0565] 상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.
- [0566] 상기 알칼리 금속 화합물은, Li₂O, Cs₂O, K₂O 등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI, RbI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물 중에서 선택될 수 있다. 일 실시예에 따르면, 상기 알칼리 금속 화합물은, LiF, Li₂O, NaF, LiI, NaI, CsI, KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0567] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO, Ba_xSr_{1-x}O(0<x<1), Ba_xCa_{1-x}O(0<x<1) 등과 같은 알칼리 토금속 화합물 중에서 선택될 수 있다. 일 실시예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0568] 상기 희토류 금속 화합물은, YbF₃, ScF₃, ScO₃, Y₂O₃, Ce₂O₃, GdF₃, 및 TbF₃ 중에서 선택될 수 있다. 일 실시예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은 YbF₃, ScF₃, TbF₃, YbI₃, ScI₃, TbI₃ 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0569] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트린, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0570] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합만으로 이루어져 있거나, 상기 유기물을 더 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층이 유기물을 더 포함할 경우, 상기 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류

금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합은 상기 유기물로 이루어진 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

- [0571] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0572] [제2전극(190)]
- [0573] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극인 캐소드(cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(190)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합(combination)을 사용할 수 있다.
- [0574] 상기 제2전극(190)은, 리튬(Li), 은(Ag), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), ITO 및 IZO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 제2전극(190)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다.
- [0575] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0576] [도 2 내지 4에 대한 설명]
- [0577] 한편, 도 2의 유기 발광 소자(20)는 제1캐핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 3의 유기 발광 소자(30)는 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖고, 도 4의 유기 발광 소자(40)는 제1캐핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.
- [0578] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.
- [0579] 유기 발광 소자(20, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제1전극(110) 및 제1캐핑층(210)을 지나 외부로 추출될 수 있고, 유기 발광 소자(30, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제2전극(190) 및 제2캐핑층(220)을 지나 외부로 추출될 수 있다.
- [0580] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.
- [0581] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 서로 독립적으로, 유기물로 이루어진 유기 캐핑층, 무기물로 이루어진 무기 캐핑층, 또는 유기물 및 무기물을 포함한 복합 캐핑층일 수 있다.
- [0582] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물, 아민계 화합물, 포르핀 유도체 (porphine derivatives), 프탈로시아닌 유도체 (phthalocyanine derivatives), 나프탈로시아닌 유도체 (naphthalocyanine derivatives), 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나의 물질을 포함할 수 있다. 상기 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물 및 아민계 화합물은, 선택적으로, O, N, S, Se, Si, F, Cl, Br 및 I 중에서 선택된 적어도 하나의 원소를 포함한 치환기로 치환될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민계 화합물을 포함할 수 있다.
- [0583] 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 또는 상기 화학식 202로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0584] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화합물 HT28 내지 HT33 및 하기 화합물 CP1 내지 CP5 중에서 선택된 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



- [0585]
- [0586] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1 내지 4를 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0587] 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층은 각각, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 소정 영역에 형성될 수 있다.
- [0588] 진공 증착법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 증착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500℃의 증착 온도, 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0589] 스핀 코팅법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 코팅 조건은, 예를 들면, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도 및 약 80℃ 내지 200℃의 열처리 온도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0590] [장치]
- [0591] 상술한 바와 같은 유기 발광 소자는 다양한 장치에 사용될 수 있다.
- [0592] 따라서, 다른 측면에 따르면, 상기 유기 발광 소자를 포함한 장치가 제공된다.
- [0593] 상기 장치는, 예를 들면, 발광 장치, 인증 장치 또는 전자 장치일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0594] 상기 발광 장치는, 각종 디스플레이, 광원 등으로 사용될 수 있다.
- [0595] 상기 인증 장치는, 예를 들면, 생체(예를 들어, 손가락 끝, 눈동자 등)의 생체 정보를 이용하여 개인을 인증하는 생체 인증 장치일 수 있다.
- [0596] 상기 인증 장치는 상술한 바와 같은 유기 발광 소자 외에 생체 정보 수집 수단을 더 포함할 수 있다.
- [0597] 상기 전자 장치는 퍼스널 컴퓨터(예를 들면, 모바일형 퍼스널 컴퓨터), 휴대 전화, 디지털 사진기, 전자 수첩, 전자 사전, 전자 게임기, 의료 기기(예를 들면, 전자 체온계, 혈압계, 혈당계, 맥박 측정 장치, 맥파 측정 장치, 심전표시 장치, 초음파 진단 장치, 내시경용 표시 장치), 어군 탐지기, 각종 측정 기기, 계기류(예를 들면, 차량, 항공기, 선박의 계기류), 프로젝터 등으로 응용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0598] 한편, 상기 장치는 상기 유기 발광 소자 외에, 박막 트랜지스터를 더 포함할 수 있다. 여기서, 상기 박막 트랜지스터는 소스 전극 및 드레인 전극을 포함하고, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 박막 트랜지스터의 소스 전극 및 드레인 전극 중 적어도 하나와 전기적으로 연결될 수 있다.
- [0599] [치환기의 일반적인 정의]

- [0600] 본 명세서 중 1주기 전이 금속이란, 주기율표의 4주기 원소이면서 d-블록에 포함된 원소를 의미하며, 구체적인 예에는, 스칸듐(Sc), 티탄(Ti), 바나듐(V), 크롬(Cr), 망간(Mn), 철(Fe), 코발트(Co), 니켈(Ni), 구리(Cu), 아연(Zn)이 포함된다.
- [0601] 본 명세서 중 2주기 전이 금속이란, 주기율표의 5주기 원소이면서 d-블록에 포함된 원소를 의미하며, 구체적인 예에는, 이트륨(Y), 지르코늄(Zr), 니오븀(Nb), 몰리브덴(Mo), 테크네튬(Tc), 루테튬(Ru), 로듐(Rh), 팔라듐(Pd), 은(Ag), 카드뮴(Cd)이 포함된다.
- [0602] 본 명세서 중 3주기 전이금속이란, 주기율표의 6주기 원소이면서 d-블록 및 f-블록에 포함된 원소를 의미하며, 구체적인 예에는, 란타넘(La), 사마리움(Sm), 유로퓸(Eu), 터븀(Tb), 툴륨(Tm), 이터븀(Yb), 루테튬(Lu), 하프늄(Hf), 탄탈럼(Ta), 텅스텐(W), 레늄(Re), 오스뮴(Os), 이리듐(Ir), 백금(Pr), 금(Au), 수은(Hg)이 포함된다.
- [0603] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0604] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0605] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기, 프로피닐기, 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0606] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는, -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0607] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0608] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리아졸리딘기(1,2,3,4-oxatriazolidiny), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0609] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0610] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸일기, 2,3-디히드로퓨라닐기, 2,3-디히드로티오펜기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0611] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세

닐기 등을 포함된다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

- [0612] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함된다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0613] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.
- [0614] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기는 -OA₁₀₄(여기서, A₁₀₄는 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기임)를 가리키고, 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기는 -SA₁₀₅(여기서, A₁₀₅는 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기임)를 가리킨다.
- [0615] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 8 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예에는, 플루오레닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0616] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 구체예에는, 카바졸일기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0617] 본 명세서 중 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 5 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.
- [0618] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이란, 상기 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹과 동일한 구조를 갖되, 고리-형성 원자로서, 탄소(탄소수는 1 내지 60일 수 있음) 외에, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 그룹을 의미한다.
- [0619] 본 명세서 중, 상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알킬기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0620] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,

C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0621] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0622] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0623] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0624] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0625] 중에서 선택되고,

[0626] 상기 Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0627] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu^t"은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"는 메톡시기를 의미한다.

[0628] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0629] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

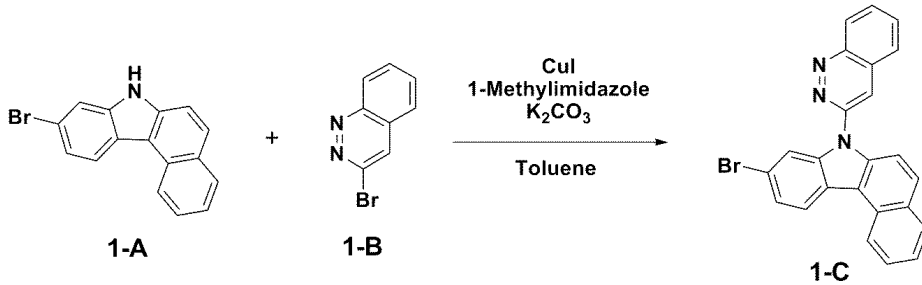
[0630] 본 명세서 중 * 및 *'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0631] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성에 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.

[0632] [실시예]

[0633] **합성예 1: 화합물 1의 합성**

[0634] (1) 중간체 1-C의 합성

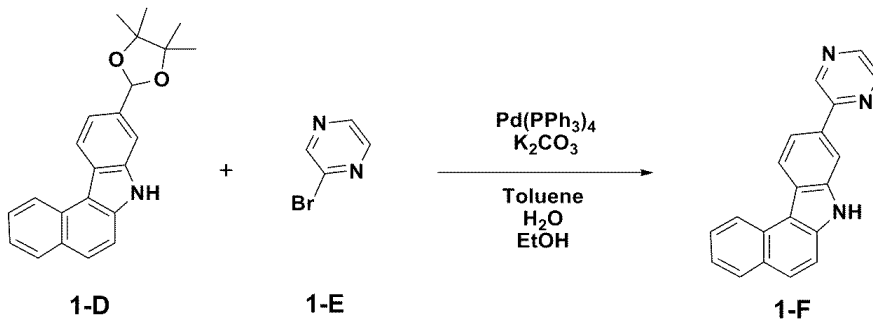


[0635]

[0636] 출발물질 1-A(11.8 g, 40 mmol), 출발물질 1-B(16.7 g, 80 mmol), CuI(3.8 g, 20 mmol), 포타슘카보네이트(11.1 g, 80 mmol) 및 1-메틸-1H-이미다졸(3.3 g, 40 mmol)을 톨루엔 250ml에 넣은 후 질소 분위기에서 7일 동안 교반 환류하였다. 그 다음, 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고 물 300 ml를 투입하여 유기층을 분리하였고, 상기 물 층을 다시 250 ml 디클로로메탄으로 2회에 걸쳐 추출하였다. 추출한 유기층을 MgSO₄로 교환하여 수분을 제거하고 유기층을 필터하여 감압 증발하였다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 노말헥산 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 중간체 1-C를 5.6 g, 33 % 수율로 얻었다.

[0637] MS (MALDI-TOF) m/z: 424 [M]⁺

[0638] (2) 중간체 1-F의 합성

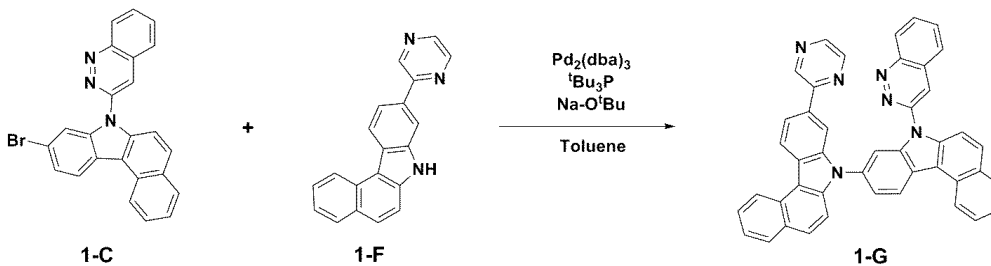


[0639]

[0640] 출발물질 1-D(6.0 g, 17.4 mmol), 출발물질 1-E(2.8 g, 17.4 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0.6 g 0.5 mmol) 및 포타슘카보네이트(7.2 g, 52.1 mmol)을 250 ml 플라스크에 투입한 후 톨루엔 100 ml, 에탄올 20 ml 및 물 20 ml를 넣었다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링(Bubbling)한 후 승온하여 12시간 동안 교반 환류하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고 물 100 ml와 에틸아세테이트 100ml 투입하여 유기층을 분리하였고, 상기 물 층을 다시 디클로로메탄 50 ml를 넣어 2회에 걸쳐 추출하였다. 추출한 유기층을 MgSO₄로 교환하여 수분을 제거하고 유기층을 필터하여 감압 증발하였다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 노말헥산 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 중간체 1-F를 3.8 g, 75 % 수율로 얻었다.

[0641] MS (MALDI-TOF) m/z: 295 [M]⁺

[0642] (3) 중간체 1-G의 합성



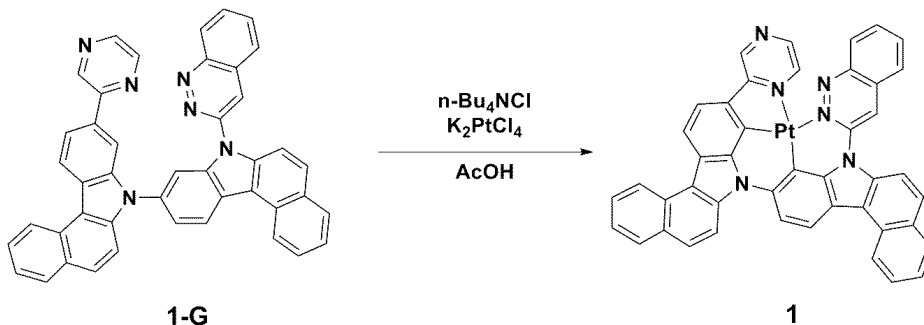
[0643]

[0644] 출발물질 1-C (5.5 g, 13.0 mmol)와 출발물질 1-F(3.8 g, 13.0 mmol)를 톨루엔 100 ml에 넣은 후 트리스(디벤질리딘아세톤)디팔라듐(0) (0.4 g, 0.4 mmol), 트리-tert-부틸포스핀 (0.2 g, 0.8 mmol, 50% Solution in

Toluene) 및 소듐-터트-부톡사이드 (3.7 g, 39.0 mmol)를 넣었다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링한 후 승온하여 24시간 동안 교반 환류하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고 물 100 ml와 에틸아세테이트 100ml 투입하여 유기층을 분리하였고, 상기 물 층을 다시 디클로로메탄 500 ml를 넣어 2회에 걸쳐 추출하였다. 추출한 유기층을 MgSO₄로 교반하여 수분을 제거하고 유기층을 필터하여 감압 증발하였다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 중간체 1-G를 4.6 g, 55 % 수율로 얻었다.

[0645] MS (MALDI-TOF) m/z: 638 [M]⁺

[0646] (4) 화합물 1의 합성



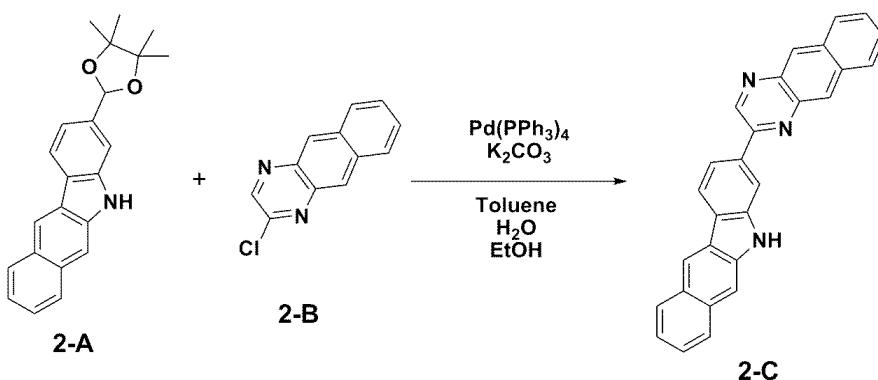
[0647]

[0648] 출발물질 1-G (4.6 g, 7.2 mmol) 및 포타슘테트라크로로플라티네이트(II) (3.1 g, 7.6 mmol)을 실투브(seal tube)에 넣고 글리셀 아세트산 500 ml와 노르말-테트라-부틸암모늄브로마이드 (0.2 g, 0.7 mmol) 투입하였다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링한 후 실투브의 마개를 막은 후 승온하여 96시간 동안 교반 환류하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고, 여기에 물 500 ml를 넣고 교반하였다. 생성된 침전물을 필터하고 물로 3회 씻어준 후 고체를 건조하였다. 건조된 고체를 디클로로메탄과 노말헥산 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1을 1.4g, 23 % 수율로 얻었다.

[0649] MS (MALDI-TOF) m/z: 831 [M]⁺

[0650] 합성예 2: 화합물 2의 합성

[0651] (1) 중간체 2-C의 합성

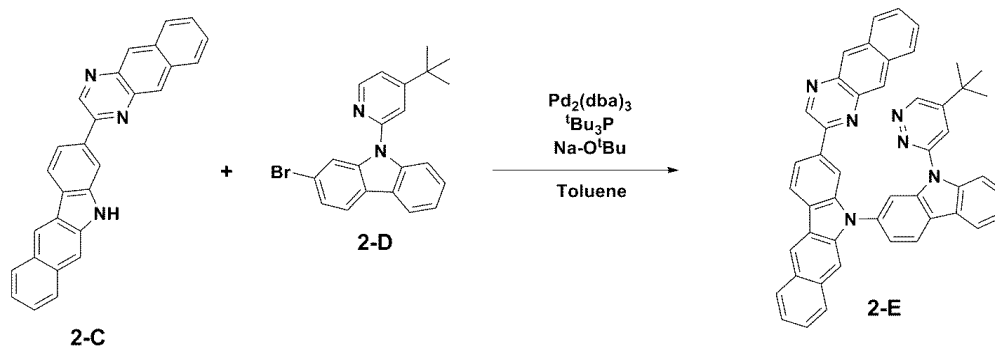


[0652]

[0653] 출발물질 2-A(10.0 g, 28.9 mmol), 출발물질 2-B(6.2 g, 28.9 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(1.0 g 0.9 mmol) 및 포타슘카보네이트(12.0 g, 86.8 mmol)을 250 ml 플라스크에 투입한 후 톨루엔 200 ml, 에탄올 40 ml 및 물 40 ml를 넣었다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링한 후 승온하여 12시간 동안 교반 환류하였다. 반응 후 상온으로 온도를 식히고 물 200 ml와 에틸아세테이트 200ml 투입하여 유기층을 분리하였고, 상기 물 층을 다시 디클로로메탄 100 ml를 넣어 2회에 걸쳐 유기층을 추출하였다. 추출한 유기층을 MgSO₄로 교반하여 수분을 제거하고 유기층을 필터하여 감압 증발하였다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 노말헥산 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 중간체 2-C를 4.4 g, 38 % 수율로 얻었다.

[0654] MS (MALDI-TOF) m/z: 395 [M]⁺

[0655] (2) 중간체 2-E의 합성

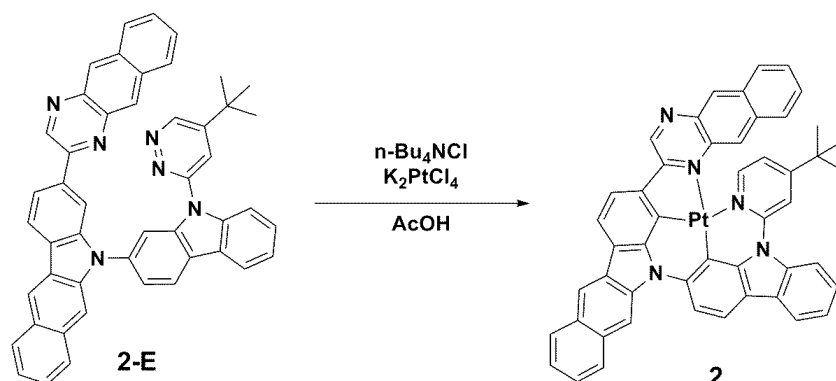


[0656]

[0657] 출발물질 2-C (4.4 g, 11.0 mmol)와 출발물질 2-D (4.2 g, 11.0 mmol)을 톨루엔 100 ml에 넣은 후 트리스(디벤질리딘아세톤)디팔라듐(0) (0.3 g, 0.3 mmol), 트리-tert-부틸포스핀 (0.15 g, 0.7 mmol, 50% Solution in Toluene) 및 소듐-tert-부톡사이드 (3.2 g, 33.0 mmol)를 넣었다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링한 후 승온하여 24시간 동안 교반 환류하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고 물 100 ml와 에틸아세테이트 100ml 투입하여 유기층을 분리하였고, 상기 물 층을 다시 디클로로메탄 500 ml를 넣어 2회에 걸쳐 유기층을 추출하였다. 추출한 유기층을 MgSO₄로 교반하여 수분을 제거하고 유기층을 필터하여 감압 증발하였다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 중간체 2-E를 3.4 g, 45 % 수율로 얻었다.

[0658] MS (MALDI-TOF) m/z: 694 [M]⁺

[0659] (3) 화합물 2의 합성



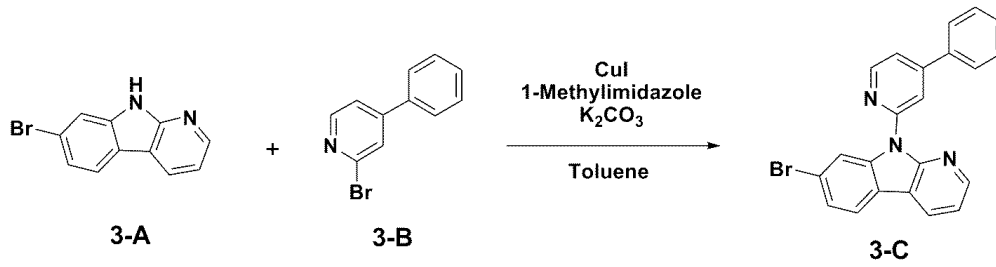
[0660]

[0661] 출발물질 2-E (3.4 g, 5.0 mmol), 포타슘테트라크로로플라티네이트(II) (2.2 g, 5.3 mmol)을 실투브에 넣고 글리셀 아세트산 300 ml와 노르말-테트라-부틸암모늄브로마이드 (0.1 g, 0.5 mmol) 투입하였다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링한 후 실투브의 마개를 막은 후 승온하여 96시간 동안 교반 환류하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고, 여기에 물 300 ml를 넣고 교반하였다. 생성된 침전물을 필터하고 물로 3회 씻어준 후 고체를 건조하였다. 건조된 고체를 디클로로메탄과 노말헥산 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 2를 0.8 g, 18 % 수율로 얻었다.

[0662] MS (MALDI-TOF) m/z: 886 [M]⁺

[0663] 합성예 3: 화합물 3의 합성

[0664] (1) 중간체 3-C의 합성

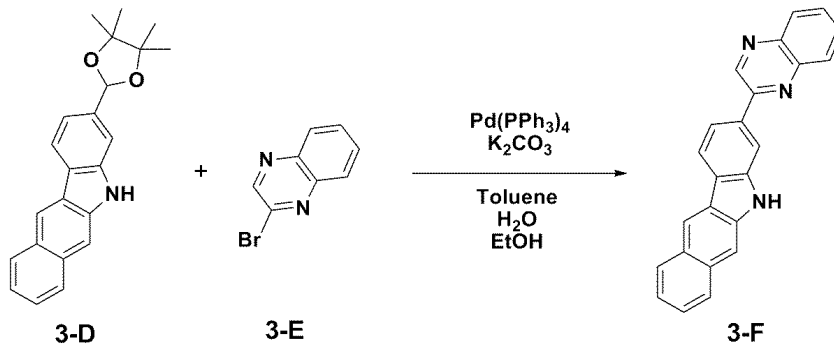


[0665]

[0666] 출발물질 3-A(9.9 g, 40 mmol), 출발물질 3-B(18.7 g, 80 mmol), CuI(3.8 g, 20 mmol), 포타슘카보네이트(11.1 g, 80 mmol) 및 1-메틸-1H-이미다졸(3.3 g, 40 mmol)을 톨루엔 250ml에 넣은 후 질소 분위기에서 7일 동안 교반 환류 하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고 물 300 ml를 투입하여 유기층을 분리하였고, 상기 물 층을 다시 디클로로메탄 250 ml를 넣어 2회에 걸쳐 유기층을 추출하였다. 추출한 유기층을 MgSO₄로 교반하여 수분을 제거하고 유기층을 필터하여 감압 증발하였다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 노말헥산 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 중간체3-C를 4.3 g, 27 % 수율로 얻었다.

[0667] MS (MALDI-TOF) m/z: 400 [M]⁺

[0668] (2) 중간체 3-F의 합성

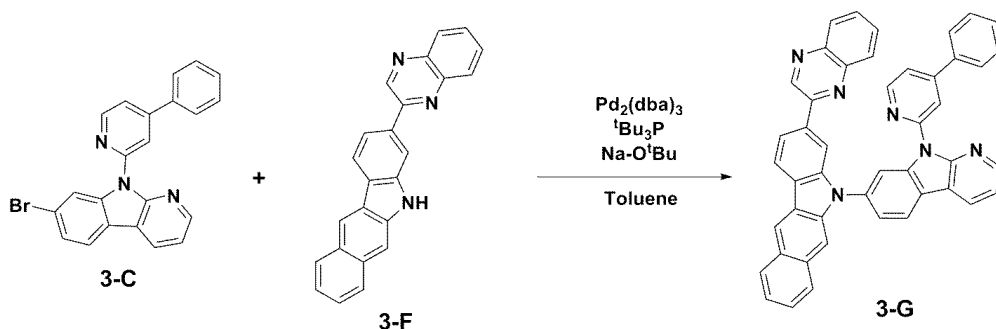


[0669]

[0670] 출발물질 3-D(6.9 g, 20.0 mmol), 출발물질 3-E(4.2 g, 20.0 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0.7 g, 0.6 mmol) 및 포타슘카보네이트(8.3 g, 59.9 mmol)을 250 ml 플라스크에 투입한 후 톨루엔 200 ml, 에탄올 40 ml 및 물 40 ml를 넣었다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링한 후 승온하여 12시간 동안 교반 환류하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고 물 200 ml와 에틸아세테이트 200ml 투입하여 유기층을 분리하였고, 상기 물 층을 다시 디클로로메탄 100 ml를 넣어 2회에 걸쳐 유기층을 추출하였다. 추출한 유기층을 MgSO₄로 교반하여 수분을 제거하고 유기층을 필터하여 감압 증발하였다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 노말헥산 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 중간체 3-F를 4.8 g, 70 % 수율로 얻었다.

[0671] MS (MALDI-TOF) m/z: 345 [M]⁺

[0672] (3) 중간체 3-G의 합성



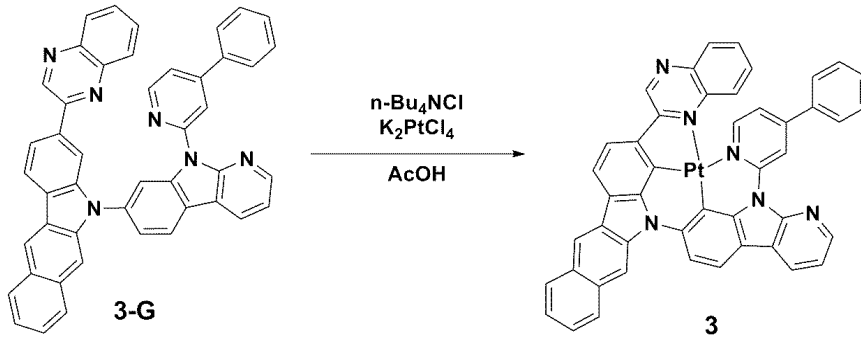
[0673]

[0674] 출발물질 3-C (4.3 g, 10.8 mmol)와 출발물질 3-F (3.7 g, 10.8 mmol)을 톨루엔 100 ml에 넣은 후 트리스(디벤

질리딘아세톤)디팔라뎀(0) (0.3 g, 0.3 mmol), 트리-tert-부틸포스핀 (0.15 g, 0.7 mmol, 50% Solution in Toluene) 및 소듐-tert-부톡사이드 (3.1 g, 32.4 mmol)를 넣었다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링한 후 승온하여 24시간 동안 교반 환류하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고 물 100 ml와 에틸아세테이트 100ml 투입하여 유기층을 분리하였고, 상기 물 층을 다시 디클로로메탄 500 ml를 넣어 2회에 걸쳐 유기층을 추출하였다. 추출한 유기층을 MgSO₄로 교반하여 수분을 제거하고 유기층을 필터하여 감압 증발하였다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 중간체3-G를 3.5 g, 49 % 수율로 얻었다.

[0675] MS (MALDI-TOF) m/z: 664 [M]⁺

[0676] (4) 화합물 3의 합성



[0677]

[0678] 출발물질 3-G (3.5 g, 5.3 mmol) 및 포타슘테트라크로로플라티네이트(II) (2.3 g, 5.6 mmol)을 실투브에 넣고 글리셀 아세트산 300 ml와 노르말-테트라-부틸암모늄브로마이드 (0.1 g, 0.5 mmol) 투입하였다. 실온에서 30분 동안 교반하며 N₂를 버블링한 후 실투브의 마개를 막은 후 승온하여 96시간 동안 교반 환류하였다. 상기 반응 혼합물을 상온으로 식히고, 여기에 물 300 ml를 넣어 교반하였다. 생성된 침전물을 필터하고 물로 3회 씻어준 후 고체를 건조하였다. 건조된 고체를 디클로로메탄과 노말렉산 전개액을 사용하여 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 3을 0.9 g, 20 % 수율로 얻었다.

[0679] MS (MALDI-TOF) m/z: 857 [M]⁺

[0680] 실시예 1

[0681] 애노드로서 120nm 두께의 ITO가 형성된 유리 기판을 초음파 세정 및 전처리(UV 및 O₃처리와 열처리)하였다.

[0682] 상기 애노드 상에 화합물 HT6 및 HAT-CN을 공증착하여 120nm 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0683] 상기 정공 수송층 상에 호스트인 화합물 H56 및 도펀트인 화합물 1을 98 : 2의 중량비로 공증착하여 30nm 두께의 발광층을 형성하였다.

[0684] 상기 발광층 상에 BA1q를 증착하여 5nm 두께의 정공 저지층을 형성한 다음, 상기 정공 저지층 상에 Alq3를 증착하여 25nm 두께의 전자 수송층을 형성한 후, 상기 전자 수송층 상에 LiF를 증착하여 0.5nm 두께에 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상에 Al을 증착하여 150nm 두께의 캐소드를 형성함으로써, ITO(120nm) / HT6 : HAT-CN(120nm) / H56 : 1 (2wt%) (30nm) / BA1q(5nm) / Alq(25nm) / LiF(0.5nm) / Al(150nm)의 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0685] 실시예 2

[0686] 도펀트로서 화합물 1 대신 화합물 2를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0687] 실시예 3

[0688] 도펀트로서 화합물 1 대신 화합물 3을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0689] 평가예 2

[0690] 상기 실시예 1 내지 3에서 제작된 유기 발광 소자의 구동전압, 전류밀도, 외부 양자 발광 효율 및 최대 발광 파

장을 Keithley SMU 236 및 휘도계 PR650을 이용하여 측정하였다.

[0691] 실시예 1 내지 3의 유기 발광 소자는 예를 들면, 720nm 이상의 최대 발광 파장을 갖는 근적외선을 방출하면서, 종래의 유기 발광 소자보다 저구동 전압 및 고외부 양자 발광 효율을 가짐을 확인할 수 있었다.

부호의 설명

[0692] 10, 20, 30, 40: 유기 발광 소자

110: 제1전극

150: 유기층

190: 제2전극

210: 제1캡핑층

220: 제2캡핑층

도면

도면1

10

190
150
110

도면2

20

190
150
110
210

도면3

30

220
190
150
110

도면4

40

220
190
150
110
210

专利名称(译)	有机发光器件，包括该有机发光器件的装置以及有机环金属化合物		
公开(公告)号	KR1020200034900A	公开(公告)日	2020-04-01
申请号	KR1020180114361	申请日	2018-09-21
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 层真实默里学有限公司		
[标]发明人	김명숙 예지명 유병욱 조일훈 강선우 김선재 정재호		
发明人	김명숙 예지명 유병욱 조일훈 강선우 김선재 정재호		
IPC分类号	H01L51/00 C07F15/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0084 C07F15/0006 H01L51/0087 H01L51/5012 H01L51/0072 C07F15/0086 H01L51/5016		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供一种有机发光装置，包括该有机发光装置的装置以及由式1表示的有机金属化合物。第二电极；在第一电极和第二电极之间并包括发射层的有机层，其中：有机层包括由式1表示的有机金属化合物。

10

190
150
110