



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0079757  
(43) 공개일자 2016년07월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
H01L 51/00 (2006.01) C07F 15/00 (2006.01)  
H05B 33/14 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
H01L 51/0085 (2013.01)  
C07F 15/0033 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2016-0080858(분할)  
(22) 출원일자 2016년06월28일  
심사청구일자 2016년06월28일  
(62) 원출원 특허 10-2012-0144603  
원출원일자 2012년12월12일  
심사청구일자 2014년01월27일

(71) 출원인  
삼성전자주식회사  
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)  
제일모직주식회사  
경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)  
(72) 발명자  
노창호  
경기도 수원시 영통구 봉영로 1526, 702동 1904호  
(영통동, 살구마을아파트)  
권오현  
서울특별시 송파구 올림픽로 435, 201동 202호 (신천동, 파크리오)  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
팬코리아특허법인

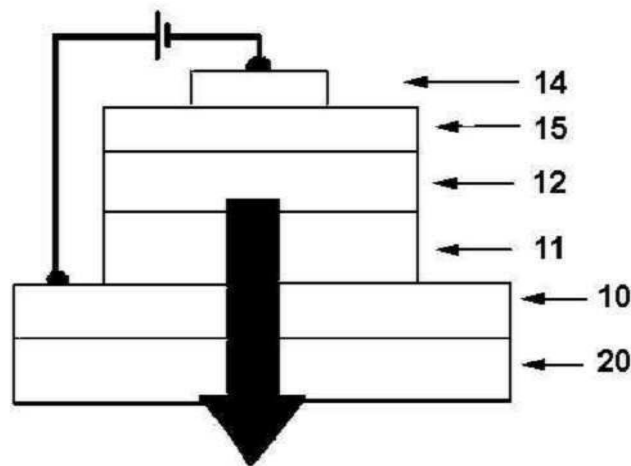
전체 청구항 수 : 총 7 항

(54) 발명의 명칭 유기 금속 착물, 이를 이용한 유기 전계 발광 소자 및 표시 장치

(57) 요약

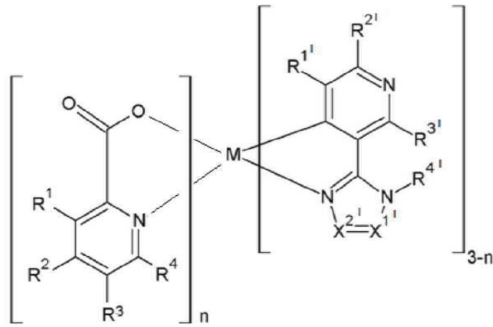
유기 금속 착물, 이를 이용한 유기 전계 발광 소자 및 표시 장치에 관한 것으로, 하기 화학식 1-S-4로 표시되는  
(뒷면에 계속)

대표도 - 도2



유기 금속 착물을 제공할 수 있다.

[화학식 1-S-4]



상기 화학식 1-S-4에 대한 정의는 명세서 내에 존재한다.

(52) CPC특허분류

*H01L 51/0067* (2013.01)

*H01L 51/0072* (2013.01)

*H01L 51/0094* (2013.01)

*H05B 33/14* (2013.01)

*C09K 2211/1007* (2013.01)

*C09K 2211/1029* (2013.01)

*C09K 2211/1044* (2013.01)

*C09K 2211/185* (2013.01)

(72) 발명자

**루파스리 라기니다스**

경기도 수원시 영통구 청명북로 81, 406동 902호  
(영통동, 청명마을주공아파트)

**드미트리 크라프추크**

경기도 화성시 메타폴리스로 6, 307동 1002호 (반  
송동, 동탄시범다운마을 삼성래미안)

**최현호**

서울특별시 송파구 올림픽로 435, 315동 2102호 (신천동, 파크리오)

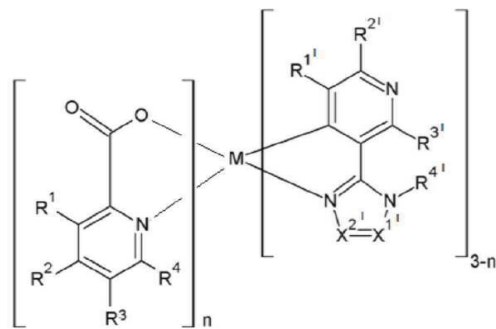
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

하기 화학식 1-S-4로 표시되는 유기 금속 착물:

[화학식 1-S-4]



상기 화학식 1-S-4에서,

M은 Ir, Os 또는 Pt이고,

$X^{1'}$  및  $X^{2'}$ 은 서로 독립적으로 CR'이고,

$R^{1'}$  내지  $R^{4'}$  및 R'는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기  $R^{3'}$  및  $R^{4'}$ 는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,

n은 1 또는 2이고,

$R^1$  내지  $R^4$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기이고, 상기  $R^1$  내지  $R^4$  중 인접한 치환기는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,

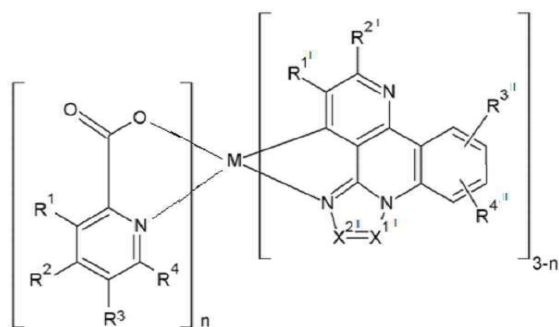
여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

#### 청구항 2

제1항에 있어서,

상기 유기 금속 착물은 하기 화학식 2-S-4로 표시되는 유기 금속 착물:

[화학식 2-S-4]



상기 화학식 2-S-4에서,

M은 Ir, Os 또는 Pt 이고,

X<sup>1'</sup> 및 X<sup>2'</sup>은 서로 독립적으로 CR'이고,

R<sup>1'</sup>, R<sup>2'</sup>, R<sup>3'</sup>, R<sup>4'</sup> 및 R'는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기 R<sup>3''</sup> 및 R<sup>4''</sup>는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,

n은 1 또는 2이고,

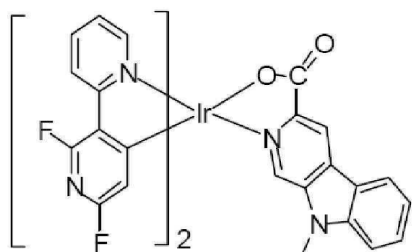
R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기이고, 상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup> 중 인접한 치환기는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,

여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

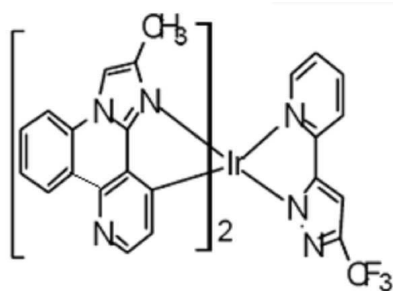
### 청구항 3

하기 화학식 A-5, A-7 내지 A-11, A-13, A-15 내지 A-17, A-20, A-22, A-25, A-26 및 A-29 어느 하나로 표시되는 유기 금속 착물.

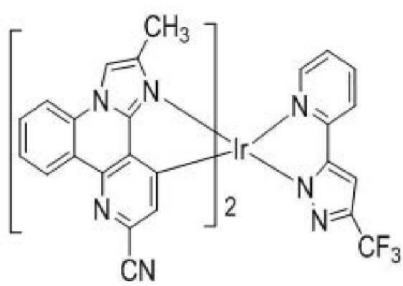
[A-5]



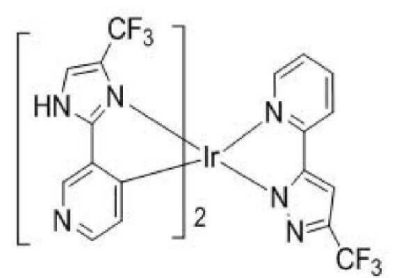
[A-7]



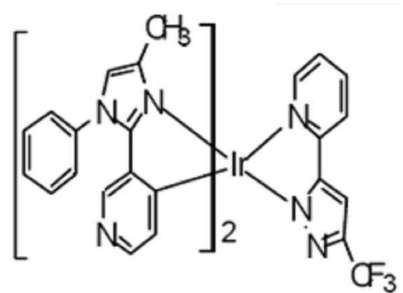
[A-8]



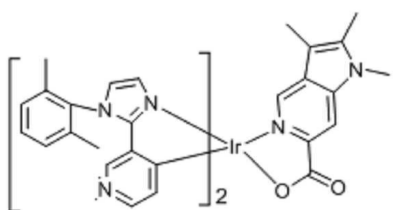
[A-9]



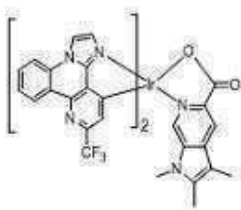
[A-10]



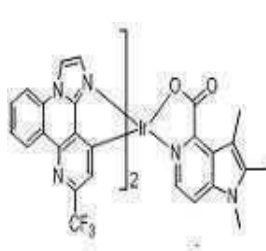
[A-11]



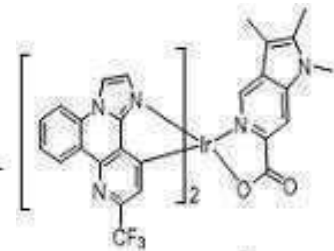
[A-13]



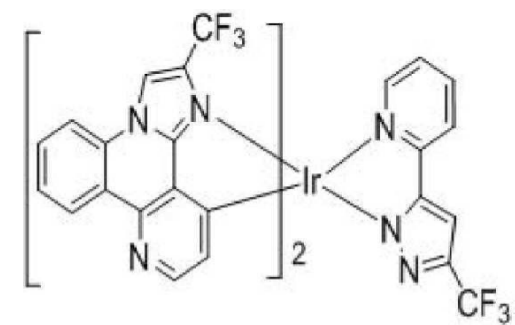
[A-15]



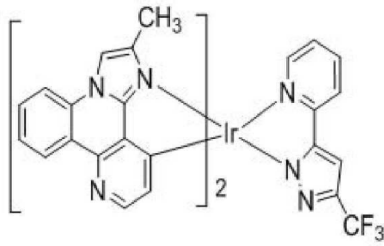
[A-16]



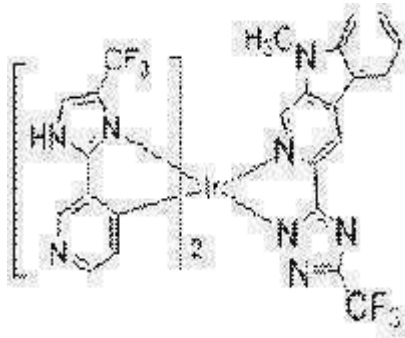
[A-17]



[A-20]

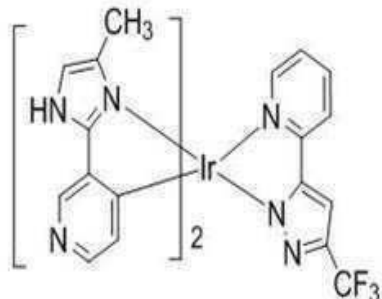
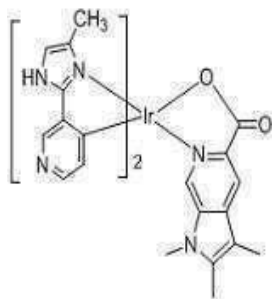


[A-22]

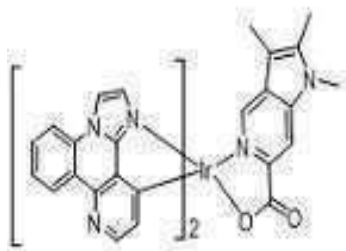


[A-25]

[A-26]



[A-29]



#### 청구항 4

한 쌍의 전극 사이에 유기막을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 있어서,  
상기 유기막은 제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 따른 유기 금속 착물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 5

제4항에 있어서,  
상기 유기막은 발광층인 유기 전계 발광 소자.

## 청구항 6

제5항에 있어서,

상기 유기 금속 착물의 함량은 상기 발광층의 총중량 100중량부를 기준으로 하여 1 내지 30중량부인 유기 전계 발광 소자.

## 청구항 7

제4항에 따른 유기 전계 발광 소자를 포함하는 표시 장치.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명의 일 구현예는 유기금속 착물, 이를 이용한 유기 전계 발광 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)는 형광성 또는 인광성 유기 화합물 박막(이하, 유기막이라고 함)에 전류를 흘려주면, 전자와 정공이 유기막에서 결합하면서 빛이 발생하는 현상을 이용한 능동 발광형 표시 소자로서, 경량, 부피가 간소하고 제작공정이 간단한 구조를 갖고 있고 고화질에 광시야각을 확보하고 있다. 또한 고색순도 및 동영상상을 완벽하게 구현할 수 있고, 저소비 전력, 저전압 구동으로 휴대용 전자기기에 적합한 전기적 특성을 갖고 있다.

[0003] 일반적인 유기 전계 발광 소자는 기관 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가지고 있다. 여기에서 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층은 유기 화합물로 이루어진 유기막들이다. 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 전계 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다. 상기 애노드 및 캐소드 간에 전압을 인가하면 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송층을 경유하여 발광층에 이동된다. 한편, 전자는 캐소드로부터 전자 수송층을 경유하여 발광층에 주입되고 발광층 영역에서 캐리어들이 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 방사감쇠(radiative decay)되면서 물질의 밴드 갭(band gap)에 해당하는 파장의 빛이 방출되는 것이다.

[0004] 상기 유기 전계 발광 소자의 발광층 형성재료는 그 발광 메커니즘에 따라 일중항 상태의 엑시톤을 이용하는 형광 물질과, 삼중항 상태를 이용하는 인광 물질로 구분가능하다. 이러한 형광 물질 또는 인광 물질을 자체적으로 또는 적절한 호스트 물질에 도핑하여 발광층을 형성하며, 전자 여기 결과, 호스트에 일중항 엑시톤과 삼중항 엑시톤이 형성된다. 이 때 일중항 엑시톤과 삼중항 엑시톤의 통계적 생성비율은 1:3이다.

[0005] 발광층 형성재료로서 형광물질을 사용하는 유기 전계 발광 소자에 있어서, 호스트에서 생성된 삼중항이 낭비된다는 불리한 점을 안고 있는 반면, 발광층 형성재료로서 인광물질을 사용하는 경우에는 일중항 엑시톤과 삼중항 엑시톤을 모두 사용할 수 있어 내부양자효율 100%에 도달할 수 있는 장점을 갖고 있다. 따라서 발광층 형성재료로 인광 물질을 사용할 경우, 형광 물질보다 높은 발광 효율을 가질 수 있다.

[0006] 유기 분자에 Ir, Pt, Rh, Pd과 같은 중금속을 도입하게 되면 중금속원자 효과(heavy atom effect)에 의해 발생하는 스핀-오비탈 커플링(spin-orbital coupling)을 통해서 삼중항 상태와 일중항 상태가 섞이게 되는데, 이로 인해 금지되었던 천이가 가능하게 되고 상온에서도 효과적으로 인광이 일어날 수 있게 된다.

[0007] 상술한 바와 같이 인광을 이용한 고효율 발광 재료로서, 이리듐(Iridium), 백금(platinum) 등의 전이 금속을 포함한 전이 금속 화합물을 이용한 여러 물질들이 발표되고 있지만, 고효율의 풀컬러 표시소자를 위한 인광물질이 여전히 요구되고 있다.

### 발명의 내용

### 해결하려는 과제

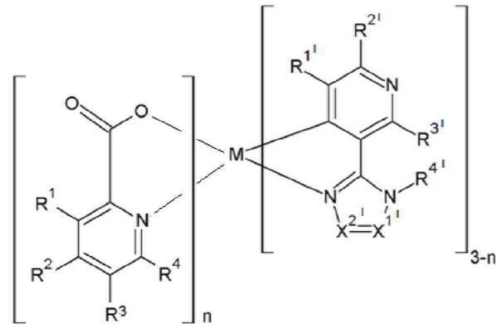
[0008] 본 발명의 일 구현예에서는 효율적으로 발광할 수 있는 유기 금속 착물을 제공할 수 있다.

- [0009] 또한 본 발명의 일 구현예에서는 상기 유기 금속 착물을 채용한 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.
- [0010] 또한 본 발명의 일 구현예에서는, 상기 유기 전계 발광 소자를 포함하는 표시 장치를 제공할 수 있다.

### 과제의 해결 수단

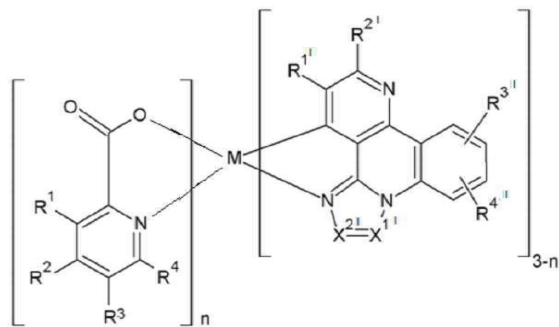
- [0011] 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1-S-4로 표시되는 유기 금속 착물을 제공한다.

- [0012] [화학식 1-S-4]



- [0013]
- [0014] 상기 화학식 1-S-4에서,
- [0015] M은 Ir, Os 또는 Pt이고,
- [0016] X<sup>1'</sup> 및 X<sup>2'</sup>은 서로 독립적으로 CR'이고,
- [0017] R<sup>1'</sup> 내지 R<sup>4'</sup> 및 R'는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기 R<sup>3'</sup> 및 R<sup>4'</sup>는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,
- [0018] n은 1 또는 2이고,
- [0019] R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기이고, 상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup> 중 인접한 치환기는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,
- [0020] 여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.
- [0021] 상기 유기 금속 착물은 하기 화학식 2-S-4로 표시될 수 있다.

- [0022] [화학식 2-S-4]

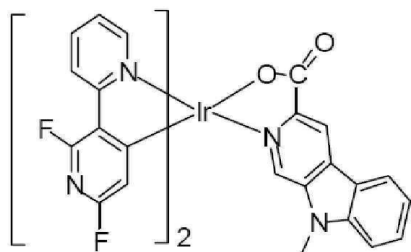


- [0023]
- [0024] 상기 화학식 2-S-4에서,
- [0025] M은 Ir, Os 또는 Pt 이고,



- [0026]  $X^{1'}$  및  $X^{2'}$ 은 서로 독립적으로  $CR'$ 이고,
- [0027]  $R^{1'}$ ,  $R^{2'}$ ,  $R^{3'}$ ,  $R^{4'}$  및  $R'$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기  $R^{3'}$  및  $R^{4'}$ 는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,
- [0028]  $n$ 은 1 또는 2이고,
- [0029]  $R^1$  내지  $R^4$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기이고, 상기  $R^1$  내지  $R^4$  중 인접한 치환기는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,
- [0030] 여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.
- [0031] 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 A-5, A-7 내지 A-11, A-13, A-15 내지 A-17, A-20, A-22, A-25, A-26 및 A-29 어느 하나로 표시되는 유기 금속 착물을 제공한다.

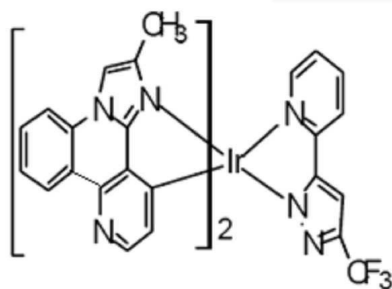
[0032] [A-5]



[0033]

[0034] [A-7]

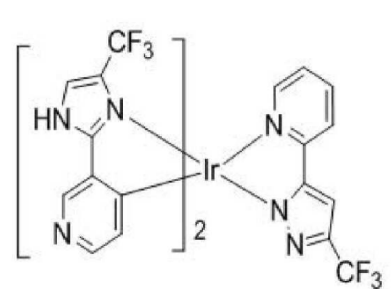
[A-8]



[0035]

[0036] [A-9]

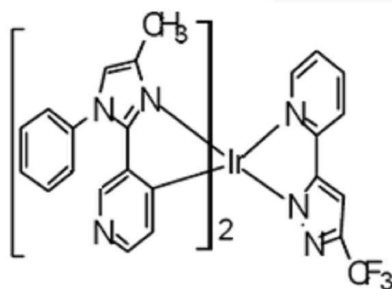
[A-10]

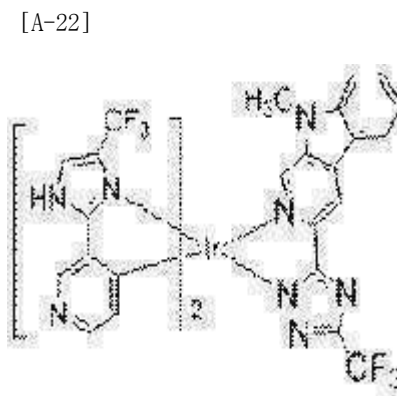
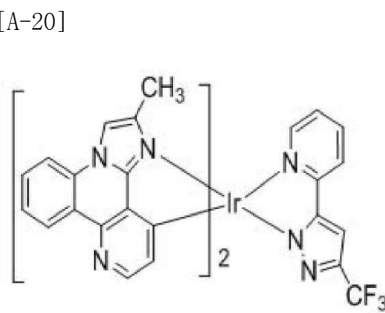
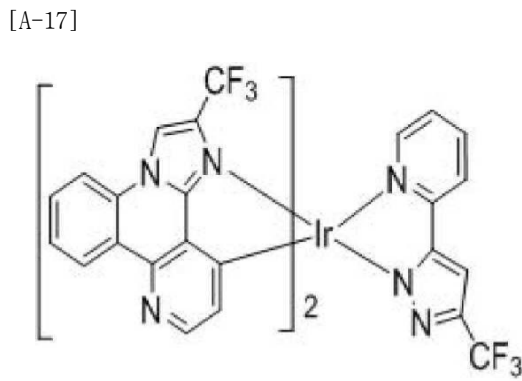
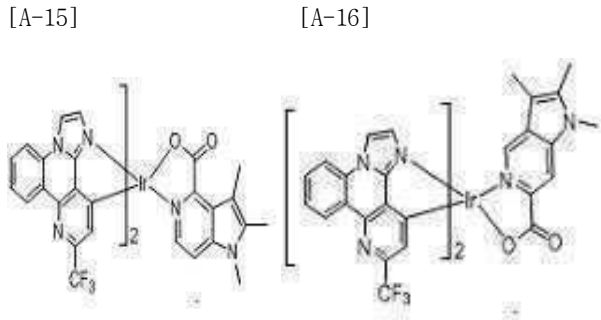
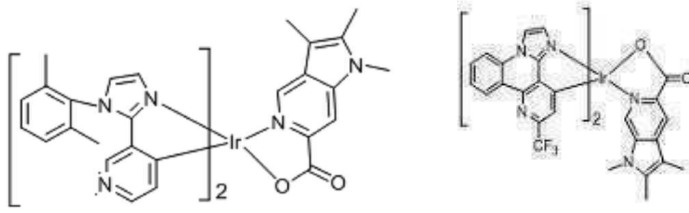


[0037]

[0038] [A-11]

[A-13]

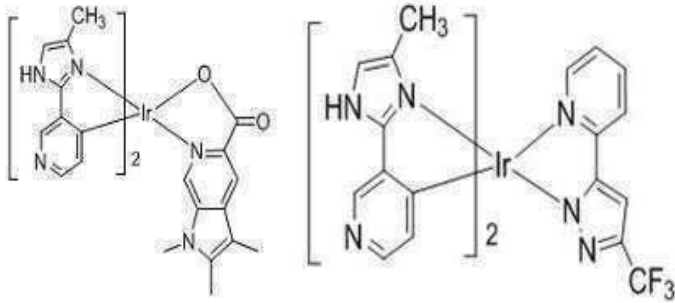




[0049]

[A-25]

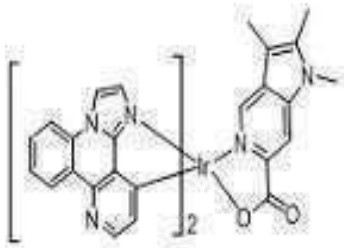
[A-26]



[0050]

[0051]

[A-29]



[0052]

[0053]

일 구현예에 따르면, 한 쌍의 전극 사이에 위치하고 상기 유기 금속 착물을 포함하는 유기막을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0054]

상기 유기막은 발광층일 수 있다.

[0055]

상기 유기 금속 착물의 함량은 발광층의 총중량 100중량부를 기준으로 하여 1 내지 30중량부일 수 있다.

[0056]

일 구현예에 따르면, 상기 유기 전계 발광 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

### 발명의 효과

[0057]

본 발명의 일 구현예에 따른 유기 금속 착물은 효율적으로 발광할 수 있으며, 이러한 유기 금속 착물은 유기 전계 발광 소자의 유기막 형성시 이용할 수 있으며, 고효율의 인광재료로서 청색 영역에서부터 적색 영역까지 발광한다.

### 도면의 간단한 설명

[0058]

도 1a 내지 1f는 본 발명의 일구현예에 따른 유기 전계 발광 소자의 적층 구조를 개략적으로 나타낸다.

도 2는 본 발명의 일 구현예에 따라 제조된 유기 전계 발광 소자를 나타낸 것이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0059]

이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0060]

본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

[0061]

또한 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다.

[0062] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0063] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.

[0064] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"이란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

[0065] 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0066] 상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

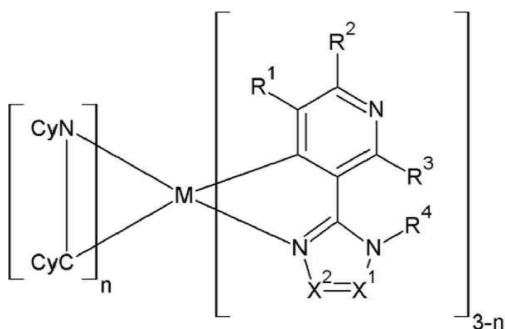
[0067] "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미한하고, 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0068] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

[0069] 본 명세서에서 "헤테로고리기(heterocyclic group)"는 헤테로 원자를 포함하는 사이클로(cyclo) 작용기를 의미하는 것으로, 예를 들어 헤테로 원자를 포함하는 사이클로 알킬기, 2원 이상의 헤테로원자를 포함하는 사이클로 알킬기 등일 수 있다.

[0070] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 착물을 제공한다.

[0071] [화학식 1]



[0072]

[0073] 상기 화학식 1에서, M은 Ir, Os, Pt, Pb, Re, Ru 또는 Pd이고, CyN은 M과 결합하는 질소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60 헤테로고리기(heterocyclic group) 또는 M과 결합하는 질소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 헤테로아릴기이고, CyC는 M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C4 내지 C60 탄소 고리기, M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 헤테로고리기, M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 아릴기 또는 M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 헤테로아릴기이고, 상기 CyN-CyC는 질소(N)와 탄소(C)를 통하여 M과 결합되어 있는 사이클로메탈화 리간드(cyclometalating ligand)를 나타내고, X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup>은 서로 독립적으로, N 또는 CR'이고, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup> 및 R'는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기를 가지는 트리알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기와 C6 내지 C30 아릴기를 가지는 디알킬아

릴실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30의 아릴기를 가지는 트리아릴실릴기이고, 상기  $R^3$  및  $R^4$ 는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고, n은 0 내지 2 중 어느 하나의 정수이다.

[0074] 상기 본 발명의 일 구현예는 새로운 형태의 보조 리간드(ancillary ligand)를 도입한 상기 화학식 1의 유기 금속 착물을 제공할 수 있다.

[0075] 이와 같은 구조의 유기 금속 착물에서는 삼중항 MLCT로부터 충분한 RGB 발광을 제공할 수 있게 된다. 이와 같은 착물은 400 내지 700nm 영역에서 발광하는, 열적으로 안정한 고효율 인광물질에 해당하므로, OLED 등의 분야에서 RGB 색상 또는 백색 광을 제공할 수 있게 된다.

[0076] 상기 화학식 1의 유기 금속 착물에서 M은 사이클로메탈화 리간드 및/또는 보조 리간드와 결합하는 중심금속으로서, 예를 들어 Ir, Os, Pt, Pb, Re, Ru 또는 Pd을 사용할 수 있고, 보다 구체적으로 Ir 또는 Pt을 사용할 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0077] 상기 화학식 1의 CyN은 중심금속인 M과 직접적으로 배위결합을 형성하는 질소원자를 포함하는 헤테로고리기 혹은 헤테로아릴기를 나타낸다. 상기 헤테로 고리기는 고리를 형성하는 주요 원소로서 N, O, S 및/또는 P와 같은 헤테로 원자를 포함하는 C3 내지 C60 치환 또는 비치환된 헤테로고리기를 나타내며, 구체적인 예로서 피롤리딘(pyrrolidine), 모르폴린(morpholine), 티오모르폴린(thiomorpholine), 티아졸리딘(thiazolidine) 등이 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0078] 상기 헤테로아릴기는 고리를 형성하는 주요 원소로서 N, O, S 및/또는 P와 같은 헤테로 원자를 포함하는 C3 내지 C60 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기를 나타내며, 구체적인 예로서, 피리딘, 4-메톡시 피리딘, 퀴놀린, 피롤, 인돌, 피라진(pyrazine), 피라졸(pyrazole), 이미다졸, 피리미딘(pyrimidine), 퀴나졸린(quinazoline), 티아졸(thiazole), 옥사졸(oxazole), 트리아진(triazine), 1,2,4-트리아졸(triazole) 등이 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

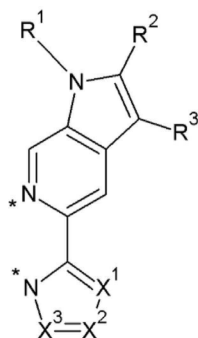
[0079] 상기 화학식 1의 CyC에서, M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C4 내지 C60 탄소고리기의 구체적인 예로서, 사이클로헥산, 사이클로펜탄 등이 있고, 상기 M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로고리기의 구체적인 예로서 테트라하이드로퓨란, 1,3-디옥산, 1,3-디티안(1,3-dithiane), 1,3-디티오란(1,3-dithiolane), 1,4-디옥사-8-아자스피로[4,5]데칸{1,4-dioxo-8-azaspiro[4,5]decane}, 1,4-디옥사스피로[4,5]데칸-2-온{1,4-dioxaspiro[4,5]decan-2-one} 등이 있고, 상기 M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 60 아릴기의 구체적인 예로서, 페닐, 1,3-벤조디옥솔(benzodioxole), 비페닐, 터페닐, 나프탈렌, 안트라센, 아줄렌(azulene) 등이 있고, 상기 M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 헤테로아릴기의 구체적인 예로서 티오펜(thiophene), 퓨란2(5H)-퓨라논(furan2(5H)-furanone), 피리딘, 쿠마린(coumarin), 이미다졸, 2-페닐피리딘, 2-벤조티아졸, 2-벤조옥사졸, 1-페닐피라졸, 1-나프틸피라졸(1-naphthylpyrazole), 5-(4-메톡시페닐)피라졸, 2,5-비스페닐-1,3,4-옥사디아졸, 2,3-벤조퓨란2-(4-비페닐)-6-페닐 벤조옥사졸 등을 들 수 있으며, 이들에 존재하는 하나 이상의 수소원자는 C1 내지 C10 직쇄형 또는 분지형 알콕시기, 시아노기, 할로겐원자 등으로 치환될 수 있다.

[0080] 상기 화학식 1에서, CyN-CyC의 각 치환기는 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 4-7 원자 고리기 또는 치환 또는 비치환된 4-7 원자 헤테로 고리기를 형성하며, 보다 구체적으로 축합 4-7 원자 고리 또는 헤테로고리기를 형성할 수 있다. 여기서 고리기 또는 헤테로 고리기는 C1 내지 C30 사이클로알킬기, C1 내지 C30 헤테로사이클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기 또는 C4 내지 C30 헤테로아릴기를 나타내고, 각 고리기 또는 헤테로 고리기는 하나 또는 그 이상의 치환체에 의해서 치환될 수 있다. 여기에서 "헤테로"의 의미는 N, O, P, S 등과 같은 헤테로원자를 포함하는 경우를 지칭한다.

[0081] 상기 화학식 1의 화합물에서 하나 이상의 수소는 다양한 치환기로 치환될 수 있으며, 이와 같은 치환체는 할로겐 원자,  $-OR^1$ ,  $-N(R^1)_2$ ,  $-P(R^1)_2$ ,  $-POR^1$ ,  $-PO_2R^1$ ,  $-PO_3R^1$ ,  $-SR^1$ ,  $-Si(R^1)_3$ ,  $-B(R^1)_2$ ,  $-B(OR^1)_2$ ,  $-C(O)R^1$ ,  $-C(O)OR^1$ ,  $-C(O)N(R^1)$ ,  $-CN$ ,  $-NO_2$ ,  $-SO_2$ ,  $-SOR^1$ ,  $-SO_2R^1$ ,  $-SO_3R^1$ 이고, 상기  $R^1$ 은 수소, 할로겐원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C40 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C40 알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C40 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 헤테로아릴알킬기 중에서 선택된다.

[0082] 보다 구체적으로, 상기 사이클로메탈화 리간드(CyN-CyC)가 하기 화학식 S-1로 표시될 수 있다.

[0083] [화학식 S-1]



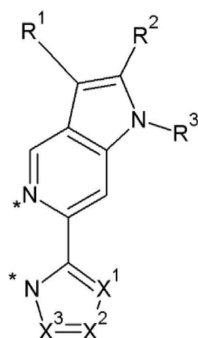
[0084]

[0085] 상기 화학식 S-1에서,  $X^1$  내지  $X^3$ 은 서로 독립적으로, N 또는 CR'이고, 상기  $X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 어느 하나는 N이고,  $R^1$  내지  $R^3$  및 R'는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기를 가지는 트리알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기와 C6 내지 C30 아릴기를 가지는 디알킬아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30의 아릴기를 가지는 트리아릴실릴기이고, 상기  $R^1$  내지  $R^3$  중 둘 이상은 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고, \*는 상기 화학식 1의 M과의 결합위치를 나타낸다.

[0086] 상기 화학식 S-1과 같은 보조 리간드를 사용하는 경우, 얻어진 EL 소자의 수명 및 효율이 개선될 수 있다.

[0087] 보다 구체적으로, 상기 사이클로메탈화 리간드(CyN-CyC)가 하기 화학식 S-2로 표시될 수 있다.

[0088] [화학식 S-2]



[0089]

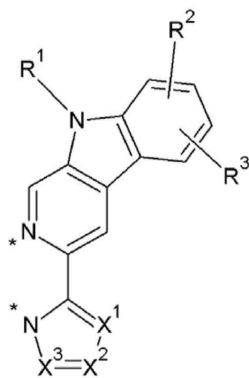
[0090] 상기 화학식 S-2에서,  $X^1$  내지  $X^3$ 은 서로 독립적으로, N 또는 CR'이고, 상기  $X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 어느 하나는 N이고,  $R^1$  내지  $R^3$  및 R'는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기를 가지는 트리알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기와 C6 내지 C30 아릴기를 가지는 디알킬아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30의 아릴기를 가지는 트리아릴실릴기이고, 상기  $R^1$  내지  $R^3$  중 둘 이상은 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고, \*는 상기 화학식 1의 M과의 결합위치를 나타낸다.

[0091] 상기 화학식 S-2과 같은 보조 리간드를 사용하는 경우, 소자의 효율 및 수명이 개선될 수 있다.

[0092] 보다 구체적으로, 상기 사이클로메탈화 리간드(CyN-CyC)가 하기 화학식 S-3으로 표시될 수 있다.



[0093] [화학식 S-3]



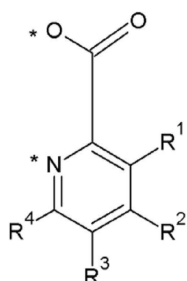
[0094]

[0095] 상기 화학식 S-3에서,  $X^1$  내지  $X^3$ 은 서로 독립적으로, N 또는  $CR'$ 이고, 상기  $X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 어느 하나는 N이고,  $R^1$  내지  $R^3$  및  $R'$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기,  $SF_5$ , 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기를 가지는 트리알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기와 C6 내지 C30 아릴기를 가지는 디알킬아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30의 아릴기를 가지는 트리아릴실릴기이고, \*는 상기 화학식 1의 M과의 결합위치를 나타낸다.

[0096] 상기 화학식 S-3과 같은 보조 리간드를 사용하는 경우, 청색 인광 특성이 개선될 수 있다.

[0097] 보다 구체적으로, 상기 사이클로메탈화 리간드(CyN-CyC)가 하기 화학식 S-4로 표시될 수 있다.

[0098] [화학식 S-4]



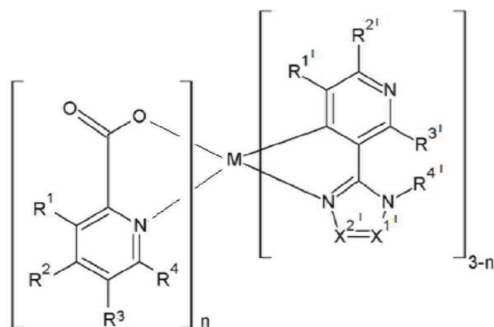
[0099]

[0100] 상기 화학식 S-4에서,  $R^1$  내지  $R^4$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기,  $SF_5$ , 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기를 가지는 트리알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기와 C6 내지 C30 아릴기를 가지는 디알킬아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30의 아릴기를 가지는 트리아릴실릴기이고, 상기  $R^1$  내지  $R^4$  중 인접한 치환기는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고, \*는 상기 화학식 1의 M과의 결합위치를 나타낸다.

[0101] 상기 화학식 S-4와 같은 보조 리간드를 사용하는 경우, 청색 인광 소자의 특성이 개선될 수 있다.

[0102] 보다 구체적으로, 상기 유기 금속 착물은 하기 화학식 1-S-4로 표시될 수 있다.

[0103] [화학식 1-S-4]



[0104]

[0105] 상기 화학식 1-S-4에서,

[0106] M은 Ir, Os 또는 Pt이고,

[0107] X<sup>1'</sup> 및 X<sup>2'</sup>은 서로 독립적으로 CR'이고,

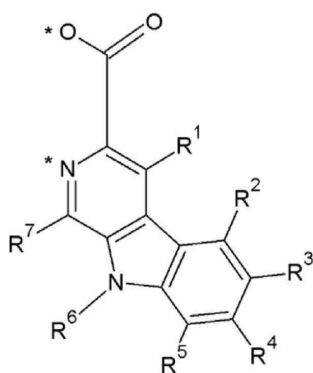
[0108] R<sup>1'</sup> 내지 R<sup>4'</sup> 및 R'는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기 R<sup>3'</sup> 및 R<sup>4'</sup>는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,

[0109] n은 1 또는 2이고,

[0110] R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기이고, 상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup> 중 인접한 치환기는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있다.

[0111] 보다 구체적으로, 상기 사이클로메탈화 리간드(CyN-CyC)가 하기 화학식 S-5로 표시될 수 있다.

[0112] [화학식 S-5]



[0113]

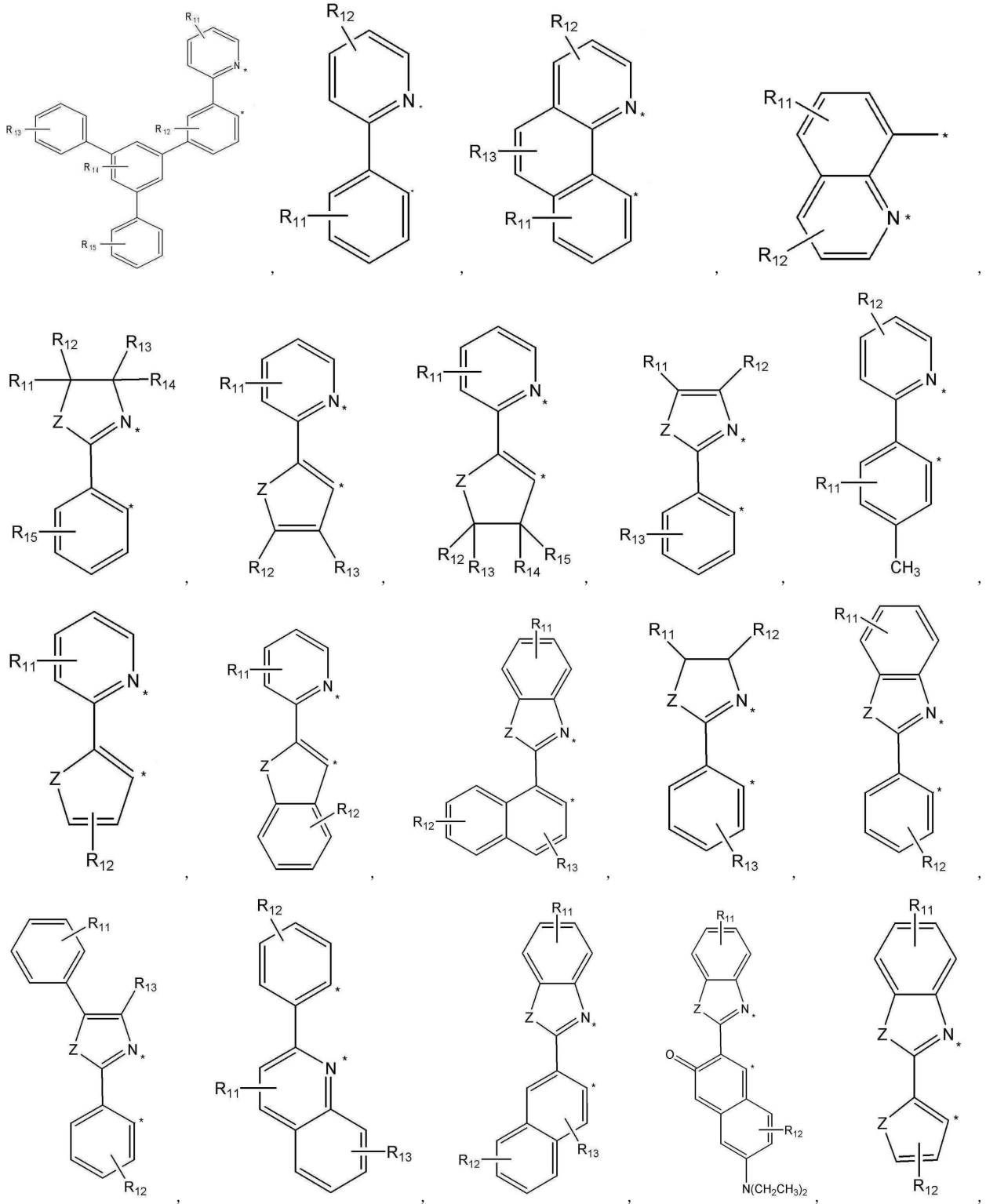
[0114] 상기 화학식 S-5에서, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>7</sup>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기를 가지는 트리알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기와 C6 내지 C30 아릴기를 가지는 디알킬아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30의 아릴기를 가지는 트리알킬실릴기이고, \*는 상기 화학식 1의 M과의 결합위치를 나타낸다.

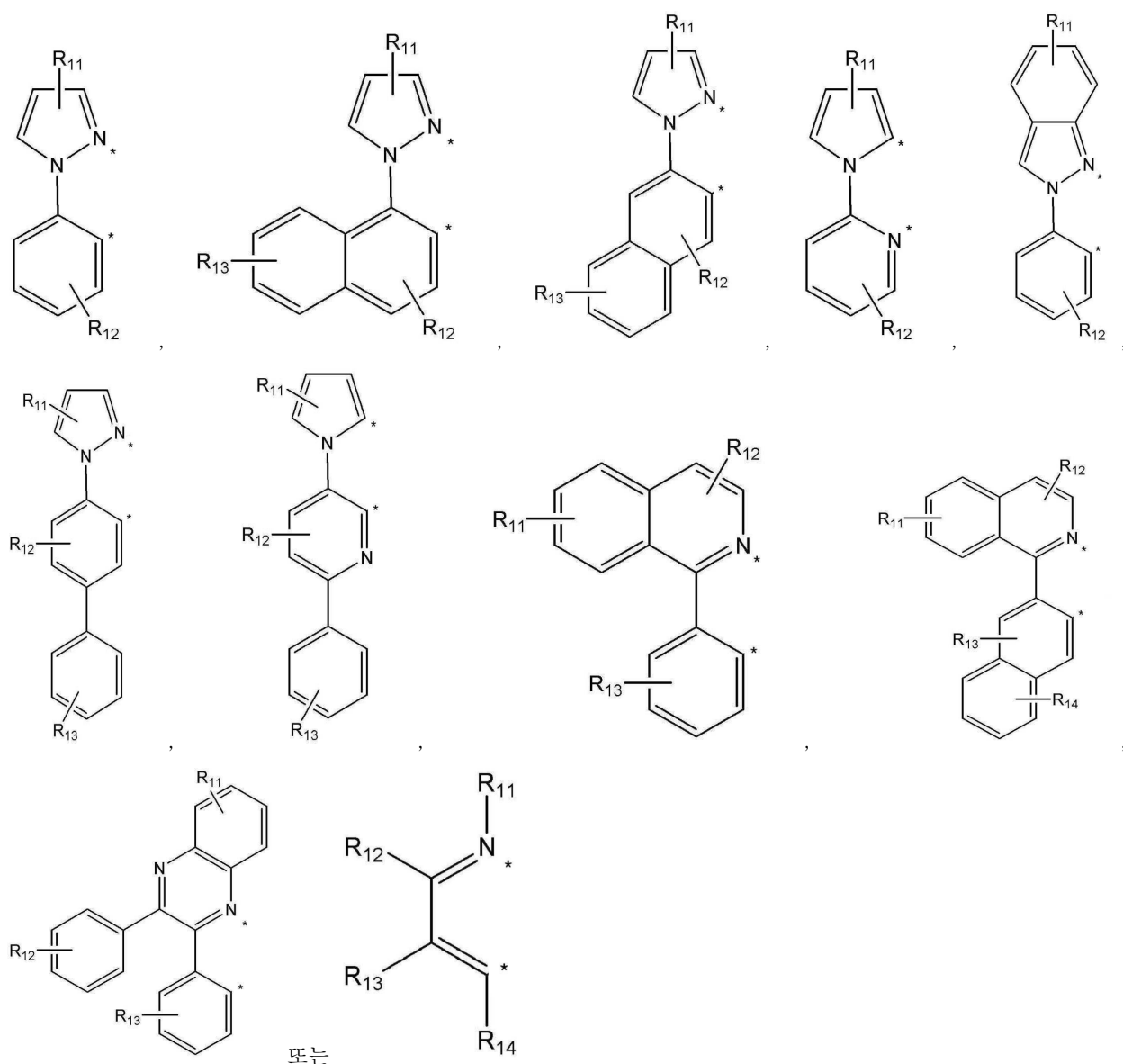
[0115] 상기 화학식 S-5와 같은 보조 리간드를 사용하는 경우, 발광 파장의 색순도가 향상되고 소자의 효율이 개선될 수 있다.

[0116] 구체적인 예를 들어, 상기 사이클로메탈화 리간드(CyN-CyC)가 하기 화학식 중 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에



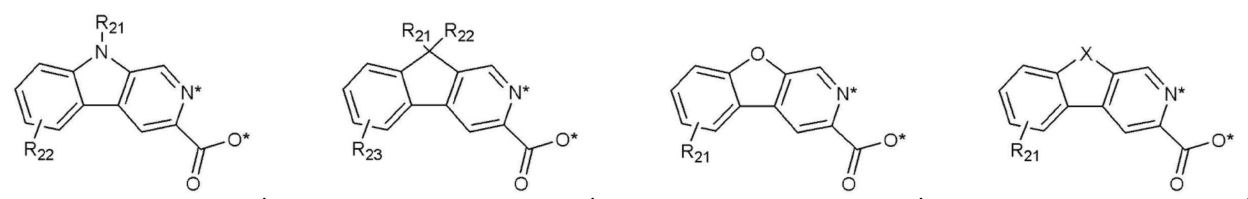
제한되는 것은 아니다.

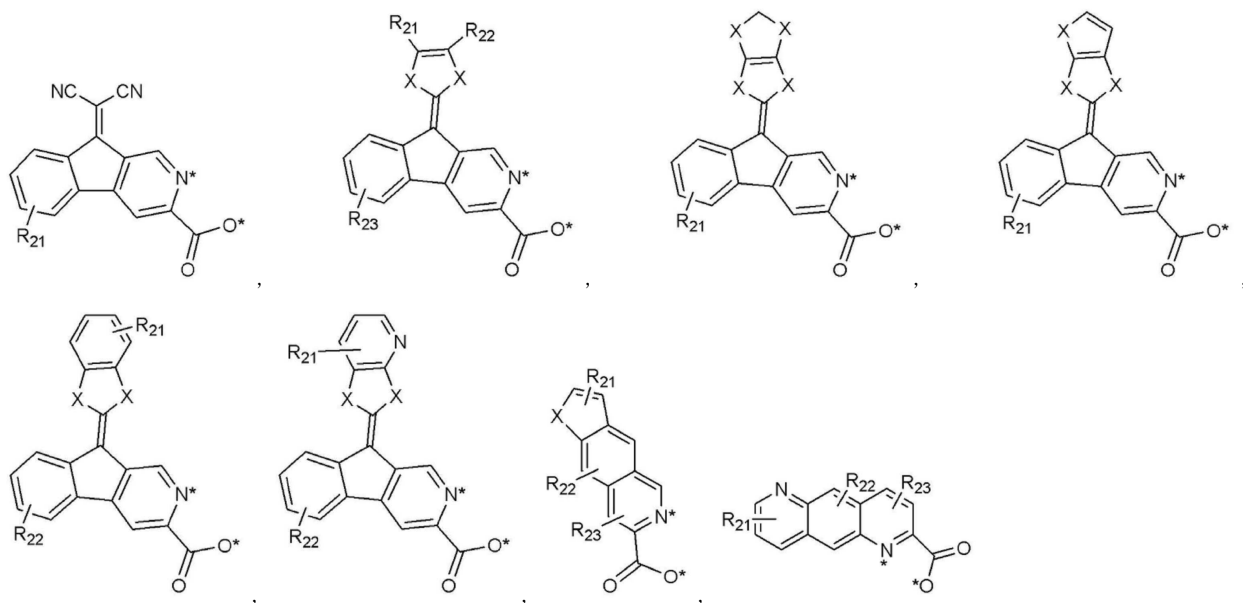




[0118] 상기 식 중,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$  및  $R^{15}$ 는 서로 독립적으로 일치환 또는 다치환된 작용기로서, 수소, 할로젠 원자, -OR, -N(R)<sub>2</sub>, -P(R)<sub>2</sub>, -POR, -PO<sub>2</sub>R, -PO<sub>3</sub>R, -SR, -Si(R)<sub>3</sub>, -B(R)<sub>2</sub>, -B(OR)<sub>2</sub>, -C(O)R, -C(O)OR, -C(O)N(R), -CN, -NO<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>, -SOR, -SO<sub>2</sub>R, -SO<sub>3</sub>R, C1 내지 C20 알킬기, 또는 C6 내지 C20 아릴기이고, 상기 R은 수소, 중수소, 할로젠원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C40 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C40 알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C40 헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 헤테로아릴알킬기 중에서 선택되고, Z는 S, O 또는  $NR^0$ ( $R^0$ 은 수소 또는 C1 내지 C20 알킬기임)이고, \*는 상기 화학식 1의 M과의 결합위치를 나타낸다.

[0119] 구체적인 예를 들어, 상기 사이클로메탈화 리간드(CyN-CyC)가 하기 화학식 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

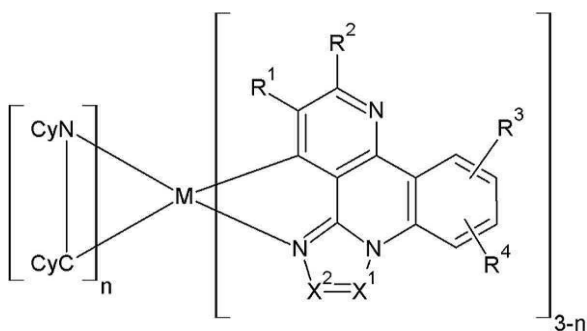




[0121] 상기 식 중, R<sub>21</sub>, R<sub>22</sub>, 및 R<sub>23</sub> 은 서로에 관계없이 일치환 또는 다치환된 작용기로서, 수소, 할로젠 원자, -OR, -N(R)<sub>2</sub>, -P(R)<sub>2</sub>, -POR, -PO<sub>2</sub>R, -PO<sub>3</sub>R, -SR, -Si(R)<sub>3</sub>, -B(R)<sub>2</sub>, -B(OR)<sub>2</sub>, -C(O)R, -C(O)OR, -C(O)N(R), -CN, -NO<sub>2</sub>, -SO<sub>2</sub>, -SOR, -SO<sub>2</sub>R, -SO<sub>3</sub>R, C1 내지 C20 알킬기, 또는 C6 내지 C20 아릴기이고, 상기 R은 수소, 할로젠원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C40 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C40 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C40 알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C40 헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 헤테로아릴알킬기 중에서 선택되고, 상기 X는 산소 또는 황을 나타내고, \*는 상기 화학식 1의 M과의 결합위치를 나타낸다.

[0122] 보다 구체적으로, 상기 유기 금속 착물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0123] [화학식 2]



[0124]

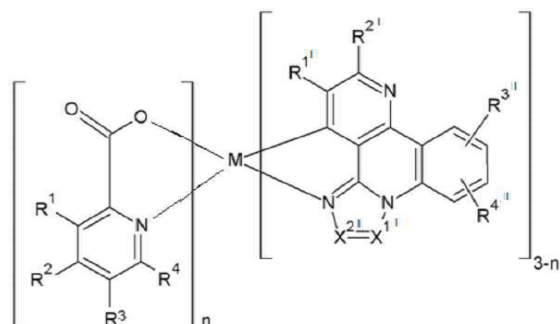
[0125] 상기 화학식 2에서, M은 Ir, Os, Pt, Pb, Re, Ru 또는 Pd이고, CyN은 M과 결합하는 질소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C60 헤테로고리기(heterocyclic group) 또는 M과 결합하는 질소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 헤테로아릴기이고, CyC는 M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C4 내지 C60 탄소 고리, M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 헤테로고리, M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 아릴기 또는 M과 결합하는 탄소를 포함하는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C60 헤테로아릴기이고, 상기 CyN-CyC는 질소(N)와 탄소(C)를 통하여 M과 결합되어 있는 사이클로메탈화 리간드(cyclometalating ligand)를 나타내고, X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup>은 서로 독립적으로, N 또는 CR'이고, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup> 및 R'는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬

기를 가지는 트리알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기와 C6 내지 C30 아릴기를 가지는 디알킬아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30의 아릴기를 가지는 트리아릴실릴기이고, n은 0 내지 2 중 어느 하나의 정수이다.

[0126] 상기 화학식 2와 같은 리간드 구조의 경우, 청색 인광 특성의 색순도가 개선될 수 있다.

[0127] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1-S-4로 표시되는 유기 금속 착물은 예컨대 하기 화학식 2-S-4로 표시될 수 있다.

[0128] [화학식 2-S-4]



[0129]

상기 화학식 2-S-4에서,

[0130]

M은 Ir, Os 또는 Pt 이고,

[0131]

X<sup>1'</sup> 및 X<sup>2'</sup>은 서로 독립적으로 CR'이고,

[0132]

R<sup>1'</sup>, R<sup>2'</sup>, R<sup>3'</sup>, R<sup>4'</sup> 및 R'는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기 R<sup>3'</sup> 및 R<sup>4'</sup>는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있고,

[0133]

n은 1 또는 2이고,

[0134]

R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아미노기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기이고, 상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup> 중 인접한 치환기는 서로 융합하여 융합고리를 형성할 수 있다.

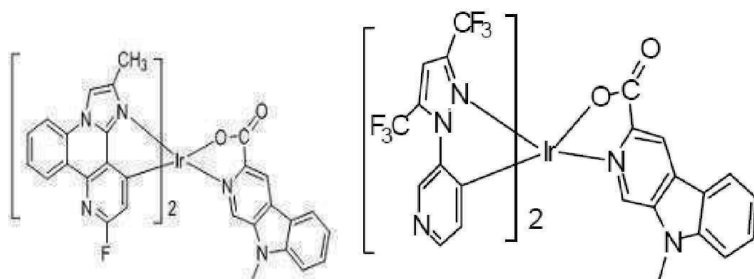
[0135]

구체적인 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-29 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0136]

[A-1]

[A-2]

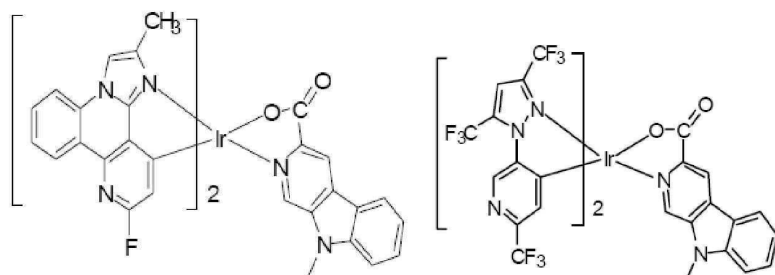


[0138]

[0139]

[A-3]

[A-4]

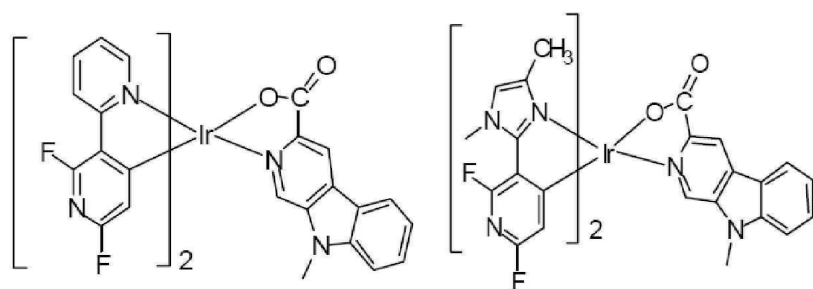


[0140]

[0141]

[A-5]

[A-6]

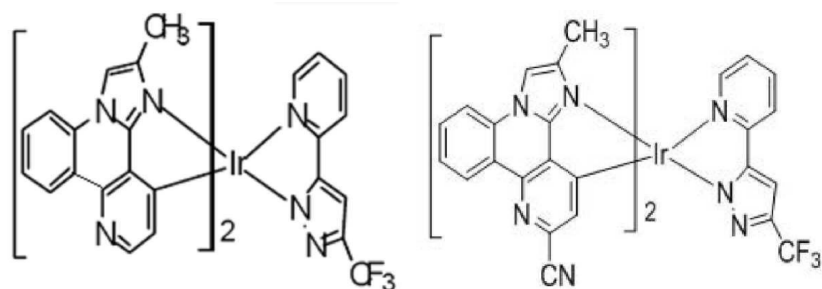


[0142]

[0143]

[A-7]

[A-8]



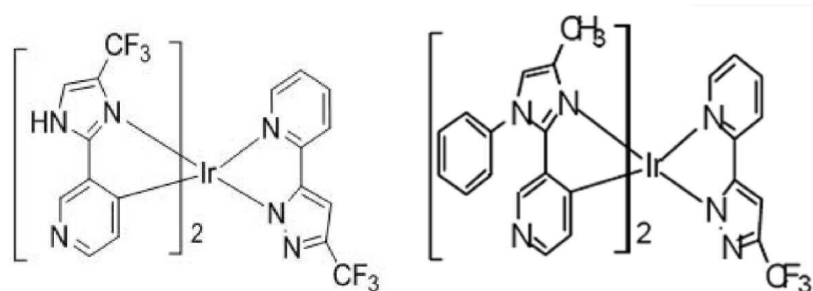
[0145]

\*

[0146]

[A-9]

[A-10]



[0147]

[0148]

[A-11]

[A-12]

[0149]

[A-13]

[A-14]

[0150]

[0151]

[0152]

[A-15]

[A-16]

[0153]

[0154]

[A-17]

[A-18]

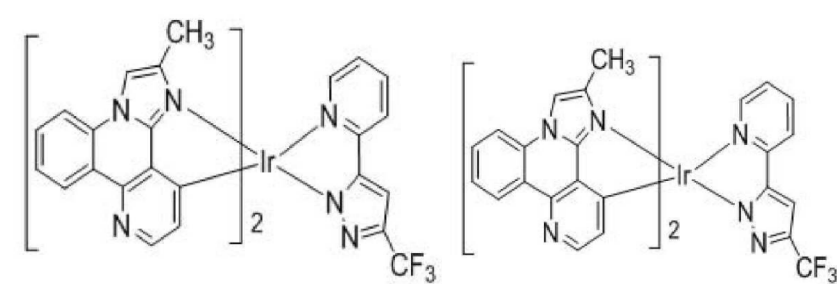
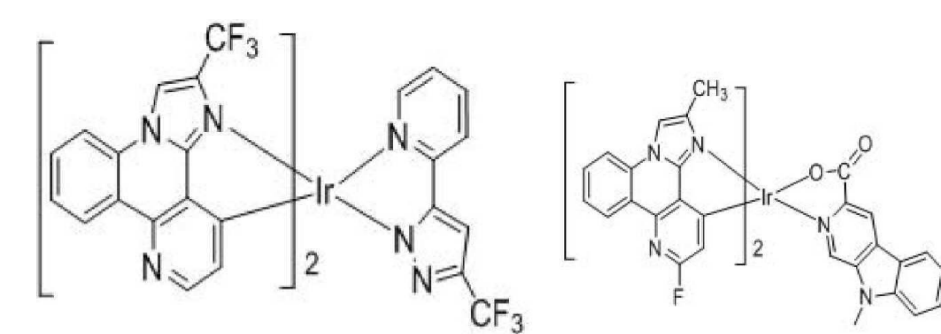
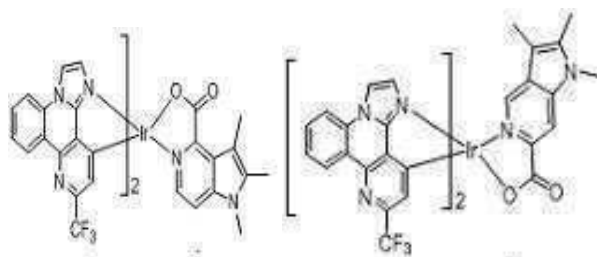
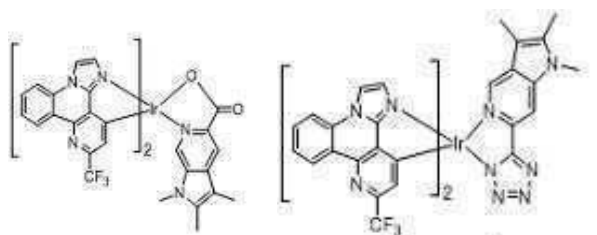
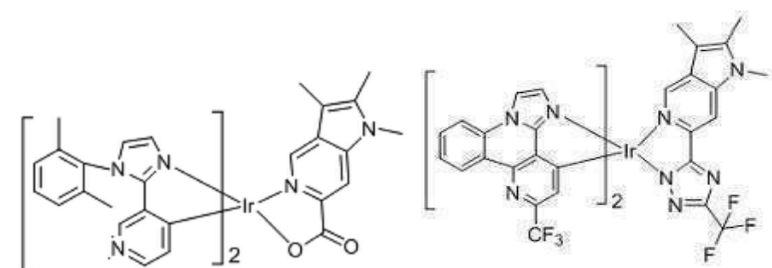
[0155]

[0156]

[A-19]

[A-20]

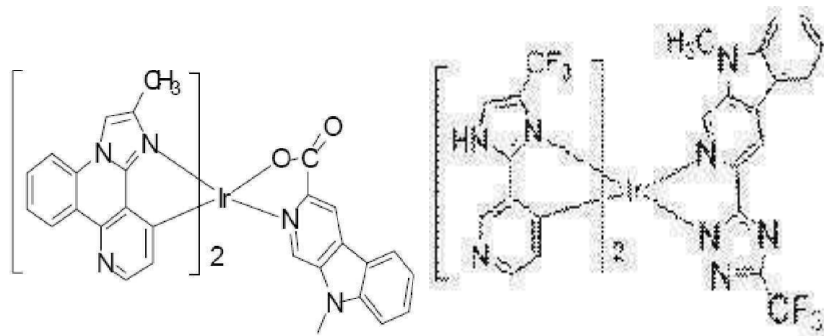
[0157]



[0158]

[A-21]

[A-22]

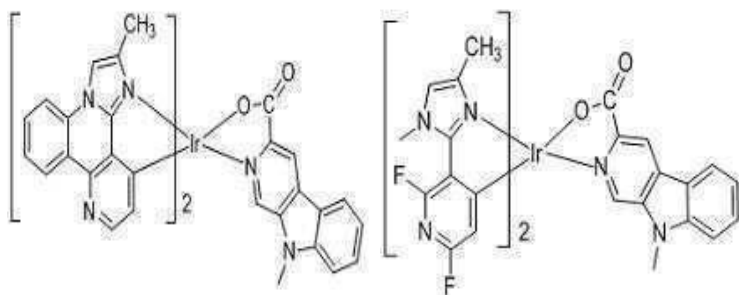


[0159]

[0160]

[A-23]

[A-24]

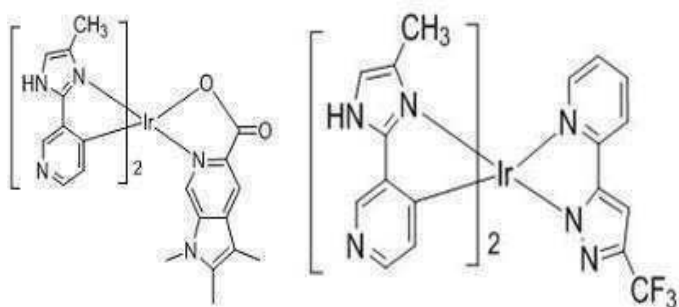


[0161]

[0162]

[A-25]

[A-26]

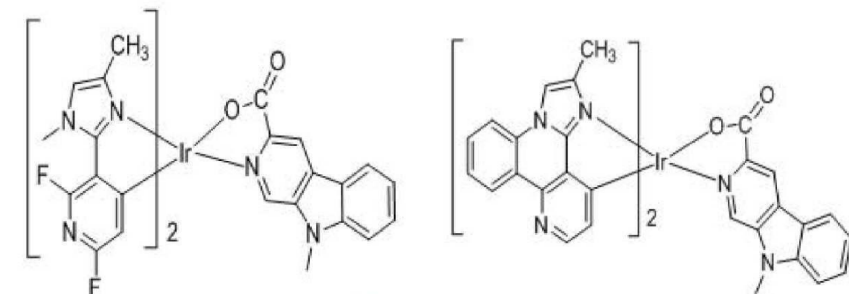


[0163]

[0164]

[A-27]

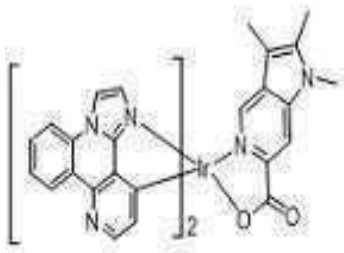
[A-28]



[0165]



[0166] [A-29]



[0167]

[0168] 본 발명의 일 구현예에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 착물은, 사이클로메탈화 모이어티를 제공하는 출발 물질인  $[\text{Ir}(\text{C}^{\text{N}})_2\text{Cl}]_2$  유도체를 이용하여 와츠(Watts) 그룹에 의해 보고된 방법(F.O.Garces, R.J.Watts, Inorg.Chem. 1988, (27), 3464)을 사용하여 합성 가능하다.

[0169]

본 발명의 일 구현예에 따른 유기 전계발광 소자는 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 착물을 이용하여 유기 막 특히, 발광층을 형성하여 제작된다. 이 때 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 착물은 발광층 형성물질인 인광 도판트 재료로서 매우 유용하며, RGB 영역에서 우수한 발광 특성을 나타낸다.

[0170]

상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 착물을 인광 도판트로 사용하는 경우, 유기막이 1종 이상의 고분자 호스트, 고분자와 저분자의 혼합물 호스트, 저분자 호스트, 및 비발광 고분자 매트릭스로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상을 더 포함할 수 있다. 여기에서 고분자 호스트, 저분자 호스트, 비발광 고분자 매트릭스로는 유기 전계 발광 소자용 발광층 형성시 통상적으로 사용되는 것이라면 모두 다 사용가능하며, 고분자 호스트의 예로는 PVK(poly(vinylcarbazole)), Polyfluorene 등이 있고, 저분자 호스트의 예로는 CBP(4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl), 4,4'-비스[9-(3,6-비페닐카바졸릴)]-1,1'-비페닐{4,4'-비스[9-(3,6-비페닐카바졸릴)]-1,1'-비페닐}, 9,10-비스[(2',7'-t-부틸)-9',9'-스피로비플루오렌yl(spirobifluorenyl)안트라센, 테트라플루오렌(tertflluorene) 등이 있고, 비발광 고분자 매트릭스로는 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리스티렌 등이 있지만, 이에 한정하는 것은 아니다.

[0171]

상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 착물의 함량은 유기막, 예를 들어 발광층 형성재료의 총중량 100 중량부를 기준으로 하여 1 내지 30 중량부인 것이 바람직하다. 1 중량부 미만인 경우에는 발광 물질이 부족하여 효율 및 수명이 저하되어 바람직하지 못하고, 30 중량부를 초과하는 경우에는 삼중항의 소광현상이 일어나 효율이 저하되어 바람직하지 못하다. 그리고 이러한 유기 금속 착물을 발광층에 도입하고자 하는 경우에는 진공증착법, 스퍼터링법, 프린팅법, 코팅법, 잉크젯방법 등을 이용할 수 있다.

[0172]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 착물은 시클로메탈화리간드 및 보조 리간드의 조합에 따라 다양한 색상을 구현할 수 있다. 이와 같은 유기 금속 착물은 타색상의 발광 물질과 함께 사용되어 백색광을 발광할 수 있다.

[0173]

도 1a 내지 1f는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 EL 소자의 적층 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

[0174]

도 1a를 참조하면, 제1전극(10) 상부에 상기 화학식 1의 비페닐 유도체를 포함한 발광층(12)이 적층되고, 상기 발광층(12) 상부에는 제2전극(14)이 형성된다.

[0175]

도 1b를 참조하면, 제1전극(10) 상부에 상기 화학식 1의 비페닐 유도체를 포함한 발광층(12)이 적층되고, 상기 발광층(12) 상부에 정공억제층(HBL)(13)이 적층되고 있고, 그 상부에는 제2전극(14)이 형성된다.

[0176]

도 1c의 유기 EL 소자는 제1전극(10)과 발광층(12) 사이에 정공 주입층(HIL)(11)이 형성된다.

[0177]

도 1d의 유기 EL 소자는 발광층(12) 상부에 형성된 정공억제층(HBL)(13) 대신에 전자수송층(ETL)(15)이 형성된 것을 제외하고는, 도 4c의 경우와 동일한 적층 구조를 갖는다.

[0178]

도 1e의 유기 EL 소자는 화학식 1의 비페닐 유도체를 함유하는 발광층(12) 상부에 형성된 정공억제층(HBL)(13) 대신에 정공 억제층(HBL)(13)과 전자 수송층(15)이 순차적으로 적층된 2층막을 사용하는 것을 제외하고는, 도 4c의 경우와 동일한 적층 구조를 갖는다. 경우에 따라서는 도 4e의 유기 EL 소자에서 전자수송층(15)와 제2전극(14)사이에는 전자주입층이 더 형성되기도 한다.

[0179]

도 1f의 유기 EL 소자는 정공 주입층(11)과 발광층(12) 사이에 정공 수송층(16)을 더 형성한 것을 제외하고는,



도 4e의 유기 EL 소자와 동일한 구조를 갖고 있다. 이 때 정공 수송층(16)은 정공 주입층(11)으로부터 발광층(12)으로의 불순물 침투를 억제해주는 역할을 한다.

- [0180] 상술한 적층 구조를 갖는 유기 EL 소자는 통상적인 제작방법에 의하여 형성가능하며 그 제작방법이 특별하게 한정되는 것은 아니다.
- [0181] 여기서 상기 유기막의 두께는 30 내지 100 nm인 것이 바람직하다. 상기 유기막의 두께가 30 nm미만인 효율 및 수명이 저하되고, 100 nm를 초과하면 구동전압이 상승하여 바람직하지 못하다.
- [0182] 한편 상기 유기막으로는, 발광층 이외에도 전자수송층, 정공수송층 등과 같이 유기 전계발광 소자에서 한 쌍의 전극 사이에 형성되는 유기 화합물로 된 막을 지칭한다.
- [0183] 상기 유기 전계 발광 소자에서는 각 층 사이에 버퍼층이 형성될 수 있는 바, 이와 같은 버퍼층의 소재로는 통상적으로 사용되는 물질을 사용할 수 있으며, 바람직하게는 구리 프탈로시아닌(copper phthalocyanine), 폴리티오펜 (polythiophene), 폴리아닐린(polyaniline), 폴리아세틸렌(polyacetylene), 폴리피롤(polypyrrole), 폴리페닐렌비닐렌(polyphenylene vinylene), 또는 이들의 유도체를 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0184] 상기 정공수송층의 소재로는 통상적으로 사용되는 물질을 사용할 수 있으며, 바람직하게는 폴리트리페닐아민(polytriphenylamine)을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0185] 상기 전자수송층의 소재로는 통상적으로 사용되는 물질을 사용할 수 있으며, 바람직하게는 폴리옥사디아졸(polyoxadiazole)을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0186] 상기 정공차단층의 소재로는 통상적으로 사용되는 물질을 사용할 수 있으며, 바람직하게는 LiF, BaF<sub>2</sub> 또는 MgF<sub>2</sub> 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0187] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 전계발광 소자의 제작은 특별한 장치나 방법을 필요로 하지 않으며, 통상의 발광 재료를 이용한 유기 전계발광 소자의 제작방법에 따라 제작될 수 있다.
- [0188] 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 화학식 1의 유기 금속 착물은 약 400 내지 약 700nm 영역에서 발광할 수 있다. 이러한 유기금속 착물을 이용한 발광 다이오드는 풀 칼라 표시용 광원 조명, 백라이트, 옥외게시판, 광통신(optical communication), 내부장식 등에 사용 가능하다.
- [0189] 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 금속 착물의 발광특성으로부터 우수한 인광특성을 가진 도펀트가 형성될 수 있다. 보다 구체적으로 상기 도펀트는 치환기의 도입에 따라 강한 전기장효과(electronic effect)에 의해 다양한 발색 영역에서 발광하는 인광재료로 이용될 수 있다.
- [0190] 보다 구체적으로 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 금속 착물은 열적 안정성이 우수하다. 이와 같은 열안정성은 소자의 제조시 소성 등에 건디는 성질이 우수함을 나타낸다.
- [0191] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 상기 유기광전자소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

[0193] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

#### [0195] (유기 금속 착물의 합성)

##### [0196] 실시예 1: A-1 화합물의 합성

[0197] 이리듐 클로로-브릿지 다이머 복합체의 합성: 2-methylbenzo[h]imidazo[2,1-f][1,6]naphthyridine 1.17g(5 mmol) 및 IrCl<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O 0.353 g(1 mmol)을 소량의 물을 함유 하는 에톡시 에탄올 에서 3일간 반응 시켜 A-1 합성을 위한 이리듐 클로로-브릿지 다이머 0.5g을 합성(수율: 36%)하였다.

[0198] A-1 화합물의 합성 : 상기 이리듐 클로로-브릿지 다이머 0.5g (0.36 mmol)에 9-methyl-9H-pyrido[3,4-b]indole-3-carboxylic acid 0.245g(1.08 mmol) 및 소듐 카보네이트 무수물 0.11g을 50ml 에톡시에탄올 내에서 2일 동안 교반하였다. 반응을 종결시킨 후, 생성물을 분리하여, 약간의 메톡시에탄올과 물에 의해 세척하고, 진공에서 건조하였다.

[0199] 수득율: 0.32g(50%)

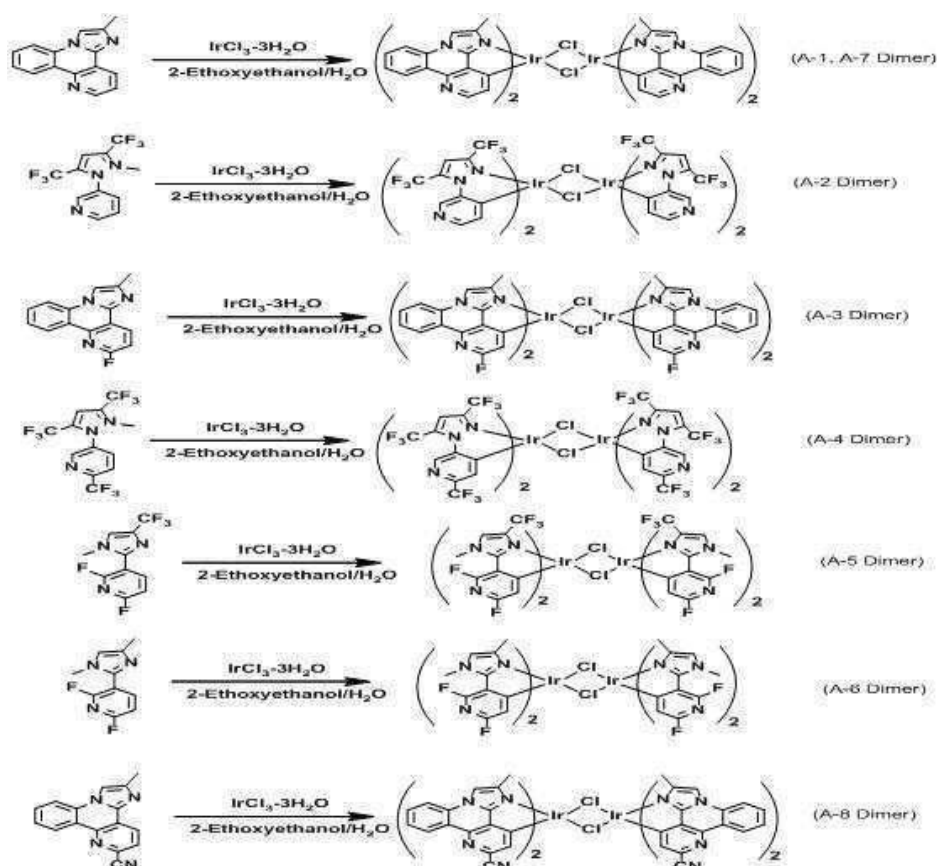
[0201]  $^1\text{H}$  NMR 및 질량분석을 통해 상기 화합물의 구조가 상기 화학식 A-1의 화합물임을 확인하였다. 열중량분석을 통해 상기 착물이 370℃ 이상의 분해 온도를 나타냄을 확인하였다. 상기 착물은 2-메틸테트라히드로푸란에 용해된 용액으로부터 발광 파장(PL) 측정 시 461nm에서 발광하였고 이는 CIE 색좌표 (0.16, 0.26)에 해당하였다.

[0203] 실시예 2 내지 16: 화학식 A-2 내지 A-16로 표시되는 화합물의 합성

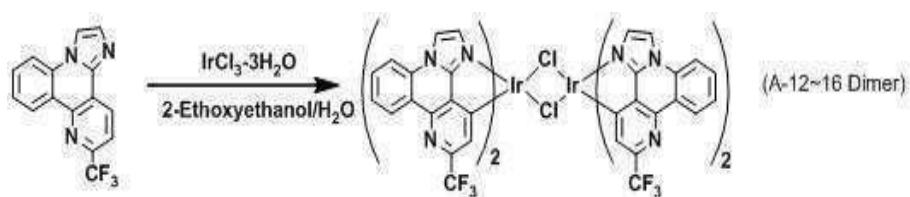
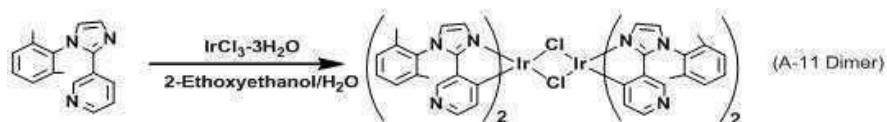
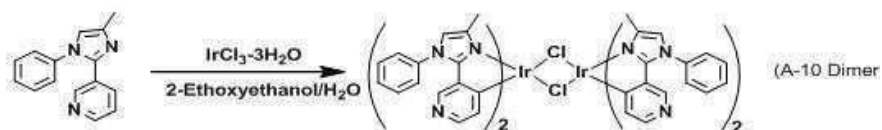
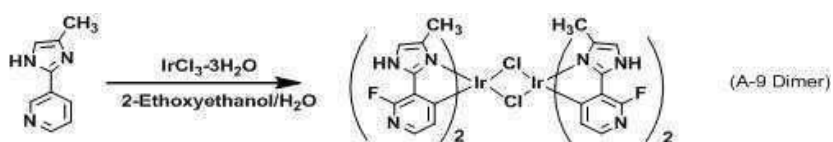
[0204] 상기 화학식 A-2 내지 A-16로 표시되는 화합물을 실시예 1과 유사한 방법으로 합성하였다.

[0205] 상기 실시예 1 내지 16의 다이머 복합체 및 최종 화합물의 반응식은 다음과 같다.

[0207] [이리듐 클로로-브릿지 다이머 복합체의 반응식]



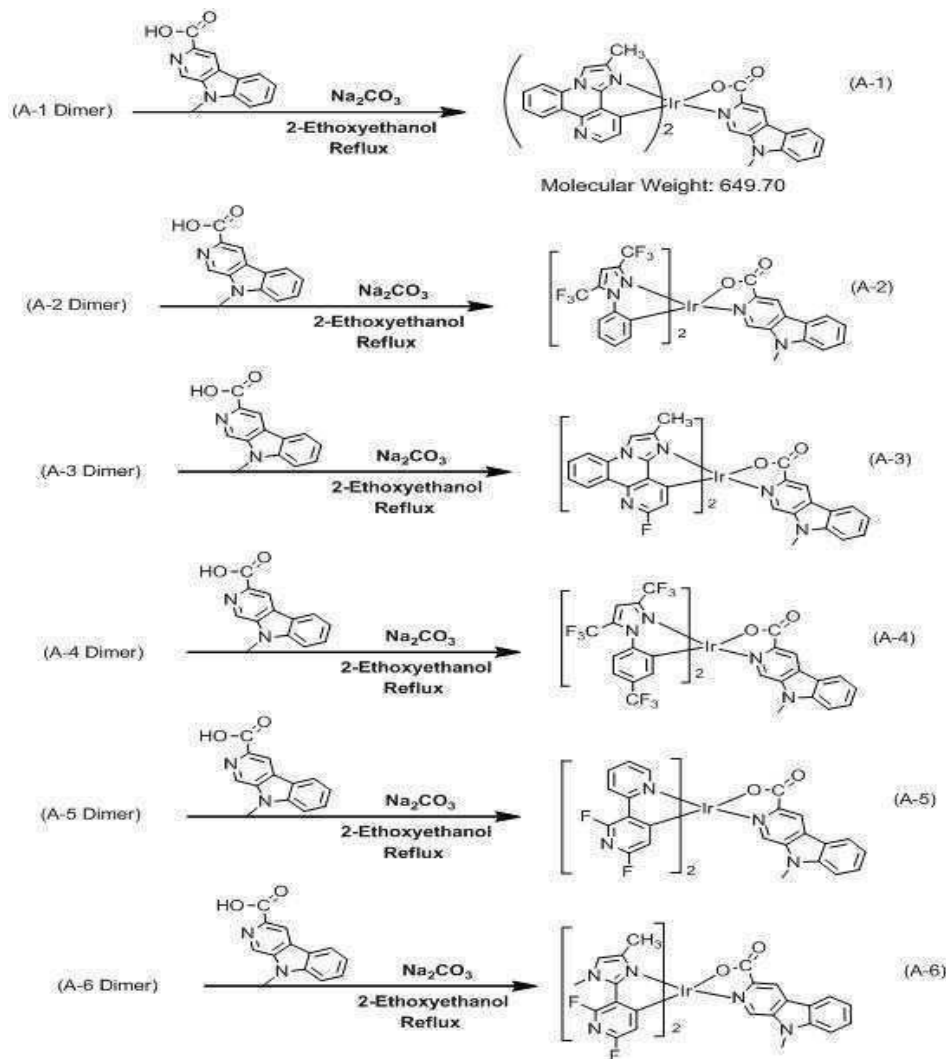
[0208]



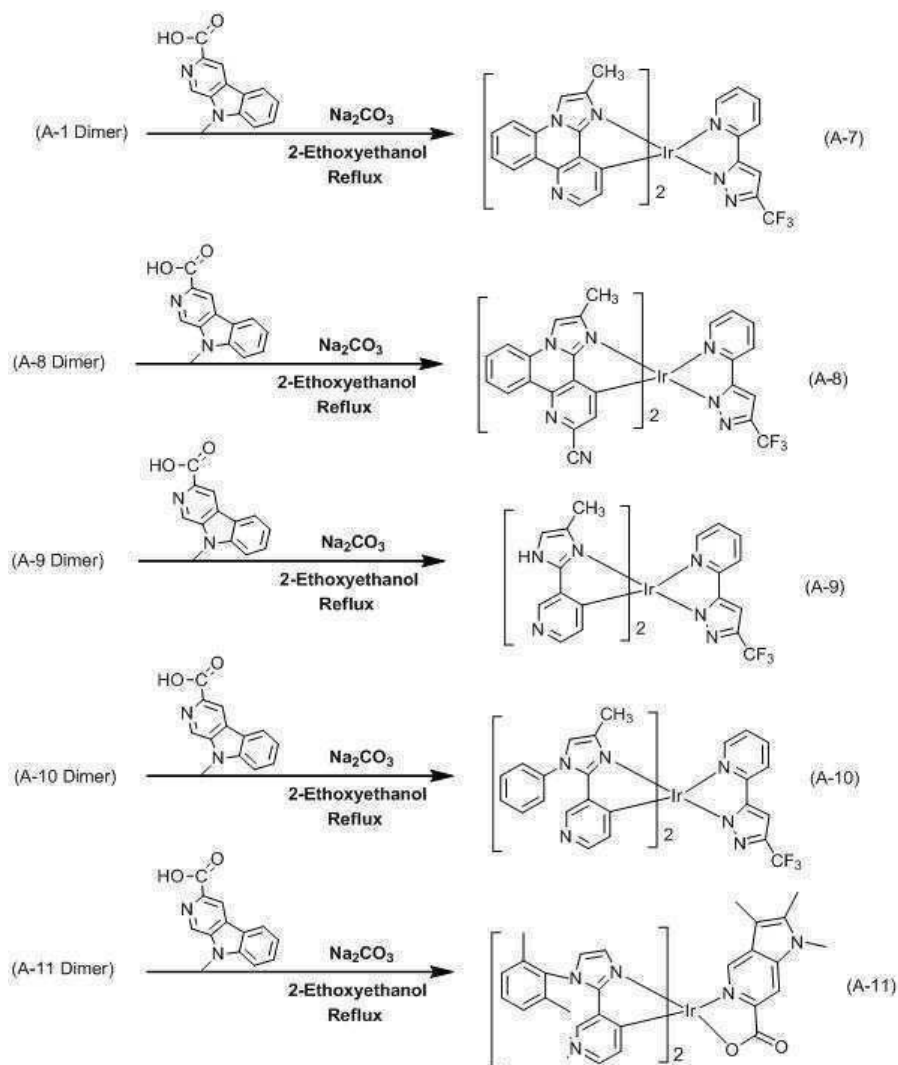
[0209]

[0210]

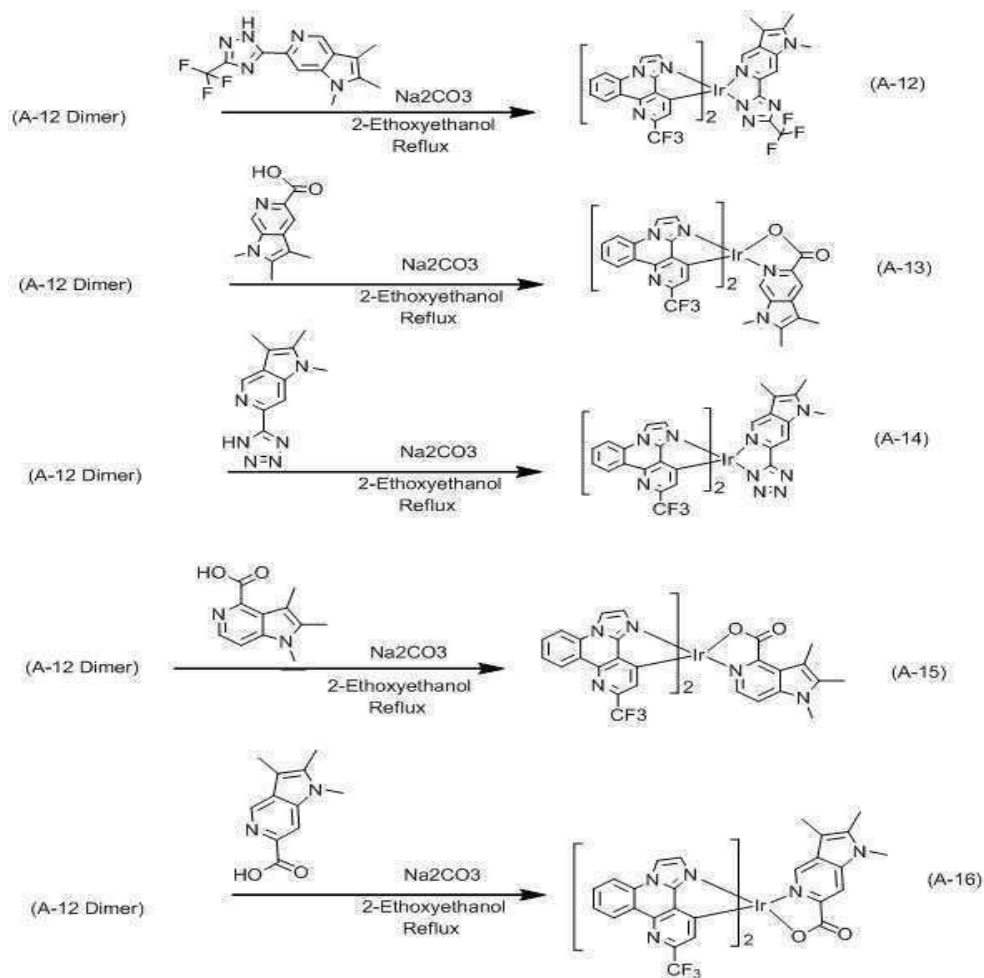
[0212] [유기 금속 착물 화합물 반응식]



[0213]



[0214]



[0215]

[0216]

상기 착물을 2-메틸테트라히드로푸란에 용해된 용액으로부터 PL 측정한 값은 표 1에 나타난 바와 같다. 이때 HOMO 값은 사이클로 볼타메트리에 의해, LUMO 값은 UV-Visible 스펙트로스코피에 의해 측정하였다.

표 1

Code	Structure	HOMO (eV)	LUMO (eV)	$\lambda_{emi}$ (PL,nm)
A-1		5.9	1.7	461
A-2		5.6	1.9	492
A-3		5.5	1.8	457
A-4		6.0	2.3	487
A-5		6.0	2.0	472
A-6		5.5	1.8	456
A-7		5.5	1.5	467
A-8		5.9	2.0	472
A-9		5.4	1.5	467
A-10		5.5	1.5	467
A-11		4.6	0.7	464
A-12		5.5	1.6	469
A-13		5.6	1.5	454
A-14		5.7	1.6	461
A-15		5.6	1.5	473
A-16		5.6	1.5	454

[0217]

[0218]

(유기 전계 발광 소자의 제조)

[0219]

제조예 1 유기 전계 발광 소자의 제조

[0220]

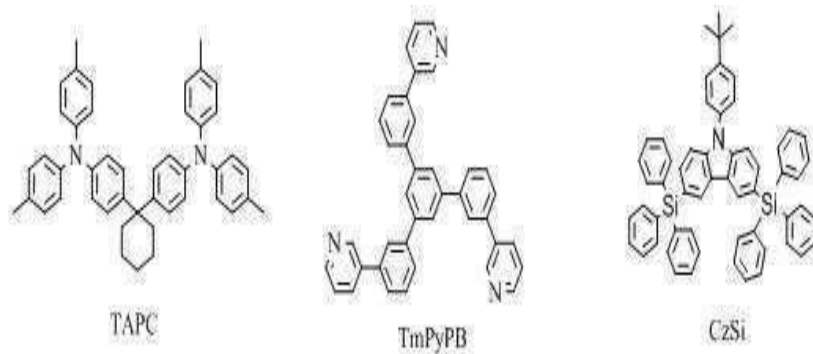
ITO(indium-tin oxide)가 코팅된 투명 전극 기판을 깨끗이 세정한 후, ITO를 감광성 수지(photoresist resin)와 식각제(etchant)를 이용하여 패터닝하여 ITO 전극 패턴을 형성하고, 이를 다시 깨끗이 세정하였다. ITO 유리 기판은 이소 프로필 알코올 (IPA)에 음파처리(sonication)하여 세정하고, 탈 이온수에 행구었다. 그 후, ITO 코팅 유리 기판 장치 제조 이전 UV-오존 처리를 하였다.

[0221]

정공 수송 층(HTL), 발광층(EML) 및 전자 수송층 (ETL)은 열  $10^{-7}$  토르의 진공 조건에서 열증착하여 형성하였다. LiF 전극과 알루미늄 음극은 진공을 유지한채 형성하였다. 인광소자의 각 층재료로서 전자 수송(electron transporting) 재료는 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene (TmPyPB)을 사용하였고, 정공 수송 물질로는 1,1-Bis[4-[N,N'-di(p-tolyl)amino]phenyl]cyclohexane (TAPC)을, 발광층의 호스트 재료로는 9-(4-tert-



butylphenyl)-3,6-bis(triphenylsilyl)-9H-carbazole (CzSi)을 사용하였다. 발광층에는 각자 6 % 농도의 화학식 A-1을 도핑하여 인광 발광층으로 사용하였다. 사용된 화합물의 구체 구조는 다음과 같다.



[0222]

[0224] 소자 특성 평가

[0225] 상기 제조예 1에서 제조된 소자의 특성을 평가하였으며, 평가 방법은 다음과 같다.

[0226] 제조 장치의 (J-V) 밀도 - 전압 전류 및 휘도 - 전압 (L-V) 특성은 Keithley 2635A와 미놀타 CS-100A 휘도 미터를 사용하여 측정하였다. 또한, EL(electroluminescence) 스펙트럼 및 CIE 색 좌표는 미놀타 CS-1000A를 사용하여 측정 하였다.

[0227] 얻어진 EL 소자의 특성은 다음과 같았다 (측정 기준 : 1000nits).

**표 2**

[0228]

구분	EL $\lambda_{\max}$ (nm)	CIE (x, y)	효율 @1000nits (cd/A)	구동 전압 (V)
제조예 1	463	0.16, 0.26	9.5	6.3

[0229] 상기 표 2로부터 본 발명에 따른 화합물을 채용하는 전계발광 소자는 높은 휘도를 나타내었으며, 낮은 전압에서도 구동이 가능하고, 높은 효율을 나타냄을 알 수 있었다.

[0231] 본 발명은 상기 구현예 또는 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

### 부호의 설명

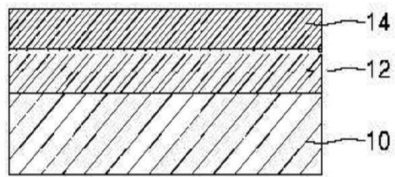
[0232]

- 10... 제1전극      11... 정공 주입층
- 12... 발광층      13... 정공 억제층
- 14... 제2전극      15... 전자 수송층
- 16... 정공 수송층    20... 기판

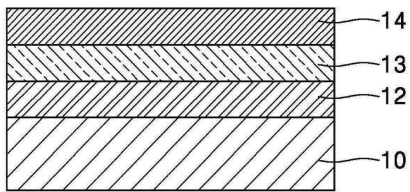


도면

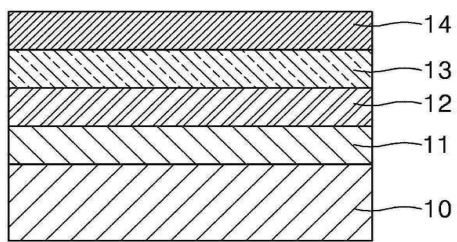
도면1a



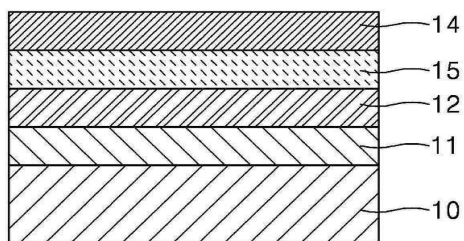
도면1b



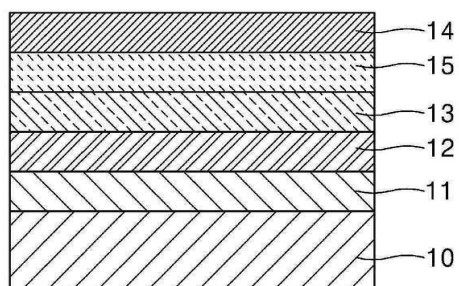
도면1c



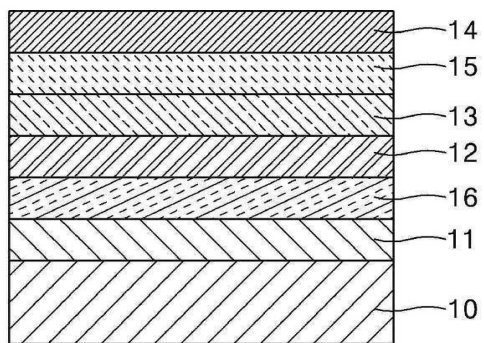
도면1d



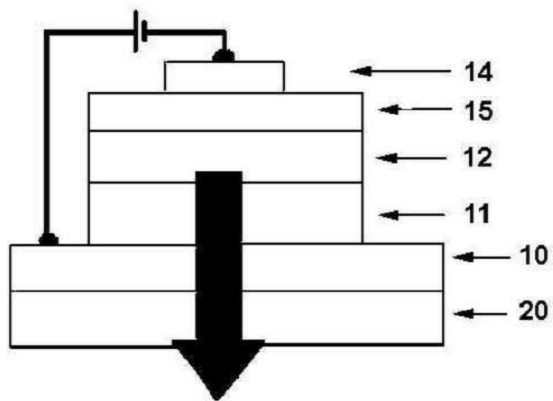
도면1e



도면1f



도면2



专利名称(译)	有机金属配合物，有机电致发光器件和使用其的显示装置		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020160079757A</a>	公开(公告)日	2016-07-06
申请号	KR1020160080858	申请日	2016-06-28
[标]申请(专利权)人(译)	三星电子株式会社 第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	三星电子有限公司 第一毛织有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星电子有限公司 第一毛织有限公司		
[标]发明人	NOH CHANG HO 노창호 KWON O HYUN 권오현 RUPASREE RAGINIDAS 루파스리라기니다스 DMITRY KRAVCHUK 드미트리크라프추크 CHOI HYEON HO 최현호		
发明人	노창호 권오현 루파스리라기니다스 드미트리크라프추크 최현호		
IPC分类号	H01L51/00 H05B33/14 C07F15/00		
CPC分类号	H01L51/0085 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/0094 C07F15/0033 H05B33/14 C09K2211/1007 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/185		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

可以提供如下化学式1-S-4所示的有机金属配合物作为有机金属配合物，以及使用该有机金属配合物的有机电致发光器件和显示装置。[化学式1-S-4]关于图像化学式1-S-4的存在的定义存在于说明书中。

