



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0077673
(43) 공개일자 2020년07월01일

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

(52) CPC특허분류
H01L 51/0077 (2013.01)
C07F 15/0086 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0166415
(22) 출원일자 2018년12월20일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자
김성범
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
고수병
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(뒷면에 계속)

(74) 대리인
리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

유기금속 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1

10

190
150
110

(52) CPC특허분류

H01L 51/0094 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

(72) 발명자

한정훈

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

신수진

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

안은수

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

이은영

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

이재성

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

이현정

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

전미나

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

명세서

청구범위

청구항 1

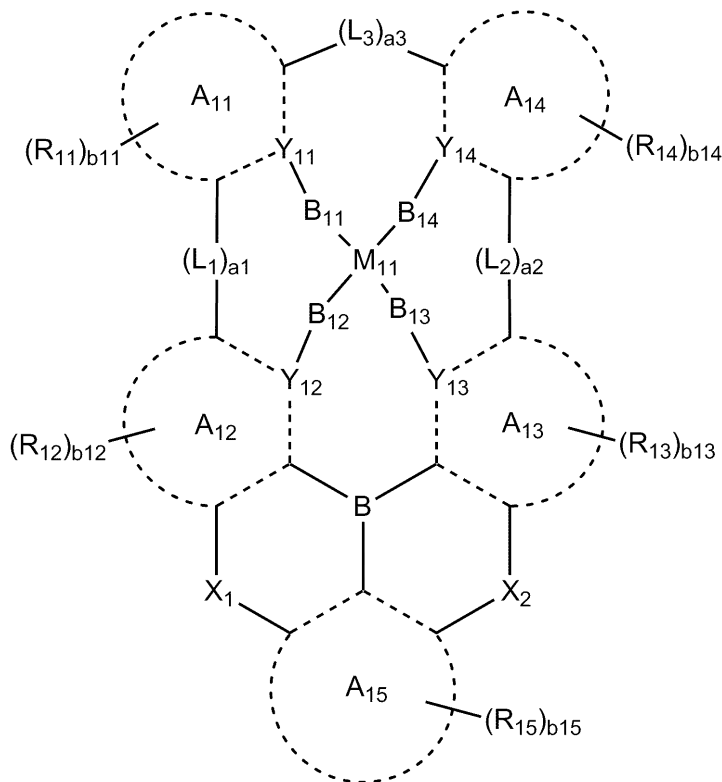
제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고,

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

M₁₁은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 아연(Zn), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 레늄(Re), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), यू로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고,

A₁₁ 고리 내지 A₁₅ 고리는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

Y₁₁ 내지 Y₁₄는 서로 독립적으로, 탄소 원자(C) 및 질소 원자(N) 중에서 선택되고,

B₁₁ 내지 B₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택되고,

L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-* , *-S-* , *-C(R₁₆)(R₁₇)-* , *-C(R₁₆)=* , *=C(R₁₆)-* , *-C(R₁₆)=C(R₁₇)-* , *-C(=O)-* , *-C(=S)-* , *-C≡C-* , *-B(R₁₆)-* , *-N(R₁₆)-* , *-P(R₁₆)-* , *-Si(R₁₆)(R₁₇)-* , *-P(R₁₆)(R₁₇)-* 및 *-Ge(R₁₆)(R₁₇)-* 중에서 선택되고,

a₁ 내지 a₃는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고, a₁ 내지 a₃ 중 적어도 2개는 서로 독립적으로,

1, 2 및 3 중에서 선택되고,

a1가 0이면 A₁₁ 및 A₁₄는 연결되어 있지 않고, a2가 0이면 A₁₃ 및 A₁₄는 연결되어 있지 않고, a3가 0이면 A₁₁ 및 A₁₄는 연결되어 있지 않고,

X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로, 0 및 S 중에서 선택되고,

R₁₁ 내지 R₁₇은 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 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,

R₁₆과 R₁₁, R₁₆과 R₁₂, R₁₆과 R₁₃, 및/또는 R₁₆과 R₁₄는 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

b11 내지 b15는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 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 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

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, 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;

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

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, 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, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환

그룹; 및

$-\text{Si}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})(\text{Q}_{33})$, $-\text{N}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{B}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{31})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{31})$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$;

중에서 선택되고,

상기 Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알킬기, $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알케닐기, $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 알키닐기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 알콕시기, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알킬기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알킬기, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 시클로알케닐기, $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 아릴기, $\text{C}_1\text{-C}_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

*은 이웃한 원자와의 결합사이트이고,

B는 붕소 원자이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 발광층이 상기 유기금속 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 상기 유기금속 화합물의 함량이 상기 발광층 100 중량부 당 0.01 내지 30 중량부인, 유기 발광 소자.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 호스트는 서로 다른 2종의 호스트를 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 발광층이 상기 유기금속 화합물을 포함하고,

상기 발광층은 430 nm 이상 및 490 nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 청색광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 배치된 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 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 7

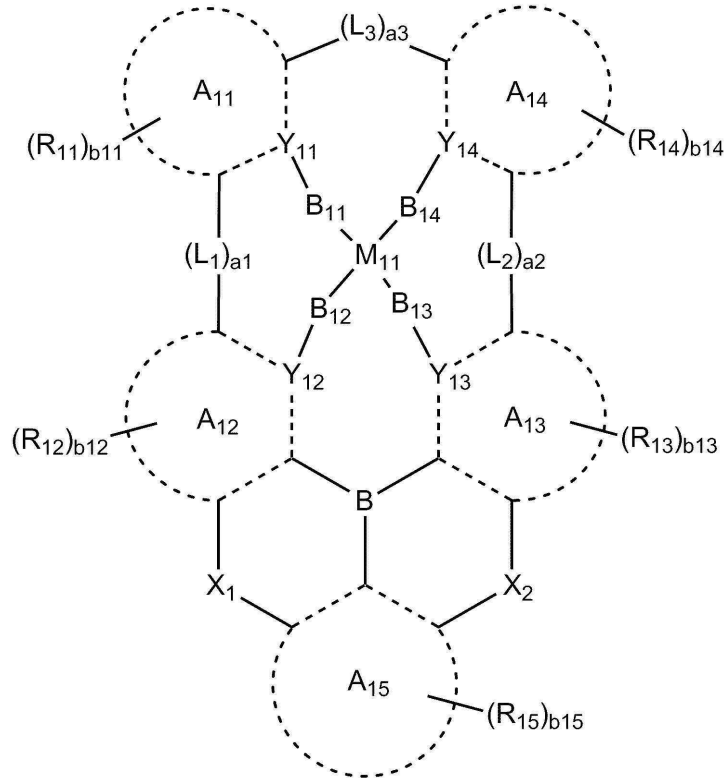
제6항에 있어서,

상기 전자 수송 영역이 포스핀옥사이드-함유 화합물 또는 실릴-함유 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 8

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

M₁₁은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 아연(Zn), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 레늄(Re), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고,

A₁₁ 고리 내지 A₁₅ 고리는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

Y₁₁ 내지 Y₁₄는 서로 독립적으로, 탄소 원자(C) 및 질소 원자(N) 중에서 선택되고,

B₁₁ 내지 B₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*' 및 *-S-*' 중에서 선택되고,

L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*', *-S-*', *-C(R₁₆)(R₁₇)-*', *-C(R₁₆)=*', *=C(R₁₆)-*', *-C(R₁₆)=C(R₁₇)-*', *-C(=O)-*', *-C(=S)-*', *-C≡C-*', *-B(R₁₆)-*', *-N(R₁₆)-*', *-P(R₁₆)-*', *-Si(R₁₆)(R₁₇)-*', *-P(R₁₆)(R₁₇)-*' 및 *-Ge(R₁₆)(R₁₇)-*' 중에서 선택되고,

a₁ 내지 a₃는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고, a₁ 내지 a₃ 중 적어도 2개는 서로 독립적으로, 1, 2 및 3 중에서 선택되고,

a₁가 0이면 A₁₁ 및 A₁₄는 연결되어 있지 않고, a₂가 0이면 A₁₃ 및 A₁₄는 연결되어 있지 않고, a₃가 0이면 A₁₁ 및 A₁₄는 연결되어 있지 않고,

X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로, 0 및 S 중에서 선택되고,

R₁₁ 내지 R₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노

기, 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(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,

R₁₆과 R₁₁, R₁₆과 R₁₂, R₁₆과 R₁₃, 및/또는 R₁₆과 R₁₄는 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

b₁₁ 내지 b₁₅는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 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 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

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, 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;

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

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, 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, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

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

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기,

C₁-C₁₀헥테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

*은 이웃한 원자와의 결합사이트이고,

B는 붕소 원자이다.

청구항 9

제8항에 있어서,

M₁₁은 Pt, Pd, Cu, Ag 및 Au 중에서 선택되는, 유기금속 화합물.

청구항 10

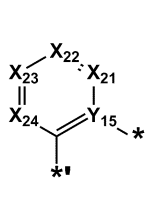
제8항에 있어서,

A₁₁ 고리 내지 A₁₅ 고리는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 아줄렌 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, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 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 선택된, 유기금속 화합물.

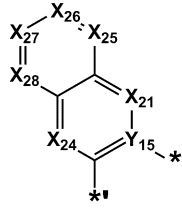
청구항 11

제8항에 있어서,

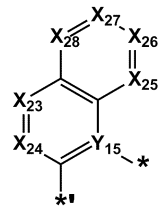
A₁₁ 고리 및 A₁₄ 고리는 서로 독립적으로, 하기 화학식 2-1(1) 내지 2-1(27) 및 2-2(1) 내지 2-2(20)로 표시되는 그룹 중에서 선택되는, 유기금속 화합물:



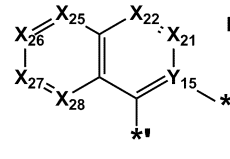
2-1(1)



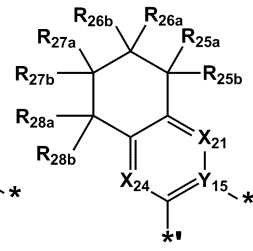
2-1(2)



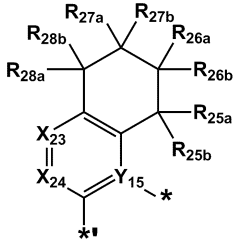
2-1(3)



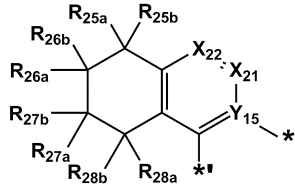
2-1(4)



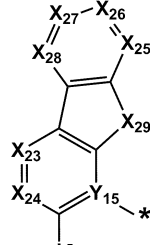
2-1(5)



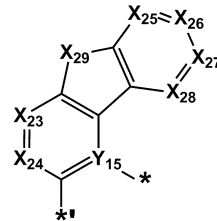
2-1(6)



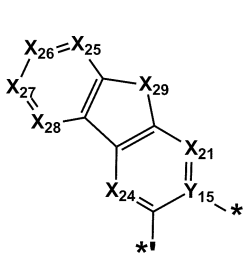
2-1(7)



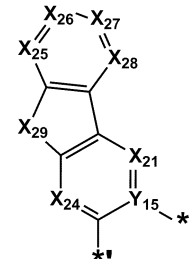
2-1(8)



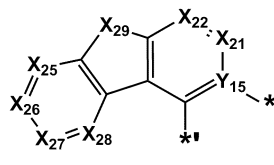
2-1(9)



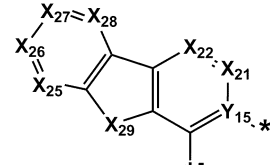
2-1(10)



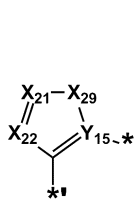
2-1(11)



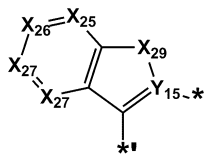
2-1(12)



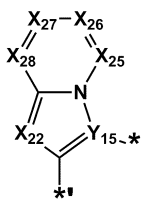
2-1(13)



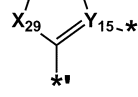
2-1(14)



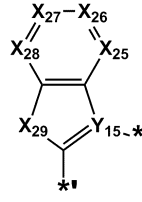
2-1(15)



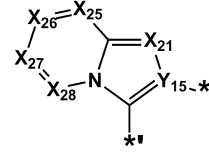
2-1(16)



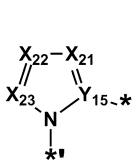
2-1(17)



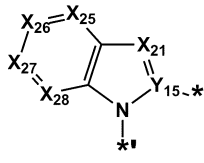
2-1(18)



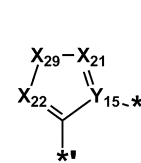
2-1(19)



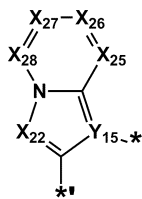
2-1(20)



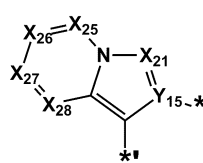
2-1(21)



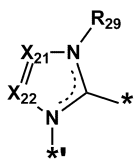
2-1(22)



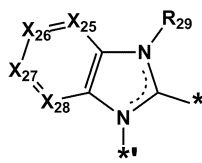
2-1(23)



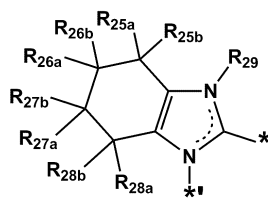
2-1(24)



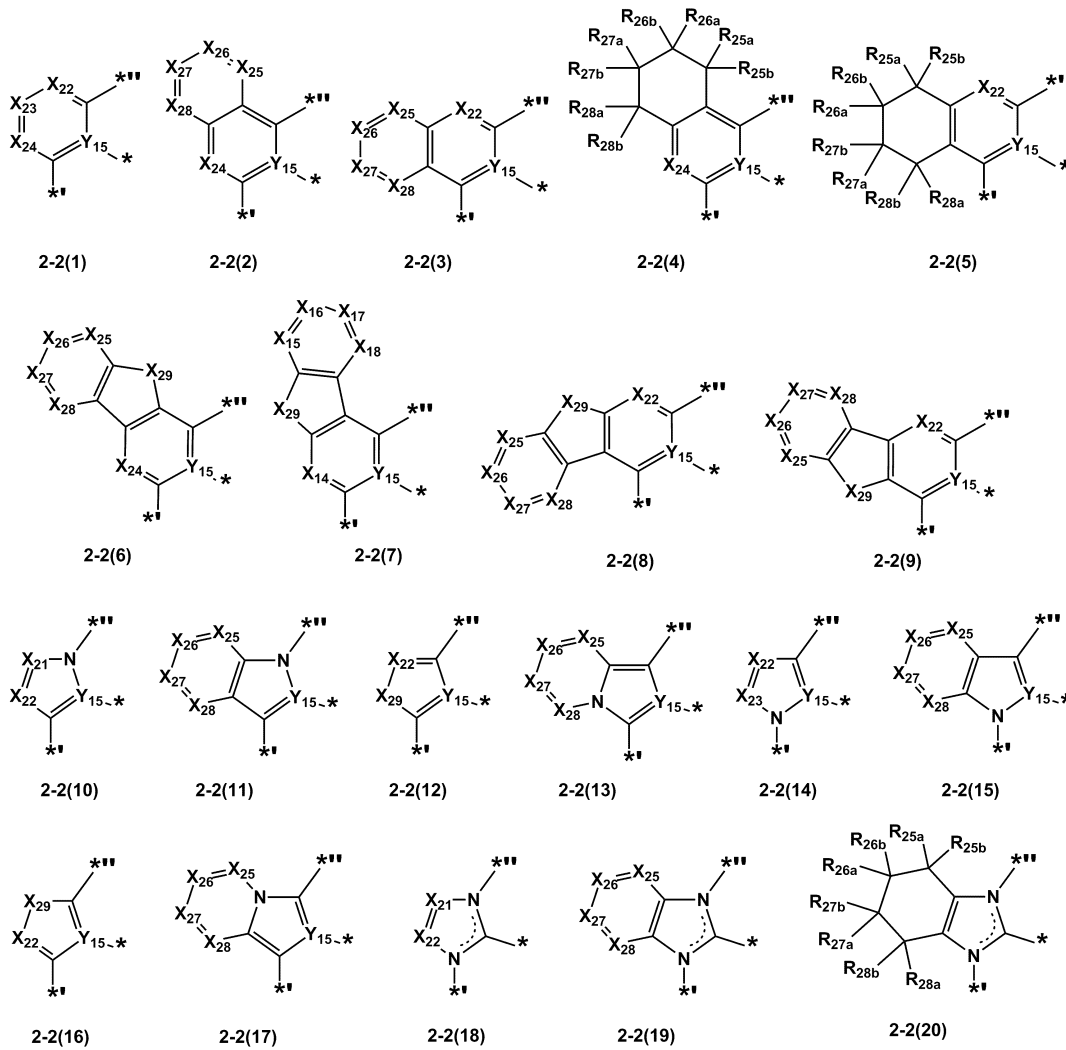
2-1(25)



2-1(26)



2-1(27)



상기 화학식 2-1(1) 내지 2-1(27) 및 2-2(1) 내지 2-2(20) 중,

Y_{15} 는 Y_{11} 또는 Y_{14} 이고,

X_{21} 는 N 또는 $C(R_{21})$ 이고, X_{22} 는 N 또는 $C(R_{22})$ 이고, X_{23} 는 N 또는 $C(R_{23})$ 이고, X_{24} 는 N 또는 $C(R_{24})$ 이고, X_{25} 는 N 또는 $C(R_{25})$ 이고, X_{26} 는 N 또는 $C(R_{26})$ 이고, X_{27} 는 N 또는 $C(R_{27})$ 이고, X_{28} 는 N 또는 $C(R_{28})$ 이고,

X_{29} 는 $C(R_{29a})(R_{29b})$, $N(R_{29})$, O, S 또는 $Si(R_{29a})(R_{29b})$ 이고,

R_{21} 내지 R_{28} 및 R_{25a} 내지 R_{29b} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 화학식 1 중 R_{11} 및 R_{14} 에 대한 설명을 참조하고,

*은 B_{11} 또는 B_{14} 과의 결합 사이트이고,

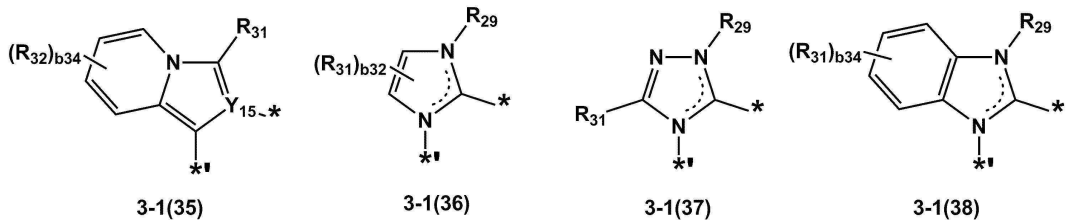
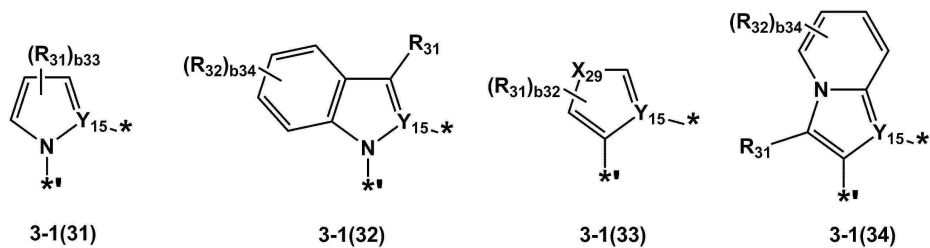
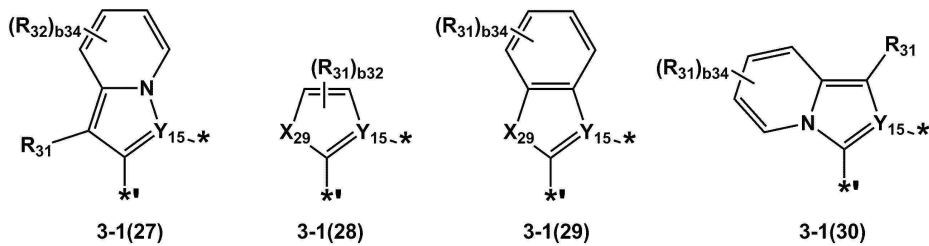
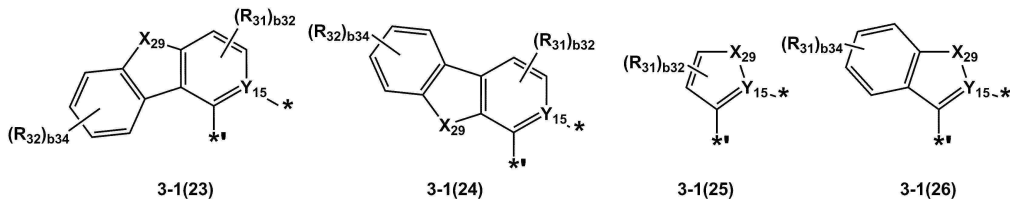
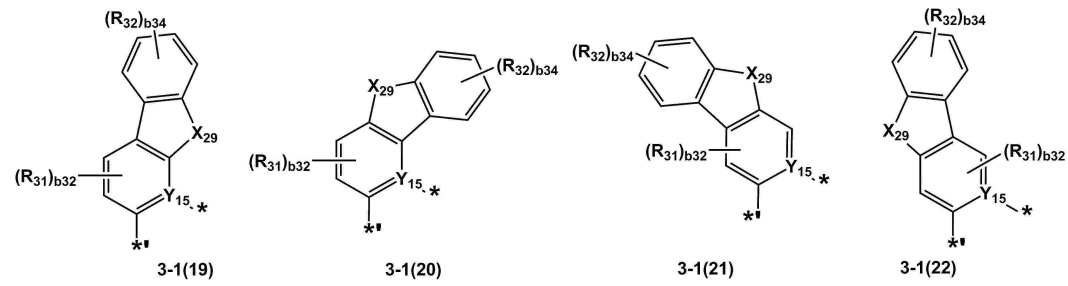
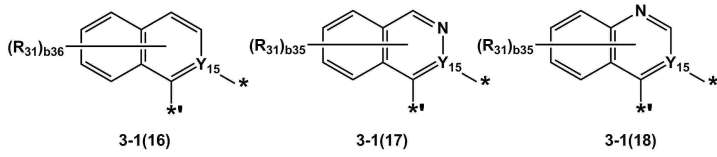
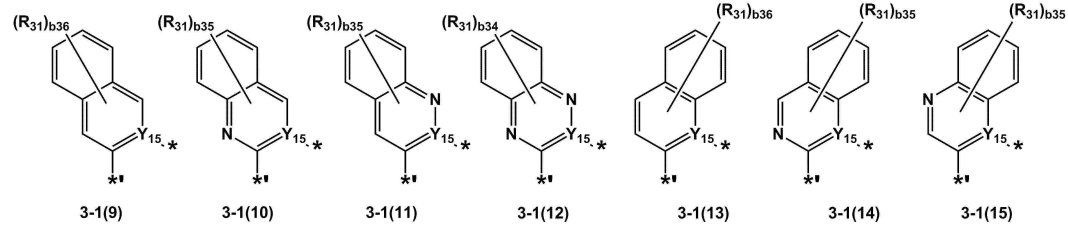
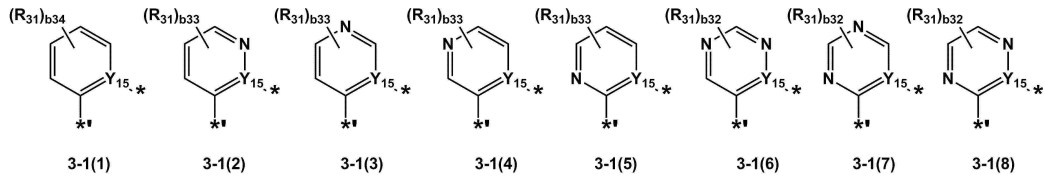
*'은 $(L_1)_{a1}$ 또는 $(L_2)_{a2}$ 와의 결합 사이트이고,

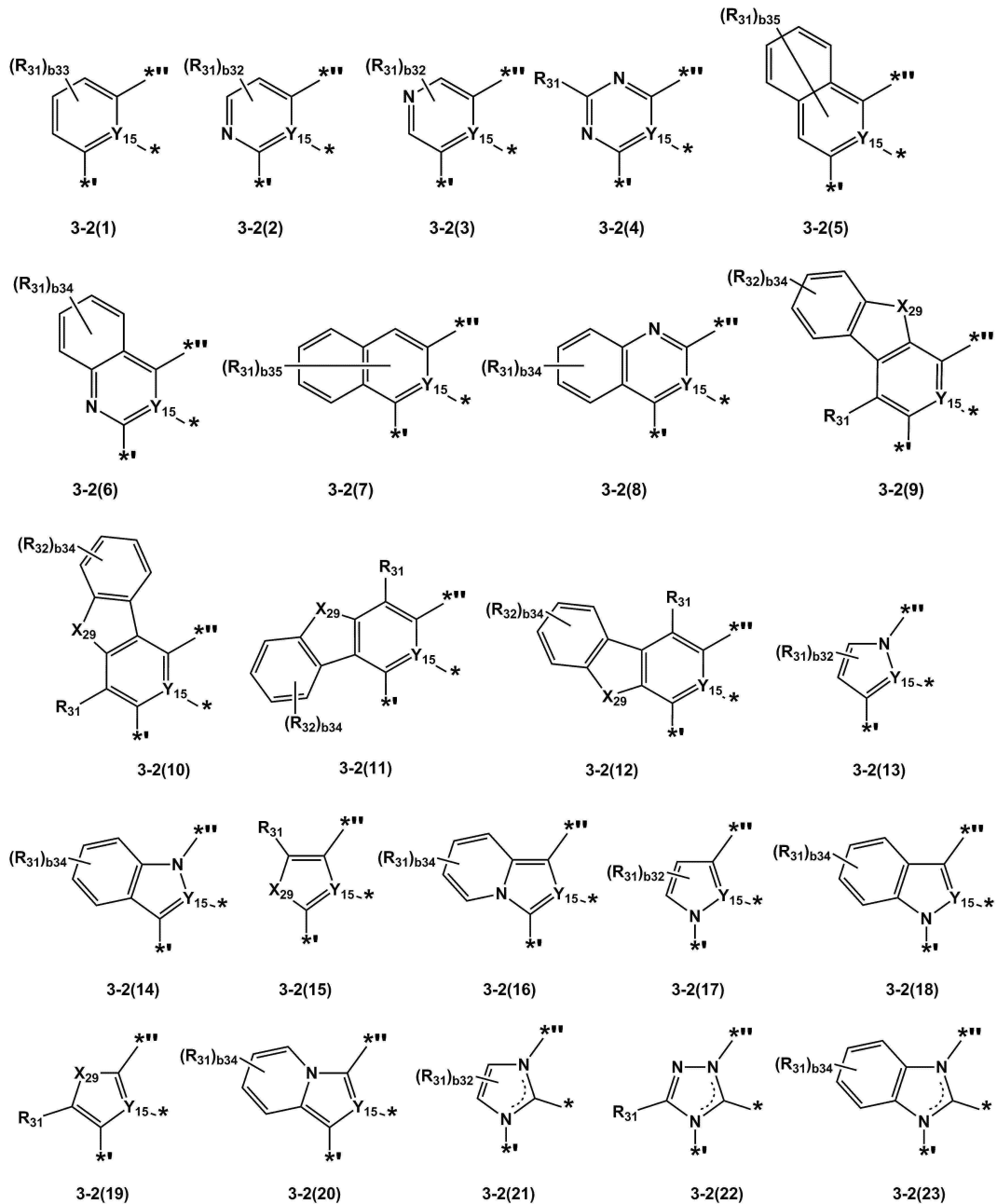
*''은 $(L_3)_{a3}$ 와의 결합 사이트이다.

청구항 12

제8항에 있어서,

A_{11} 고리 및 A_{14} 고리는 서로 독립적으로, 하기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(38) 및 3-2(1) 내지 3-2(23)로 표시되는 그룹 중에서 선택되는, 유기금속 화합물:





상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(38) 및 3-2(1) 내지 3-2(23) 중,

Y_{15} 는 Y_{11} 또는 Y_{14} 이고,

X_{29} 는 $C(R_{29a})(R_{29b})$, $N(R_{29})$, O , S 또는 $Si(R_{29a})(R_{29b})$ 이고,

R_{29} , R_{29a} , R_{29b} , R_{31} 및 R_{32} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 화학식 1 중 R_{11} 및 R_{14} 에 대한 설명을 참조하고,

b_{32} 는 1 또는 2이고,

b_{33} 은 1, 2 또는 3이고,

b_{34} 은 1, 2, 3 또는 4이고,

b_{35} 는 1, 2, 3, 4 또는 5이고,

*은 M과의 결합 사이트이고,

*'는 $(L_1)_{a1}$ 또는 $(L_2)_{a2}$ 와의 결합 사이트이고,

*'은 $(L_3)_{a_3}$ 와의 결합 사이트이다.

청구항 13

제8항에 있어서,

A_{12} 고리, A_{13} 고리 및 A_{15} 고리는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹 및 디벤조실롤 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 14

제8항에 있어서,

- i) Y_{11} 및 Y_{14} 가 N이거나;
- ii) Y_{11} 가 C이고, M_{11} 과 Y_{11} 의 결합 또는 B_{11} 과 Y_{11} 의 결합이 배위 결합이거나;
- iii) Y_{14} 가 C이고, M_{11} 과 Y_{14} 의 결합 또는 B_{14} 과 Y_{14} 의 결합이 배위 결합이거나; 또는
- iv) Y_{11} 및 Y_{14} 가 C이고, M_{11} 과 Y_{11} 의 결합 또는 B_{11} 과 Y_{11} 의 결합이 배위 결합이고, M_{11} 과 Y_{14} 의 결합 또는 B_{14} 과 Y_{14} 의 결합이 배위 결합인, 유기금속 화합물.

청구항 15

제8항에 있어서,

B_{11} 내지 B_{14} 가 모두 단일 결합이고,
 M_{11} 과 Y_{11} 의 결합, M_{11} 과 Y_{12} 의 결합, M_{11} 과 Y_{13} 의 결합 및 M_{11} 과 Y_{14} 의 결합 중 2개는 배위 결합이고, 나머지 2개는 공유 결합인, 유기금속 화합물.

청구항 16

제8항에 있어서,

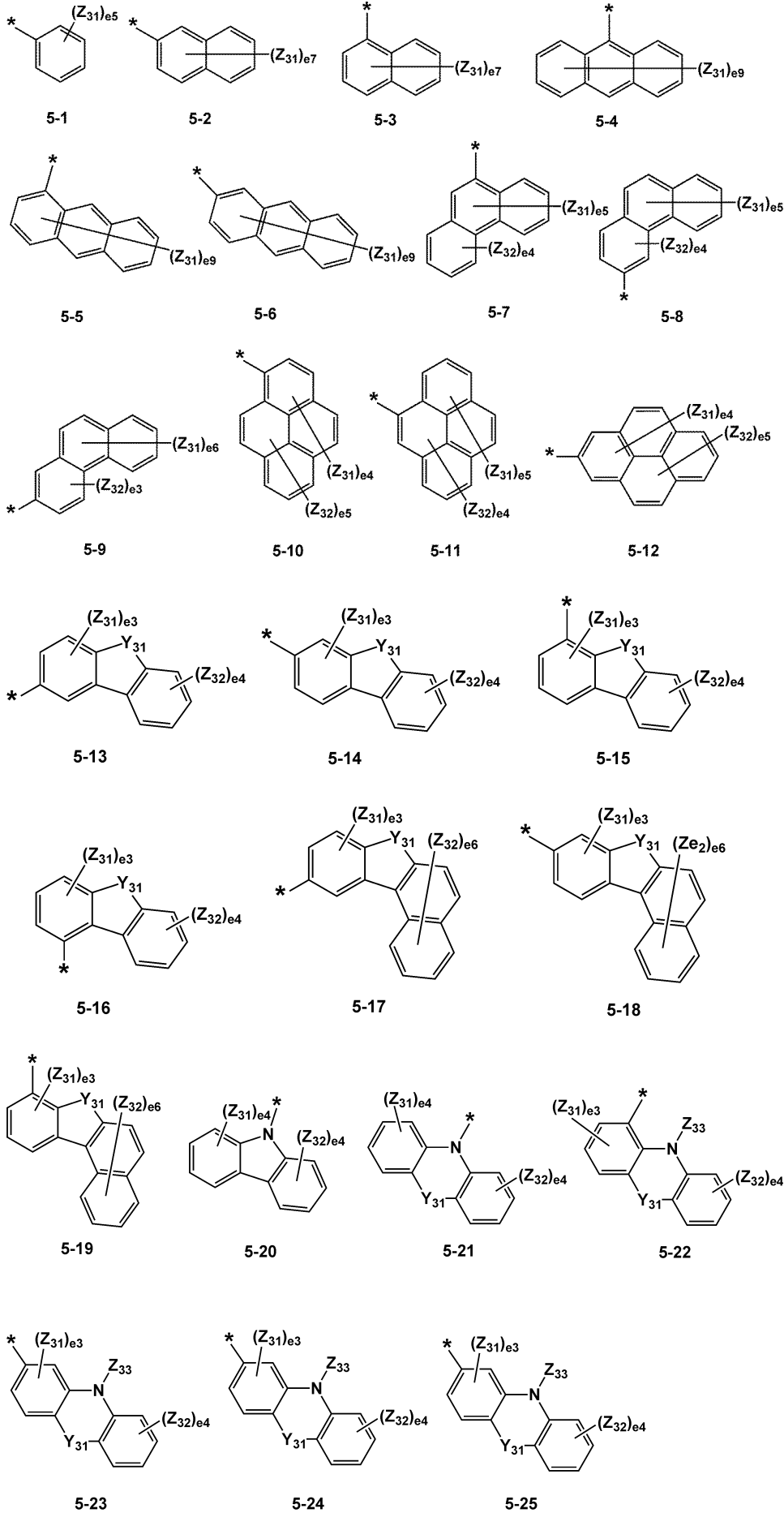
L_1 및 L_2 는 각각 단일 결합이고, a_1 및 a_2 는 각각 1이고, a_3 는 0인, 유기금속 화합물.

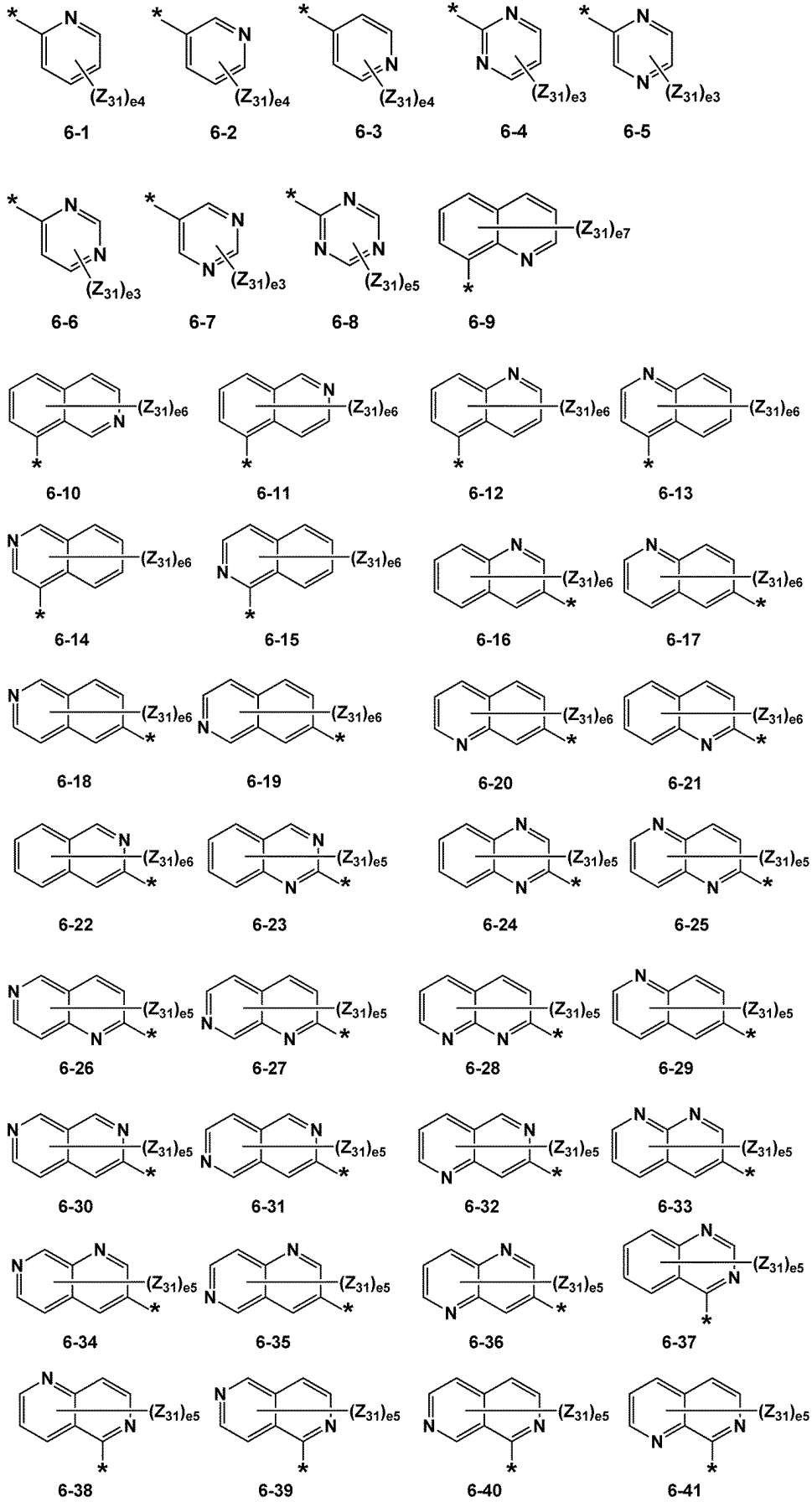
청구항 17

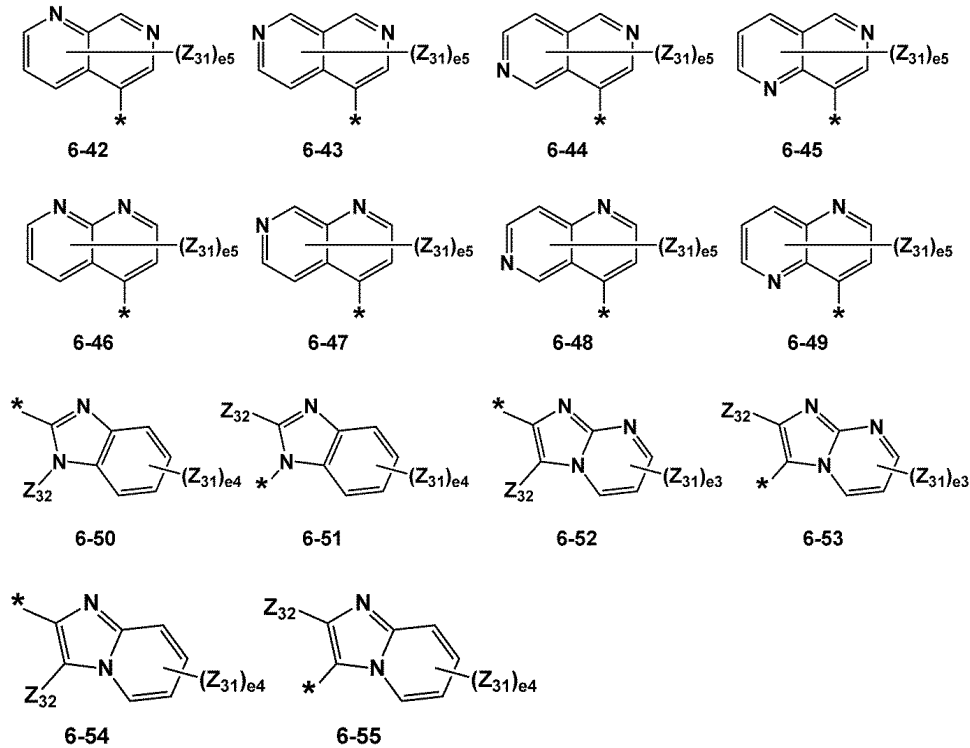
제8항에 있어서,

R_{11} 내지 R_{17} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기; 및

하기 화학식 5-1 내지 5-25 및 6-1 내지 6-55 중 어느 하나로 표시된 그룹; 중에서 선택되는, 유기금속 화합물:







상기 화학식 5-1 내지 5-25 및 6-1 내지 6-55 중,

Y_{31} 은 O, S, C(Z_{34})(Z_{35}), N(Z_{34}) 또는 Si(Z_{34})(Z_{35})이고,

Z_{31} 내지 Z_{35} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알케닐기, C_1 - C_{20} 알키닐기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이폴루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,

e_2 는 1 또는 2이고,

e_3 는 1 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

e_4 는 1 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

e_5 는 1 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

e_6 은 1 내지 6 중에서 선택된 정수이고,

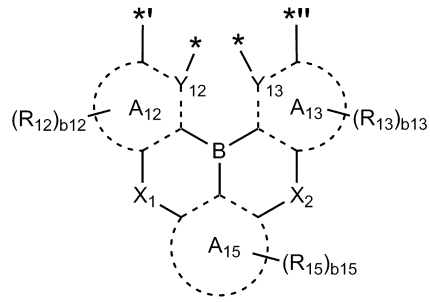
e_7 은 1 내지 7 중에서 선택된 정수이고,

e_9 는 1 내지 9 중에서 선택된 정수이고,

* 은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 18

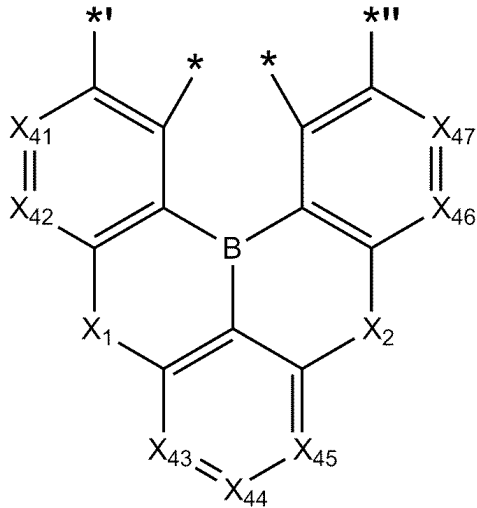
제8항에 있어서,



상기 화학식 1 중
유기금속 화합물:

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 1-1로 표시되는,

<화학식 1-1>



상기 화학식 1-1 중,

X₄₁는 N 또는 C(R₄₁)이고, X₄₂는 N 또는 C(R₄₂)이고, X₄₃는 N 또는 C(R₄₃)이고, X₄₄는 N 또는 C(R₄₄)이고, X₄₅는 N 또는 C(R₄₅)이고, X₄₆는 N 또는 C(R₄₆)이고, X₄₇는 N 또는 C(R₄₇)이고,

R₄₁ 및 R₄₂에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₂에 대한 설명을 참조하고,

R₄₃ 내지 R₄₅에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₅에 대한 설명을 참조하고,

R₄₆ 및 R₄₇에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₃에 대한 설명을 참조하고,

X₁ 및 X₂에 대한 설명은 상기 화학식 1 중의 설명을 참조하고,

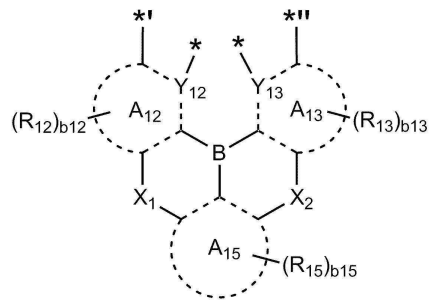
*는 B₁₂ 또는 B₁₃과의 결합 사이트이고,

*'는 (L₁)_{a1}와의 결합 사이트이고,

*''은 (L₂)_{a2}와의 결합 사이트이다.

청구항 19

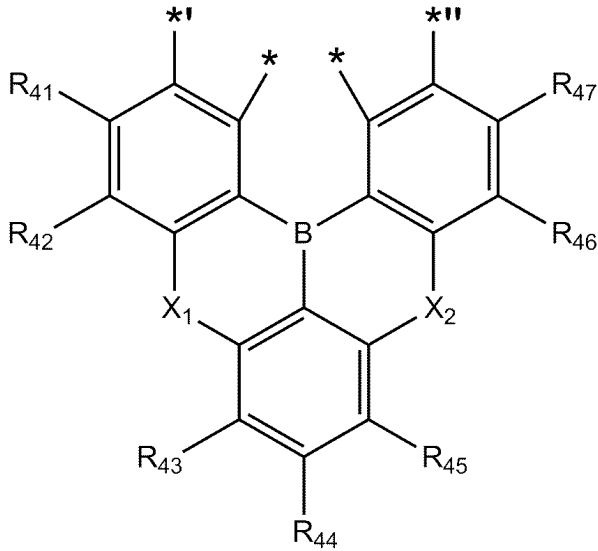
제8항에 있어서,



상기 화학식 1 중
유기금속 화합물:

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 1-2로 표시되는,

<화학식 1-2>



상기 화학식 1-2 중,

R₄₁ 및 R₄₂에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₂에 대한 설명을 참조하고,

R₄₃ 내지 R₄₅에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₅에 대한 설명을 참조하고,

R₄₆ 및 R₄₇에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₃에 대한 설명을 참조하고,

X₁ 및 X₂에 대한 설명은 상기 화학식 1 중의 설명을 참조하고,

*는 B₁₂ 또는 B₁₃과의 결합 사이트이고,

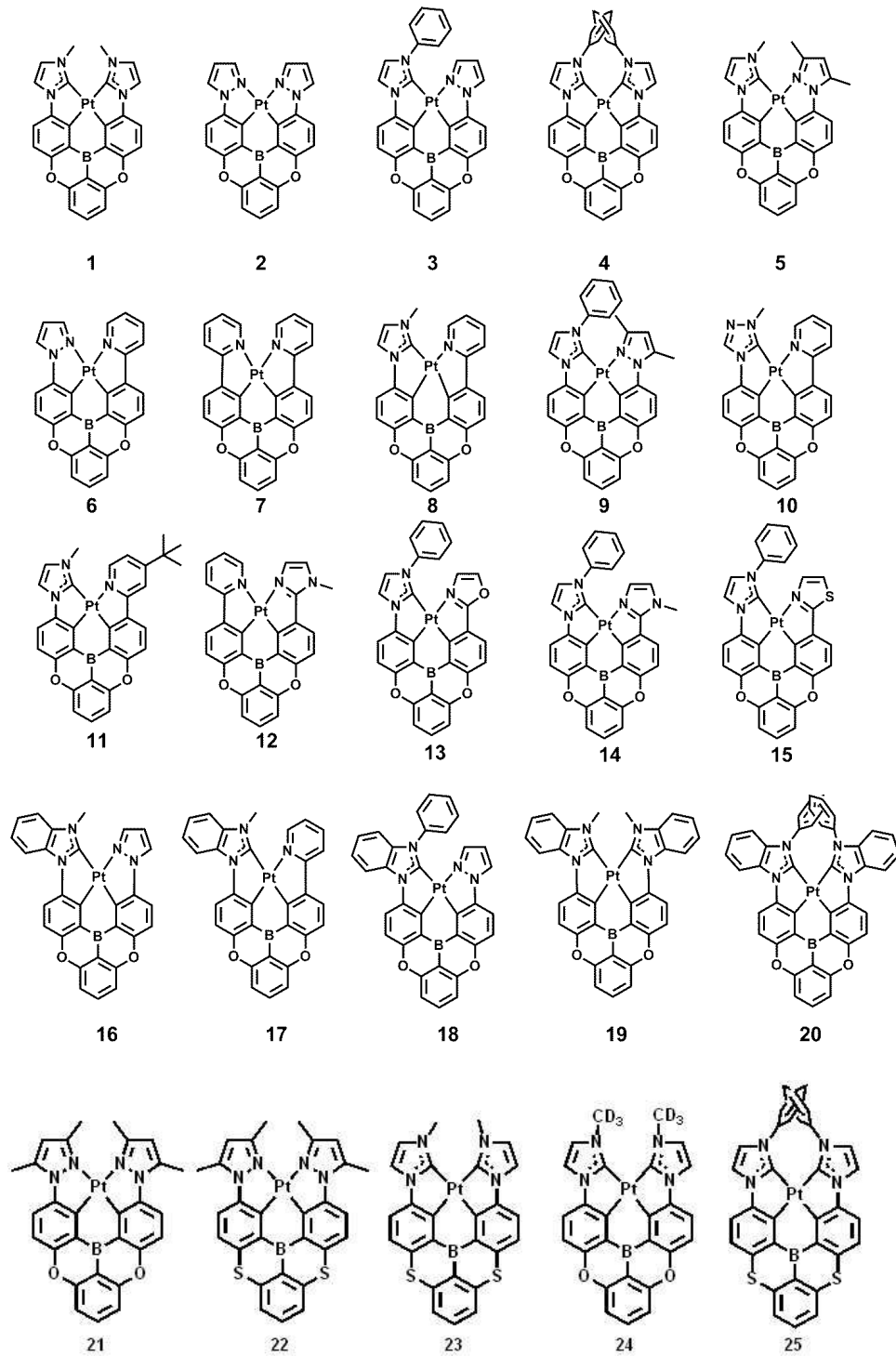
*'는 (L₁)_{a1}와의 결합 사이트이고,

*''은 (L₂)_{a2}와의 결합 사이트이다.

청구항 20

제8항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 25 중에서 선택되는, 유기금속 화합물:



발명의 설명

기술분야

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

배경기술

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

발명의 내용

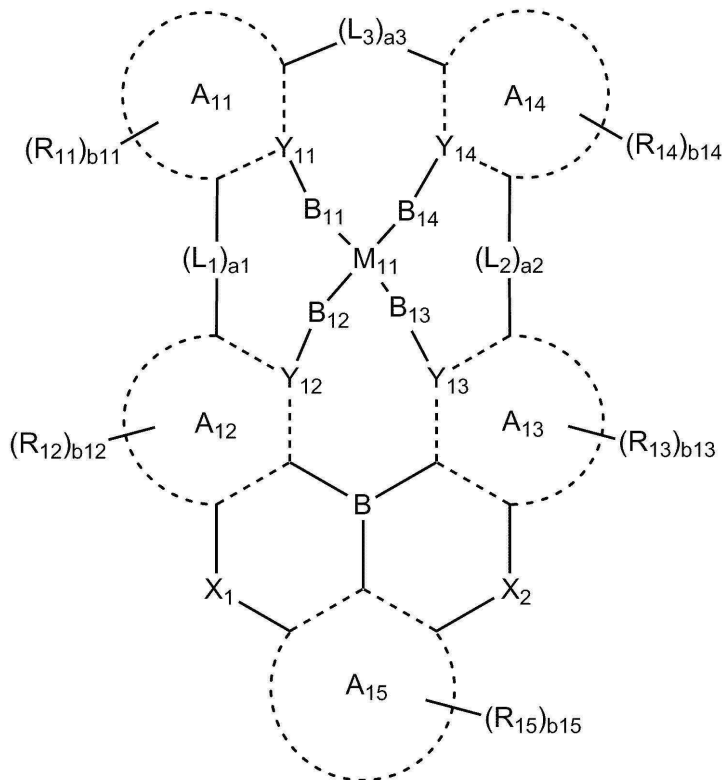
해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

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

[0006] <화학식 1>



[0007]

[0008] 상기 화학식 1 중,

[0009] M₁₁은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 아연(Zn), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 레늄(Re), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), यू로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고,

[0010] A₁₁ 내지 A₁₅는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0011] Y₁₁ 내지 Y₁₄는 서로 독립적으로, 탄소 원자(C) 및 질소 원자(N) 중에서 선택되고,

[0012] B₁₁ 내지 B₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, O 및 S 중에서 선택되고,

[0013] L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₁₆)(R₁₇)-*, *-C(R₁₆)=*, *=C(R₁₆)-*, *-C(R₁₆)=C(R₁₇)-*, *-C(=O)-*, *-C(=S)-*, *-C≡C-*, *-B(R₁₆)-*, *-N(R₁₆)-*, *-P(R₁₆)-*, *-Si(R₁₆)(R₁₇)-

, $-P(R_{16})(R_{17})-*$ 및 $*-Ge(R_{16})(R_{17})-*$ 중에서 선택되고,

- [0014] a1 및 a2는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고, a3는 0, 1 또는 2이고,
- [0015] a3가 0이면 A₁ 및 A₄는 연결되어 있지 않고,
- [0016] X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로, 0 및 S 중에서 선택되고,
- [0017] R₁₁ 내지 R₁₇은 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 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,
- [0018] R₁₆과 R₁₁, R₁₆과 R₁₂, R₁₆과 R₁₃, 및/또는 R₁₆과 R₁₄는 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0019] b11 내지 b15는 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0020] 상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 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 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0021] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0022] 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, 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;
- [0023] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0024] 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, 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, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환

그룹; 및

[0025] $-\text{Si}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})(\text{Q}_{33})$, $-\text{N}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{B}(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$, $-\text{C}(=\text{O})(\text{Q}_{31})$, $-\text{S}(=\text{O})_2(\text{Q}_{31})$ 및 $-\text{P}(=\text{O})(\text{Q}_{31})(\text{Q}_{32})$;

[0026] 중에서 선택되고,

[0027] 상기 Q_1 내지 Q_3 , Q_{11} 내지 Q_{13} , Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-\text{F}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택되고,

[0028] *은 이웃한 원자와의 결합사이트이고,

[0029] B는 붕소 원자이다.

[0030] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0031] 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율을 가질 수 있고, 고색순도를 나타낼 수 있는 바, 고품질의 유기 발광 소자 및 유기 발광 장치의 구현이 가능하다.

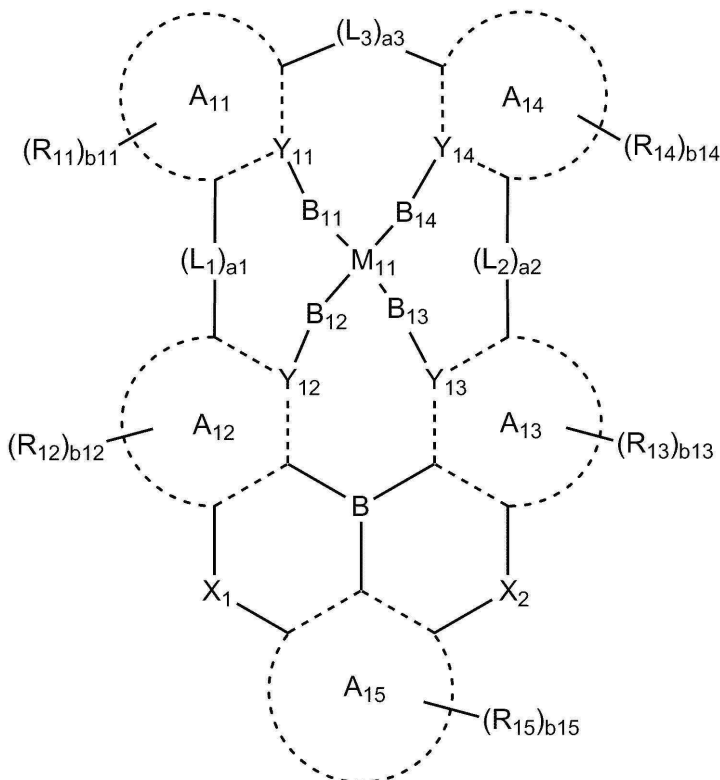
도면의 간단한 설명

[0032] 도 1 내지 4는 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 각각 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0033] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0034] <화학식 1>



[0035]

[0036] 상기 화학식 1 중, B는 붕소 원자이다.

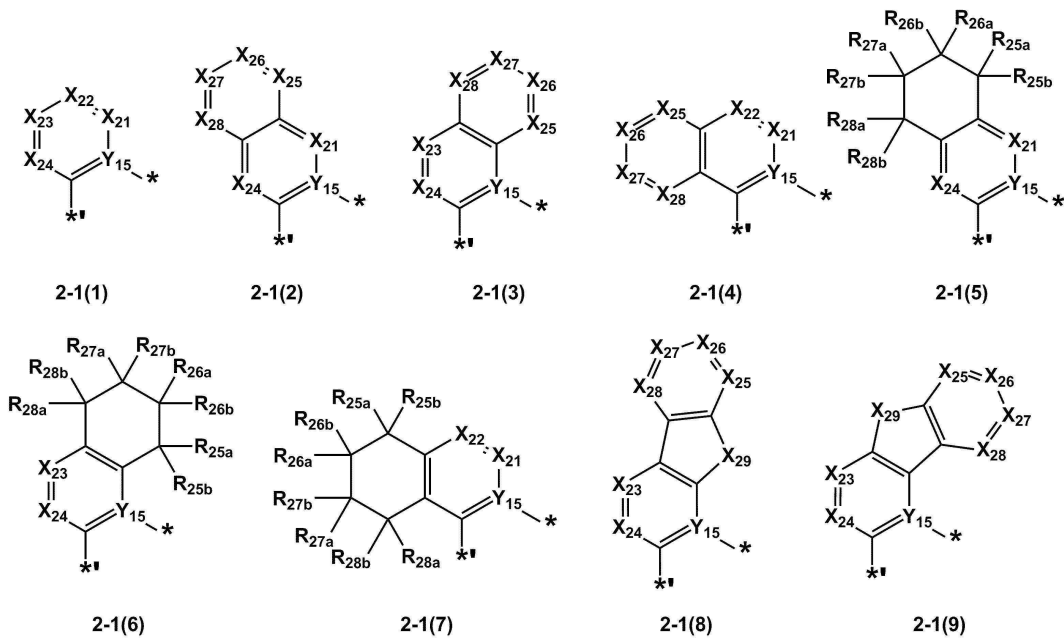
[0037] 상기 화학식 1 중, M₁₁은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 아연(Zn), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 레늄(Re), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택될 수 있다.

[0038] 일 구현예에 따르면, 상기 M₁₁은 Pt, Pd, Cu, Ag 및 Au 중에서 선택될 수 있다.

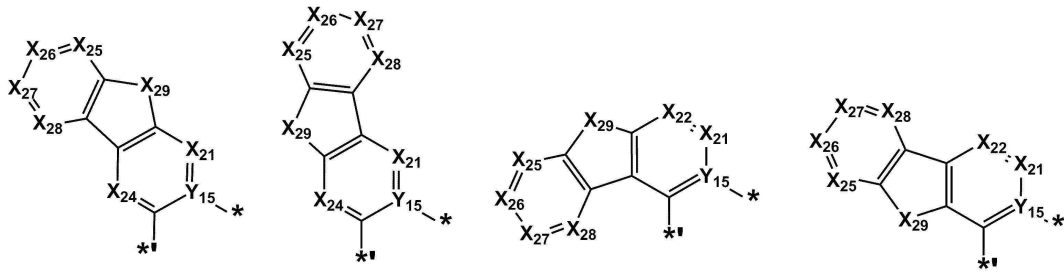
[0039] 상기 화학식 1 중, A₁₁ 고리 내지 A₁₅ 고리는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0040] 일 구현예에 따르면, 상기 A₁₁ 고리 내지 A₁₅ 고리는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 아졸렌 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, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 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 있다.

[0041] 일 구현예에 따르면, 상기 A₁₁ 고리 및 A₁₄ 고리는 서로 독립적으로, 하기 화학식 2-1(1) 내지 2-1(27) 및 2-2(1) 내지 2-2(20)로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



[0042]

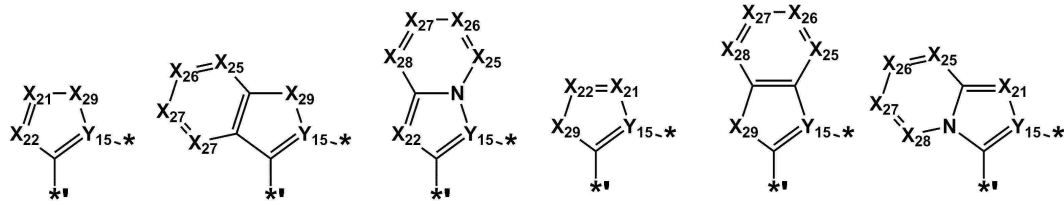


2-1(10)

2-1(11)

2-1(12)

2-1(13)



2-1(14)

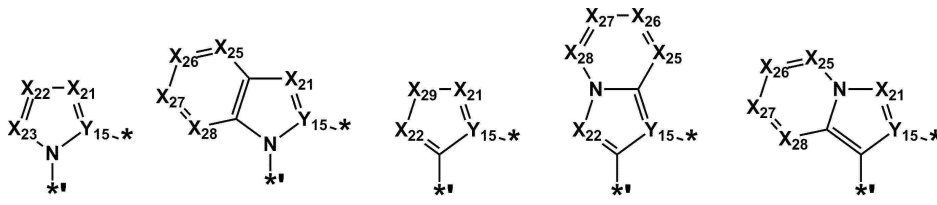
2-1(15)

2-1(16)

2-1(17)

2-1(18)

2-1(19)



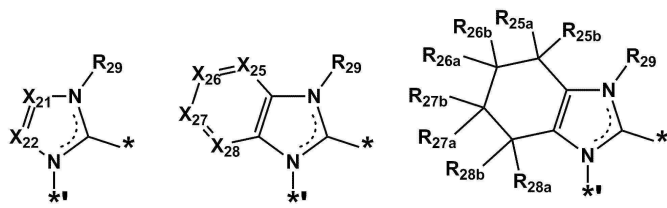
2-1(20)

2-1(21)

2-1(22)

2-1(23)

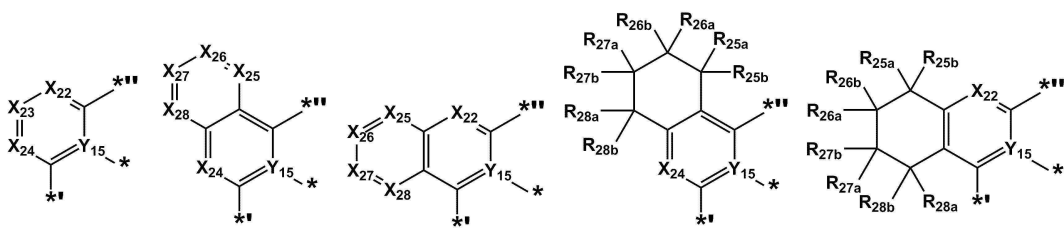
2-1(24)



2-1(25)

2-1(26)

2-1(27)



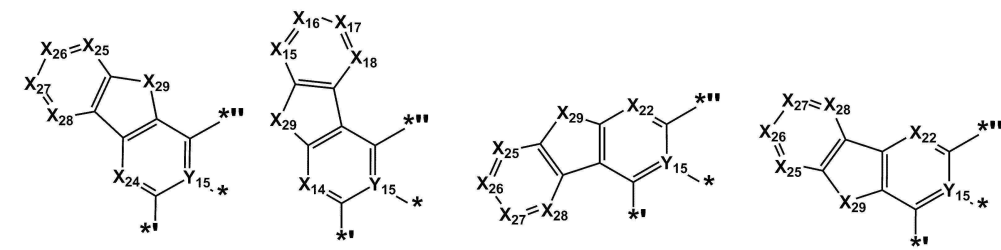
2-2(1)

2-2(2)

2-2(3)

2-2(4)

2-2(5)



2-2(6)

2-2(7)

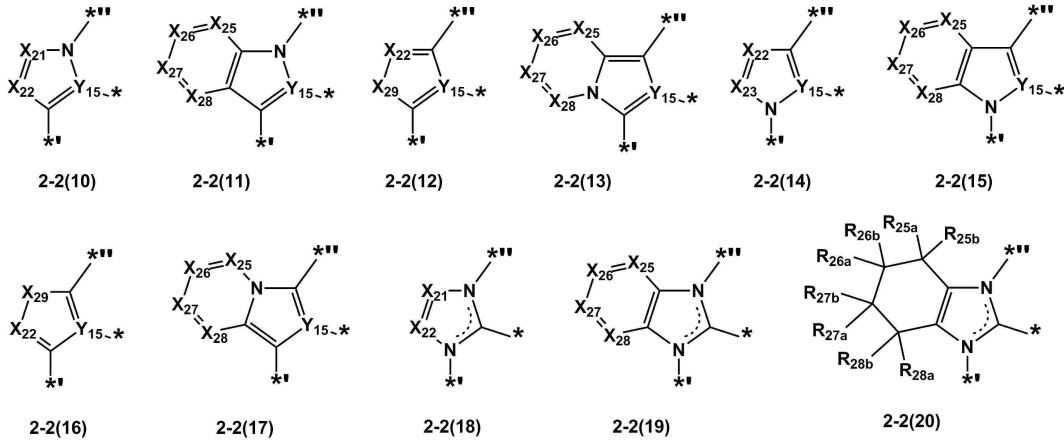
2-2(8)

2-2(9)

[0043]

[0044]

[0045]



[0046]

[0047]

[0048]

[0049]

[0050]

[0051]

[0052]

[0053]

[0054]

[0055]

상기 화학식 2-1(1) 내지 2-1(27) 및 2-2(1) 내지 2-2(20) 중,

Y_{15} 는 Y_{11} 또는 Y_{14} 이고,

X_{21} 는 N 또는 $C(R_{21})$ 이고, X_{22} 는 N 또는 $C(R_{22})$ 이고, X_{23} 는 N 또는 $C(R_{23})$ 이고, X_{24} 는 N 또는 $C(R_{24})$ 이고, X_{25} 는 N 또는 $C(R_{25})$ 이고, X_{26} 는 N 또는 $C(R_{26})$ 이고, X_{27} 는 N 또는 $C(R_{27})$ 이고, X_{28} 는 N 또는 $C(R_{28})$ 이고,

X_{29} 는 $C(R_{29a})(R_{29b})$, $N(R_{29})$, O, S 또는 $Si(R_{29a})(R_{29b})$ 이고,

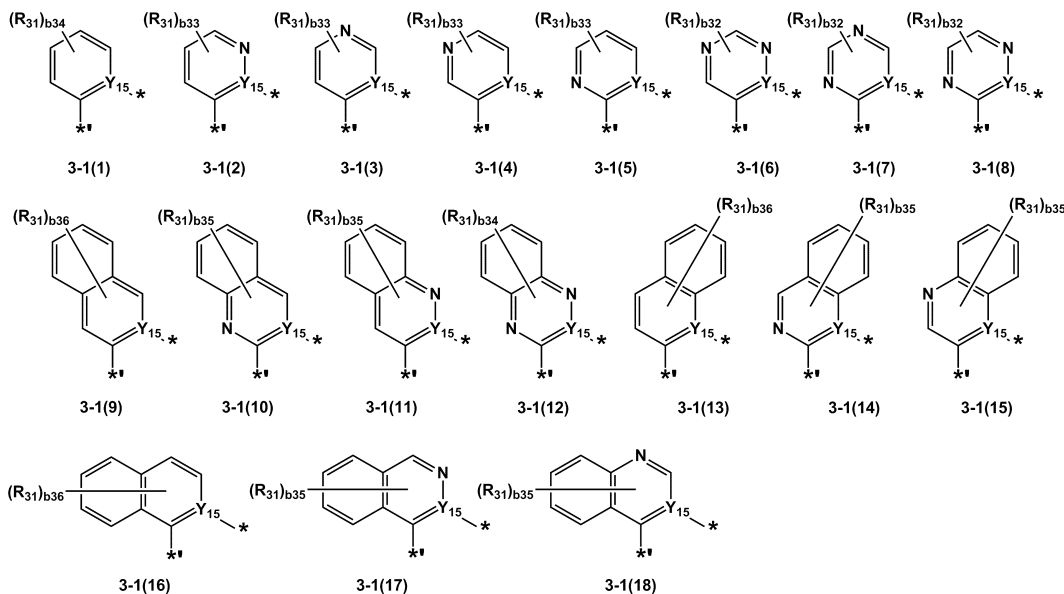
R_{21} 내지 R_{28} 및 R_{25a} 내지 R_{29b} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 후술하는 화학식 1 중 R_{11} 및 R_{14} 에 대한 설명을 참조하고,

*은 B_{11} 또는 B_{14} 과의 결합 사이트이고,

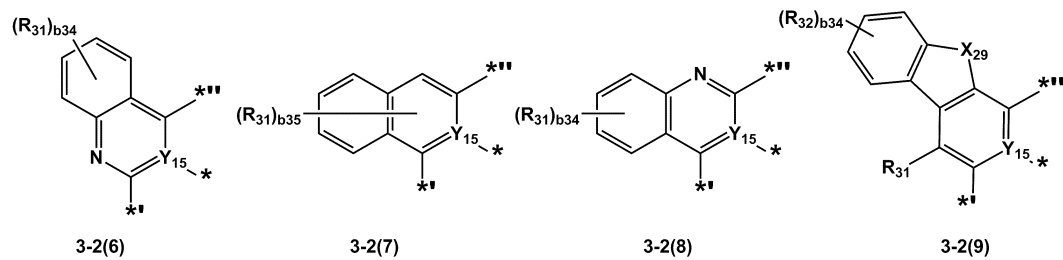
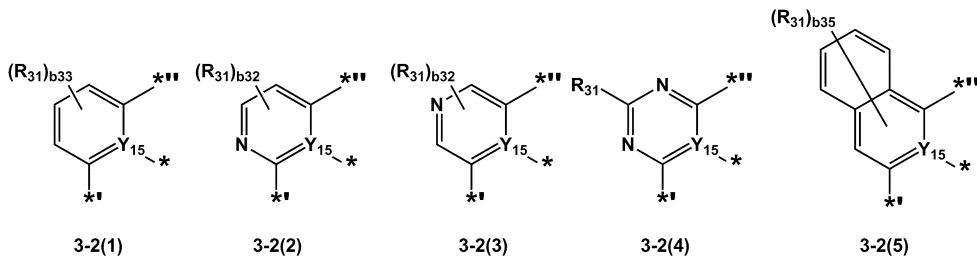
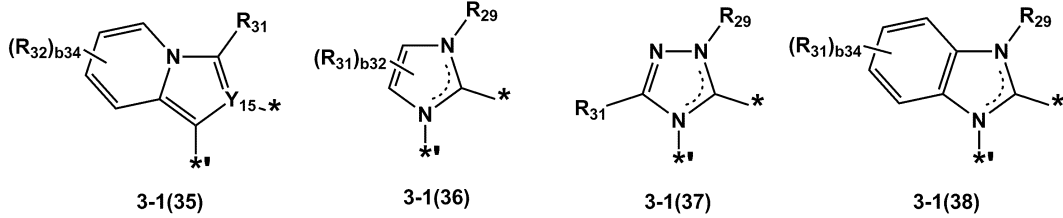
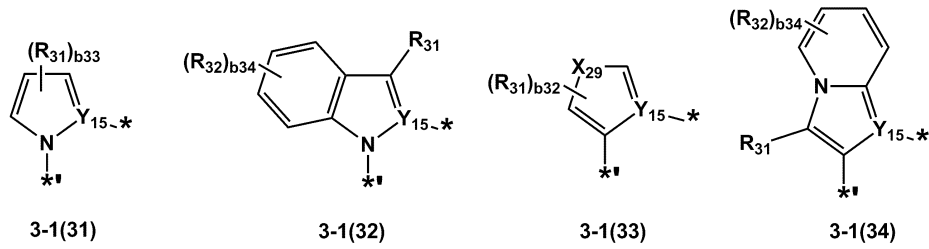
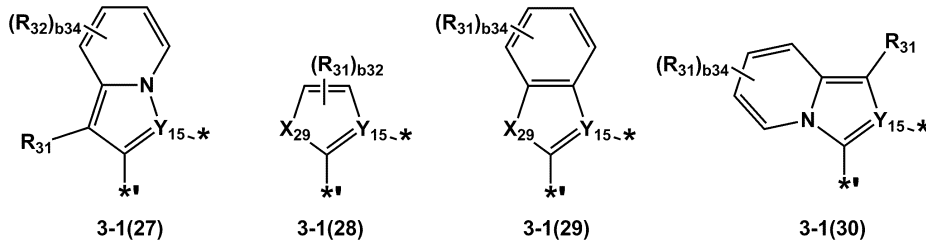
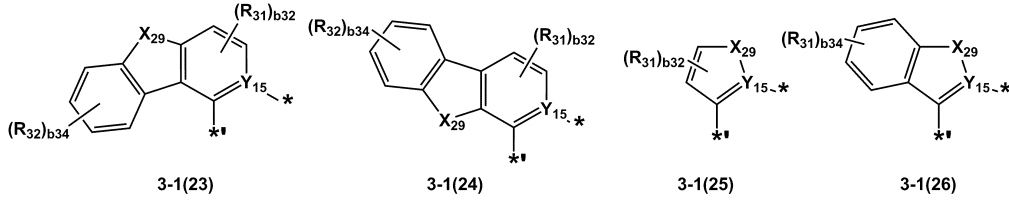
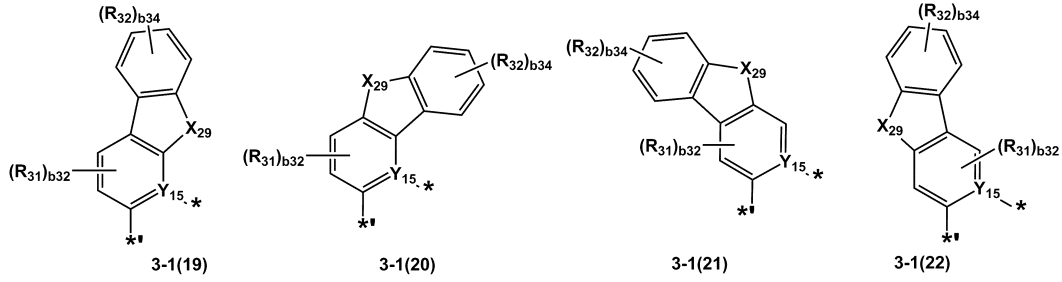
*'은 $(L_1)_{a1}$ 또는 $(L_2)_{a2}$ 와의 결합 사이트이고,

*''은 $(L_3)_{a3}$ 와의 결합 사이트이다.

다른 구현예에 따르면, 상기 A_{11} 고리 및 A_{14} 고리는 서로 독립적으로, 하기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(38) 및 3-2(1) 내지 3-2(23)로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



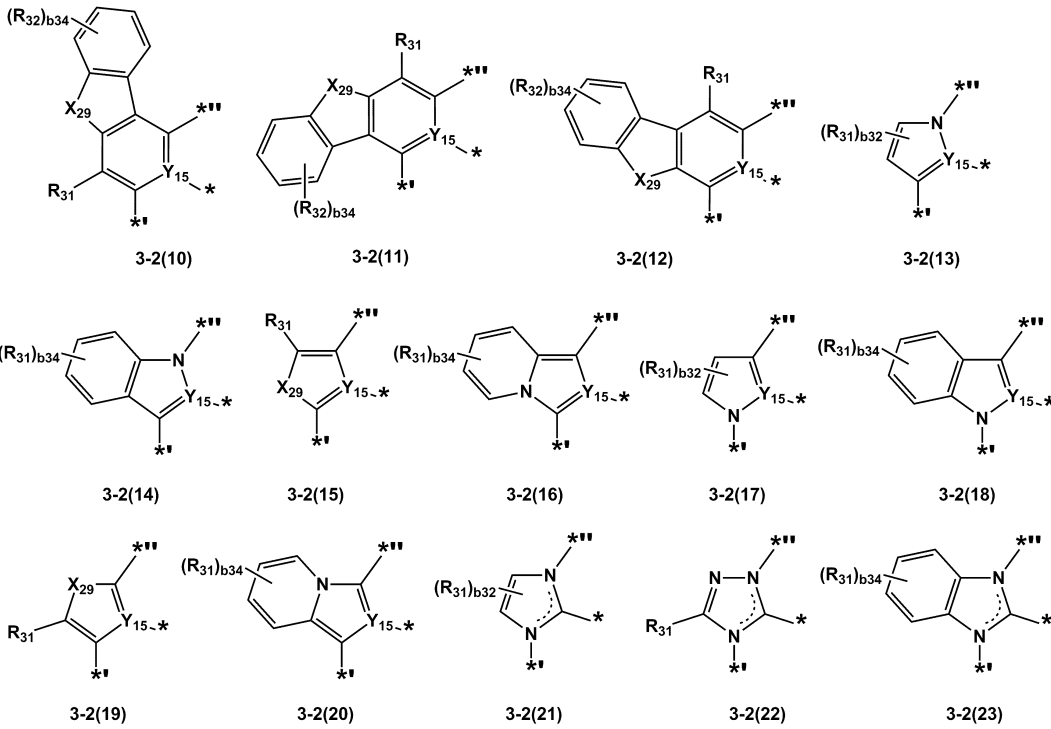
[0056]



[0057]

[0058]

[0059]



[0060]

[0061] 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(38) 및 3-2(1) 내지 3-2(23) 중,

[0062] Y_{15} 는 Y_{11} 또는 Y_{14} 이고,

[0063] X_{29} 는 $C(R_{29a})(R_{29b})$, $N(R_{29})$, O, S 또는 $Si(R_{29a})(R_{29b})$ 이고,

[0064] R_{29} , R_{29a} , R_{29b} , R_{31} 및 R_{32} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 후술하는 화학식 1 중 R_{11} 및 R_{14} 에 대한 설명을 참조하고,

[0065] b_{32} 는 1 또는 2이고,

[0066] b_{33} 은 1, 2 또는 3이고,

[0067] b_{34} 은 1, 2, 3 또는 4이고,

[0068] b_{35} 는 1, 2, 3, 4 또는 5이고,

[0069] *은 M과의 결합 사이트이고,

[0070] *'는 $(L_1)_{a1}$ 또는 $(L_2)_{a2}$ 와의 결합 사이트이고,

[0071] *''은 $(L_3)_{a3}$ 와의 결합 사이트이다.

[0072] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(38) 및 3-2(1) 내지 3-2(23) 중, R_{29} , R_{29a} , R_{29b} , R_{31} 및 R_{32} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

[0073] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

[0074] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및

[0075] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택될 수 있다.

- [0076] 예를 들어, 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(38) 및 3-2(1) 내지 3-2(23) 중, R_{29} , R_{29a} , R_{29b} , 복수의 R_{31} 및 복수의 R_{32} 중에서 선택된 적어도 하나가 C_1 - C_{20} 알킬기; 및 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기; 중에서 선택되는 경우, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 안정한 광학적 및 전기적 특성을 가질 수 있다.
- [0077] 다른 예로서, 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(38) 및 3-2(1) 내지 3-2(23) 중, R_{29} , R_{29a} , R_{29b} , 복수의 R_{31} 및 복수의 R_{32} 중에서 선택된 적어도 하나가 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되는 경우, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 벌키(bulky)한 치환기를 포함함에 따라 엑시플렉스(exciplex) 형성이 저해될 수 있다.
- [0078] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(38) 및 3-2(1) 내지 3-2(23) 중, R_{29} , R_{29a} , R_{29b} , R_{31} 및 R_{32} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, - CD_3 , 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기 및 페닐기 중에서 선택될 수 있다. 예를 들어, 상기 R_{29} , R_{29a} , R_{29b} , 복수의 R_{31} 및 복수의 R_{32} 중에서 선택된 적어도 하나가 메틸기 또는 - CD_3 인 경우, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 안정한 광학적 및 전기적 특성을 가질 수 있다. 다른 예로서, 상기 R_{29} , R_{29a} , R_{29b} , 복수의 R_{31} 및 복수의 R_{32} 중에서 선택된 적어도 하나가 페닐기인 경우, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 벌키(bulky)한 치환기를 포함함에 따라 엑시플렉스 형성이 저해될 수 있다.
- [0079] 일 구현예에 따르면, 상기 A_{11} 고리 및 A_{14} 고리는 서로 독립적으로, 상기 화학식 3-1(1), 3-1(28), 3-1(31), 3-1(36) 내지 3-1(38)로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0080] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, A_{12} 고리, A_{13} 고리 및 A_{15} 고리는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹 및 디벤조실롤 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0081] 상기 화학식 1 중, Y_{11} 내지 Y_{14} 는 서로 독립적으로, 탄소 원자(C) 및 질소 원자(N) 중에서 선택될 수 있다.
- [0082] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, Y_{11} 내지 Y_{14} 는 C이거나;
- [0083] Y_{11} 내지 Y_{13} 는 C이고, Y_{14} 는 N이거나;
- [0084] Y_{11} , Y_{12} 및 Y_{14} 는 C이고, Y_{13} 는 N이거나;
- [0085] Y_{11} , Y_{13} 및 Y_{14} 는 C이고, Y_{12} 는 N이거나;
- [0086] Y_{12} 내지 Y_{14} 는 C이고, Y_{11} 는 N이거나;
- [0087] Y_{11} 및 Y_{12} 는 C이고, Y_{13} 및 Y_{14} 는 N이거나;
- [0088] Y_{11} 및 Y_{13} 는 C이고, Y_{12} 및 Y_{14} 는 N이거나;
- [0089] Y_{11} 및 Y_{14} 는 C이고, Y_{12} 및 Y_{13} 는 N이거나;
- [0090] Y_{12} 및 Y_{13} 는 C이고, Y_{11} 및 Y_{14} 는 N이거나;
- [0091] Y_{12} 및 Y_{14} 는 C이고, Y_{11} 및 Y_{13} 는 N이거나; 또는
- [0092] Y_{13} 및 Y_{14} 는 C이고, Y_{11} 및 Y_{12} 는 N일 수 있다.
- [0093] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, Y_{11} 내지 Y_{14} 는 C이거나,

- [0094] Y₁₁ 내지 Y₁₃는 C이고, Y₁₄는 N이거나;
- [0095] Y₁₂ 내지 Y₁₄는 C이고, Y₁₁는 N이거나; 또는
- [0096] Y₁₂ 및 Y₁₃는 C이고, Y₁₁ 및 Y₁₄는 N일 수 있다.
- [0097] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,
- [0098] i) Y₁₁ 및 Y₁₄가 N이거나;
- [0099] ii) Y₁₁가 C이고, M₁₁과 Y₁₁의 결합 또는 B₁₁과 Y₁₁의 결합이 배위 결합이거나;
- [0100] iii) Y₁₄가 C이고, M₁₁과 Y₁₄의 결합 또는 B₁₄과 Y₁₄의 결합이 배위 결합이거나; 또는
- [0101] iv) Y₁₁ 및 Y₁₄가 C이고, M₁₁과 Y₁₁의 결합 또는 B₁₁과 Y₁₁의 결합이 배위 결합이고, M₁₁과 Y₁₄의 결합 또는 B₁₄과 Y₁₄의 결합이 배위 결합일 수 있다.
- [0102] 상기 화학식 1 중, B₁₁ 내지 B₁₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택될 수 있다.
- [0103] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, B₁₁ 내지 B₁₄가 모두 단일 결합이거나;
- [0104] B₁₁이 *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택되고, B₁₂ 내지 B₁₄가 단일 결합이거나;
- [0105] B₁₂가 *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택되고, B₁₁, B₁₃ 및 B₁₄가 단일 결합이거나;
- [0106] B₁₃가 *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택되고, B₁₁, B₁₂ 및 B₁₄가 단일 결합이거나; 또는
- [0107] B₁₄가 *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택되고, B₁₁ 내지 B₁₃가 단일 결합일 수 있다.
- [0108] 예를 들어, 상기 B₁₁ 내지 B₁₄가 모두 단일 결합일 수 있다.
- [0109] B₁₁이 단일 결합인 경우, M₁₁과 Y₁₁은 직접(directly) 결합한다. B₁₂가 단일 결합인 경우, M₁₁과 Y₁₂는 직접(directly) 결합한다. B₁₃가 단일 결합인 경우, M₁₁과 Y₁₃는 직접(directly) 결합한다. B₁₄이 단일 결합인 경우, M₁₁과 Y₁₄는 직접(directly) 결합한다.
- [0110] 일 구현예에 따르면, B₁₁ 내지 B₁₄가 모두 단일 결합이고, M₁₁과 Y₁₁의 결합, M₁₁과 Y₁₂의 결합, M₁₁과 Y₁₃의 결합 및 M₁₁과 Y₁₄의 결합 중 2개는 배위 결합이고, 나머지 2개는 공유 결합일 수 있다.
- [0111] 예를 들어, B₁₁ 내지 B₁₄가 모두 단일 결합이고, M₁₁과 Y₁₁의 결합 및 M₁₁과 Y₁₄의 결합은 배위 결합이고, M₁₁과 Y₁₂의 결합 및 M₁₁과 Y₁₃의 결합은 공유 결합일 수 있다.
- [0112] 상기 화학식 1 중, L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₁₆)(R₁₇)-*, *-C(R₁₆)=*, *=C(R₁₆)-*, *-C(R₁₆)=C(R₁₇)-*, *-C(=O)-*, *-C(=S)-*, *-C≡C-*, *-B(R₁₆)-*, *-N(R₁₆)-*, *-P(R₁₆)-*, *-Si(R₁₆)(R₁₇)-*, *-P(R₁₆)(R₁₇)-* 및 *-Ge(R₁₆)(R₁₇)-* 중에서 선택될 수 있다.
- [0113] 일 구현예에 따르면, 상기 L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₁₅)(R₁₆)-*, *-B(R₁₅)-*, *-N(R₁₅)-*, *-Si(R₁₅)(R₁₆)-* 및 *-P(R₁₅)(R₁₆)-* 중에서 선택될 수 있다.
- [0114] 다른 구현예에 따르면, 상기 L₁ 내지 L₃는 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-* 및 *-S-* 중에서 선택될 수 있다.
- [0115] a₁ 내지 a₃는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고, a₁ 내지 a₃ 중 적어도 2개는 서로 독립적으로, 1, 2 및 3 중에서 선택되고,
- [0116] a₁가 0이면 A₁₁ 및 A₁₄는 연결되어 있지 않고, a₂가 0이면 A₁₃ 및 A₁₄는 연결되어 있지 않고, a₃가 0이면 A₁₁ 및

A₁₄는 연결되어 있지 않다.

- [0117] 일 구현예에 따르면, a₁ 및 a₂가 1이고, a₃가 0이거나;
- [0118] a₁ 및 a₃가 1이고, a₂가 0이거나; 또는
- [0119] a₂ 및 a₃가 1이고, a₁가 0일 수 있다.
- [0120] 다른 구현예에 따르면, 상기 L₁ 및 L₂는 각각 단일 결합이고, a₁ 및 a₂는 각각 1이고, a₃는 0일 수 있다.
- [0121] 상기 화학식 1 중, X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로, 0 및 S 중에서 선택될 수 있다. 예를 들어, X₁ 및 X₂는 모두 0이거나, 또는 X₁ 및 X₂는 모두 S일 수 있다.
- [0122] 상기 화학식 1 중, R₁₁ 내지 R₁₇은 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 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,
- [0123] R₁₆과 R₁₁, R₁₆과 R₁₂, R₁₆과 R₁₃, 및/또는 R₁₆과 R₁₄는 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.
- [0124] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, b₁₁개의 R₁₁ 중 적어도 하나 및/또는 b₁₄개의 R₁₄ 중 적어도 하나가 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기인 경우, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 안정한 광학적 및 전기적 특성을 가질 수 있다.
- [0125] 다른 예로서, 상기 화학식 1 중, b₁₁개의 R₁₁ 중 적어도 하나 및/또는 b₁₄개의 R₁₄ 중 적어도 하나가 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기인 경우, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 엑시플렉스 형성이 저해될 수 있다. 또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중, b₁₁개의 R₁₁ 중 적어도 하나 및 b₁₄개의 R₁₄ 중 적어도 하나가 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기인 경우, 복수의 아릴기에 의한 파이-파이($\pi-\pi$) 상호작용에 의한 추가적인 안정화 효과를 얻을 수 있다.
- [0126] 일 구현예에 따르면, 상기 R₁₁ 내지 R₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0127] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0128] 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, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 벤조퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사

졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜닐기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포퓨라닐기, 디나프토포티오펜닐기, 디나프토포실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜닐기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기;

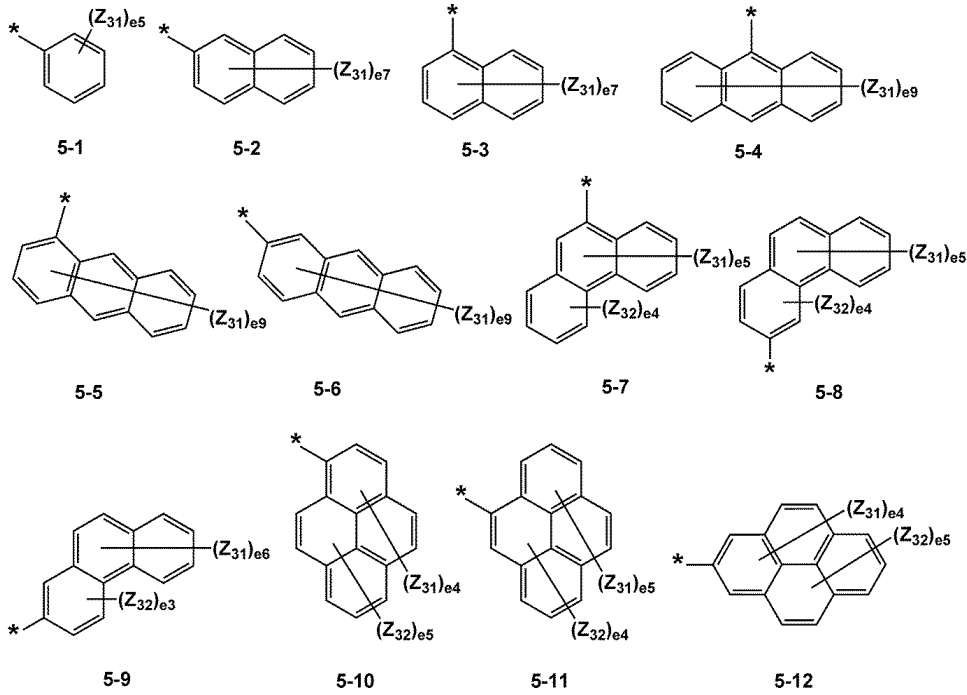
[0129] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아졸레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜닐기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포퓨라닐기, 디나프토포티오펜닐기, 디나프토포실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜닐기, 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, 아졸레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 나프토벤조티오펜닐기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토포퓨라닐기, 디나프토포티오펜닐기, 디나프토포실롤일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오펜닐기, 아자디벤조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기 및 인돌로카바졸일기; 및

[0130] -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 선택될 수 있다.

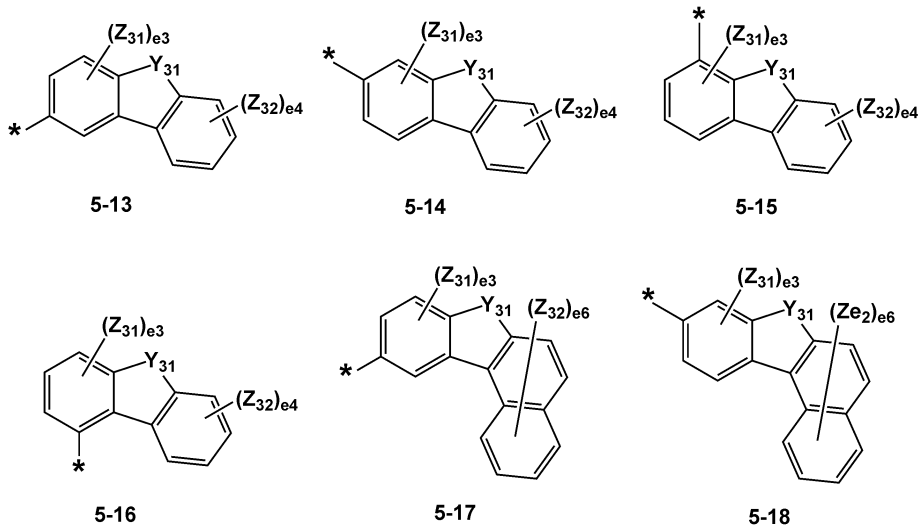
[0131] 일 구현예에 따르면, 상기 R₁₁ 내지 R₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0132] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기; 및

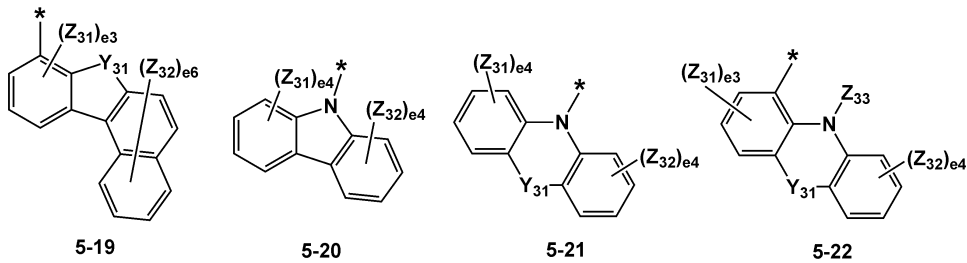
[0133] 하기 화학식 5-1 내지 5-25 및 6-1 내지 6-55 중 어느 하나로 표시된 그룹; 중에서 선택될 수 있다:



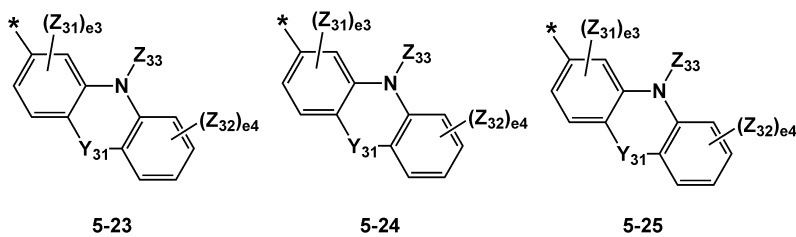
[0134]

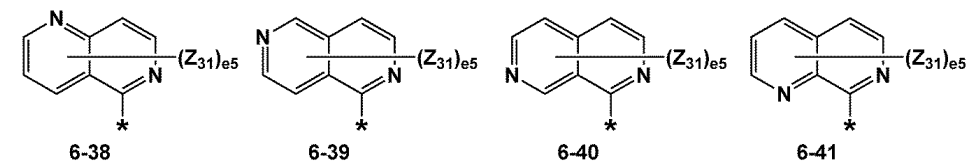
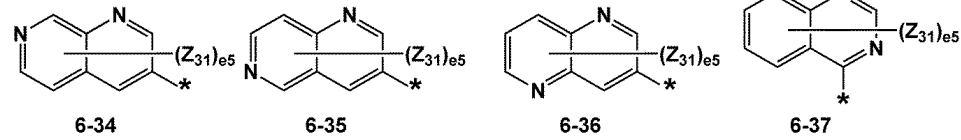
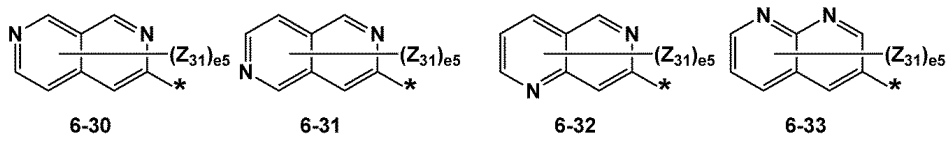
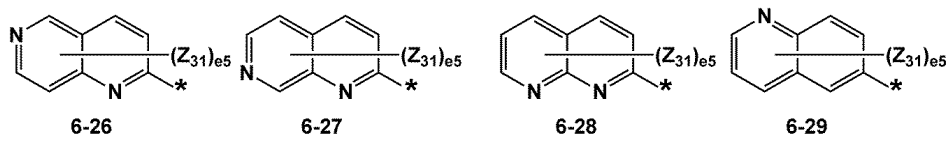
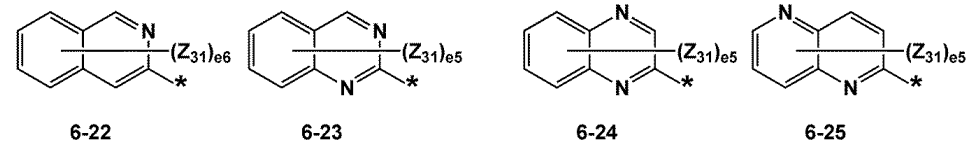
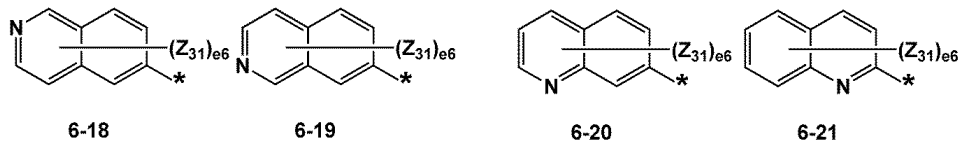
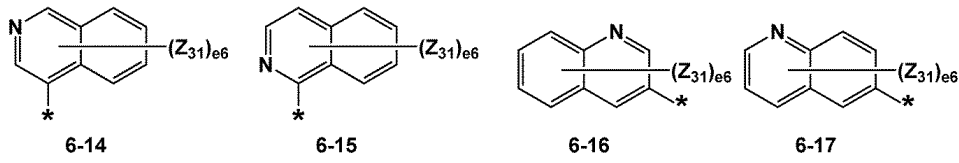
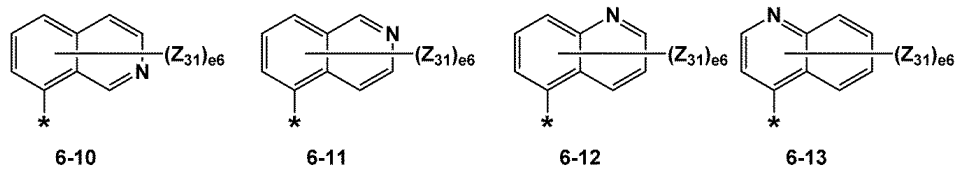
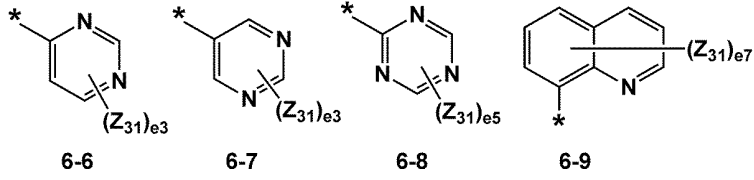
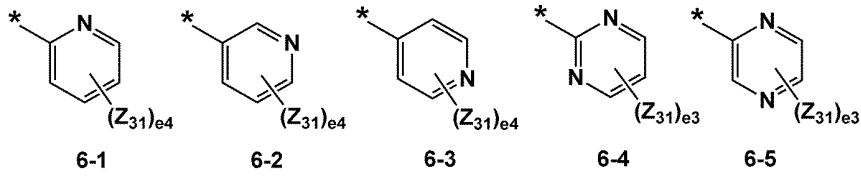


[0135]



[0136]

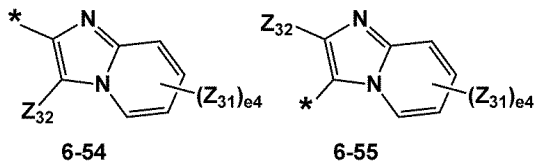
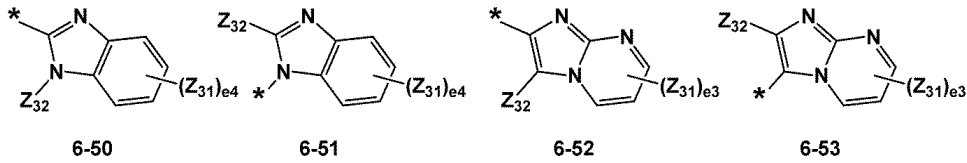
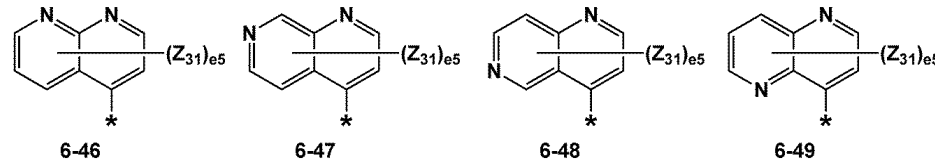
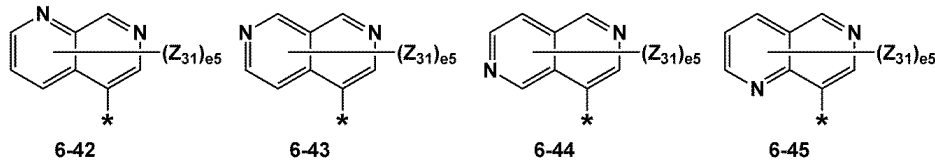




[0137]

[0138]

[0139]



[0140]

[0141]

[0142]

[0143]

[0144]

[0145]

[0146]

[0147]

[0148]

[0149]

[0150]

[0151]

[0152]

[0153]

[0154]

[0155]

[0156]

상기 화학식 5-1 내지 5-25 및 6-1 내지 6-55 중,

Y_{31} 은 O, S, C(Z_{34})(Z_{35}), N(Z_{34}) 또는 Si(Z_{34})(Z_{35})이고,

Z_{31} 내지 Z_{35} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알케닐기, C_1 - C_{20} 알키닐기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택되고,

e2는 1 또는 2이고,

e3는 1 내지 3 중에서 선택된 정수이고,

e4는 1 내지 4 중에서 선택된 정수이고,

e5는 1 내지 5 중에서 선택된 정수이고,

e6은 1 내지 6 중에서 선택된 정수이고,

e7은 1 내지 7 중에서 선택된 정수이고,

e9는 1 내지 9 중에서 선택된 정수이고,

* 은 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

다른 구현예에 따르면, 상기 R_{11} 내지 R_{17} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

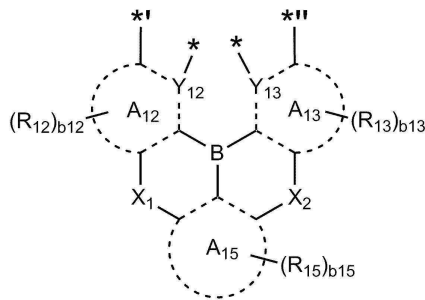
중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택

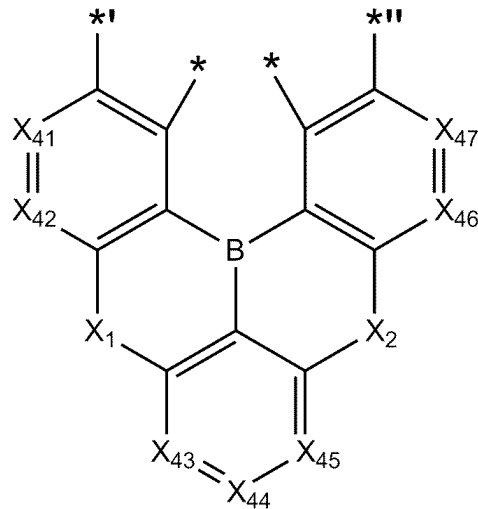
된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택될 수 있다.

- [0157] 상기 화학식 1 중, b11 내지 b15는 서로 독립적으로, 1 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있다.
- [0158] b11은 R₁₁의 개수를 나타내는 것으로, b11이 2 이상일 경우, 2 이상의 R₁₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0159] b12는 R₁₂의 개수를 나타내는 것으로, b12가 2 이상일 경우, 2 이상의 R₁₂는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0160] b13는 R₁₃의 개수를 나타내는 것으로, b13가 2 이상일 경우, 2 이상의 R₁₃는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0161] b14는 R₁₄의 개수를 나타내는 것으로, b14가 2 이상일 경우, 2 이상의 R₁₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0162] b15는 R₁₅의 개수를 나타내는 것으로, b15가 2 이상일 경우, 2 이상의 R₁₅는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.



[0163] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 화학식 1-1로 표시될 수 있다: 로 표시되는 모이어티가 하기 화

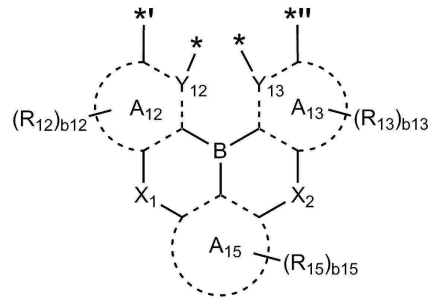
[0164] <화학식 1-1>



- [0165] 상기 화학식 1-1 중,
- [0166] X₄₁는 N 또는 C(R₄₁)이고, X₄₂는 N 또는 C(R₄₂)이고, X₄₃는 N 또는 C(R₄₃)이고, X₄₄는 N 또는 C(R₄₄)이고, X₄₅는 N 또는 C(R₄₅)이고, X₄₆는 N 또는 C(R₄₆)이고, X₄₇는 N 또는 C(R₄₇)이고,
- [0167] R₄₁ 및 R₄₂에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₂에 대한 설명을 참조하고,
- [0168] R₄₃ 내지 R₄₅에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₅에 대한 설명을 참조하고,
- [0169] R₄₆ 및 R₄₇에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R₁₃에 대한 설명을 참조하고,
- [0170] X₁ 및 X₂에 대한 설명은 상기 화학식 1 중의 설명을 참조하고,
- [0171] *는 B₁₂ 또는 B₁₃과의 결합 사이트이고,
- [0172]

[0173] *'는 $(L_1)_{a1}$ 와의 결합 사이트이고,

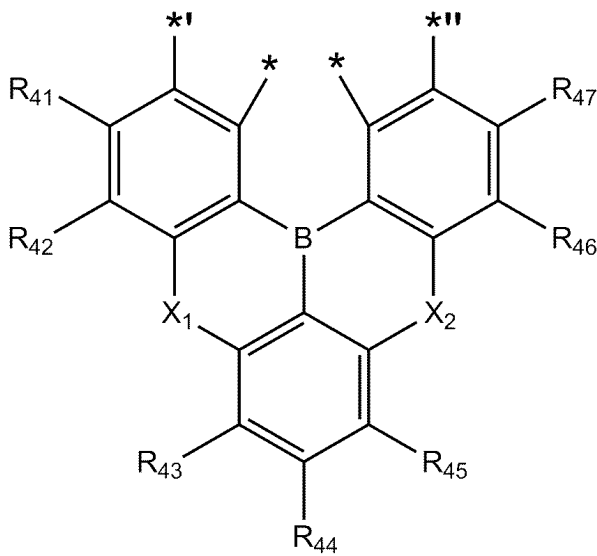
[0174] *''은 $(L_2)_{a2}$ 와의 결합 사이트이다.



[0175] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 화학식 1-2로 표시될 수 있다:

로 표시되는 모이어티가 하기

[0176] <화학식 1-2>



[0177]

[0178] 상기 화학식 1-2 중,

[0179] R_{41} 및 R_{42} 에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R_{12} 에 대한 설명을 참조하고,

[0180] R_{43} 내지 R_{45} 에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R_{15} 에 대한 설명을 참조하고,

[0181] R_{46} 및 R_{47} 에 대한 설명은 상기 화학식 1 중 R_{13} 에 대한 설명을 참조하고,

[0182] X_1 및 X_2 에 대한 설명은 상기 화학식 1 중의 설명을 참조하고,

[0183] *는 B_{12} 또는 B_{13} 과의 결합 사이트이고,

[0184] *'는 $(L_1)_{a1}$ 와의 결합 사이트이고,

[0185] *''은 $(L_2)_{a2}$ 와의 결합 사이트이다.

[0186] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1-1 및 1-2 중, R_{41} 내지 R_{47} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

[0187] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

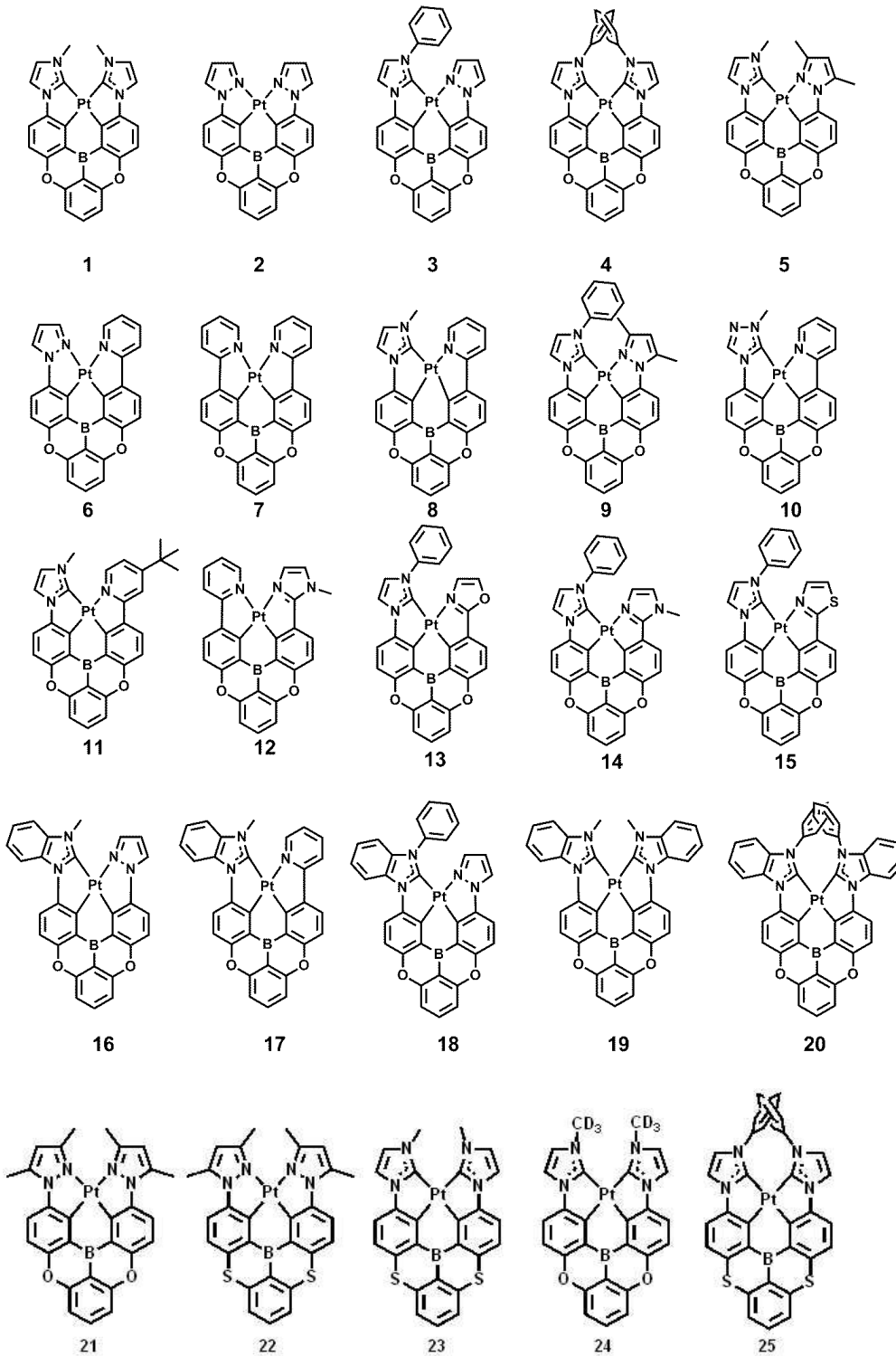
[0188] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐

기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 및

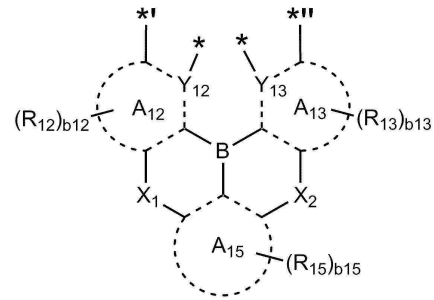
- [0189] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 카바졸일기 및 트리아지닐기; 중에서 선택될 수 있다.
- [0190] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1-1 및 1-2 중, R₄₁ 내지 R₄₇는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기 및 페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0191] 예를 들어, 상기 화학식 1-1 및 1-2 중, R₄₁ 내지 R₄₇이 모두 수소일 수 있다.
- [0192] 상기 치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 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 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0193] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0194] 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, 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;
- [0195] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0196] 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, 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, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0197] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0198] 중에서 선택되고,
- [0199] 상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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 선택되고,

[0200] *은 이웃한 원자와의 결합사이트이다.

[0201] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0203]



- [0204] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 로 표시되는 모이어티(이하, '모이어티 A'라고 함)를 포함한다. 상기 모이어티 A는, 붕소 원자와 X₁ 및 X₂ 원자(산소 원자 또는 황 원자)가 방향족 고리의 공액(conjugation) 구조를 절단하는 구조를 포함한다. 이에 따라, 발광 파장이 단파장으로 이동하게 되어 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 고색순도의 청색 발광을 할 수 있다.
- [0205] 더불어, 상기 모이어티 A를 포함하는 유기금속 화합물은, 상기 모이어티 A와 같은 축합환 구조를 포함한 링커가 아닌 링커를 포함하는 화합물과 비교하여 상대적으로 작은 ΔE_{ST}를 가지므로 삼중항 엑시톤 수명이 짧아질 수 있다. 이에 따라, 상기 유기금속 화합물을 유기 발광 소자에 적용시 에너지 전달에 유리하고 발광 효율이 높을 수 있다.
- [0206] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물 중 A₁₁ 및 A₁₄ 고리 중 적어도 하나가 카빈(carbene)을 포함한 경우, 탄소와 금속중심과의 결합력이 탄소와 질소와의 결합력보다 강하여 광학적 및/또는 전기적으로 보다 안정한 구조를 가지며, 이로 인해 장수명의 발광소자를 구현할 수 있다. 다른 측면에서, 상기 A₁₁ 및 A₁₄ 고리 중 적어도 하나에 카빈을 도입하여 분자 전체적으로 비대칭 분자구조를 유도할 수 있다. 상기 유기금속 화합물이 비대칭 분자구조를 갖는 경우, 상대적으로 유기금속 화합물의 최저준위 비점유 분자궤도(LUMO, lowest unoccupied molecular orbital) 에너지가 높아져서, 발광 파장이 단파장으로 이동하여 고색순도의 청색 발광을 할 수 있다.
- [0207] 더불어, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 상기 모이어티 A를 포함함으로써 경직된(rigid) 구조를 가지므로, 상기 유기금속 화합물이 적용된 유기 발광 소자는 내구성이 높아 소자의 수명이 길다.
- [0208] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0209] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은 발광층에 포함될 수 있다. 상기 발광층에 포함된 유기금속 화합물은 도펀트로서의 역할을 수 있다. 또는, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극의 외측에 위치한 캡핑층 재료로 사용될 수 있다.
- [0210] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0211] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.
- [0212] 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.
- [0213] 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 수송층에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0214] 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 발광층이 상기 유기금속 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.
- [0215] 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자의 발광층이 상기 유기금속 화합물을 1종 이상 포함하고, 상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 호스트의 함량이 상기 발광층에 포함된 유기금속 화합물의

합량보다 클 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층에 포함된 상기 유기금속 화합물의 합량이 상기 발광층 100 중량 부 당 0.01 내지 30 중량부일 수 있다.

- [0216] 일 구현예에 따르면, 상기 호스트는 서로 다른 2종의 호스트를 포함할 수 있다.
- [0217] 상기 서로 다른 2종의 호스트의 중량비는 90 : 10 내지 10 : 90일 수 있다. 예를 들어, 상기 서로 다른 2종의 호스트의 중량비는 약 80 : 20, 70 : 30, 60 : 40, 50 : 50, 40 : 60, 30 : 70, 20 : 80의 범위일 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 상기 서로 다른 2종의 호스트의 중량비는 약 50 : 50 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0218] 일 구현예에 따르면, 상기 호스트는 제1호스트 및 제2호스트를 포함하고, 상기 제1호스트는 카바졸-함유 호스트 또는 실릴-함유 호스트를 포함하고, 상기 제2호스트는 포스핀옥사이드-함유 호스트를 포함할 수 있다.
- [0219] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층이 상기 유기금속 화합물을 포함하고, 상기 발광층은 청색광을 방출할 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층으로부터, 430 nm 이상 및 490 nm 이하의 최대 발광 파장, 예를 들면 450 nm 이상 485 nm 이하, 다른 예로서 452 nm 이상 470 nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 청색광이 방출될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0220] 일 구현예에 따르면, 상기 제1전극이 애노드이고, 상기 제2전극이 캐소드이고, 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 배치된 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 포함할 수 있다.
- [0221] 일 구현예에 따르면, 상기 전자 수송 영역이 포스핀옥사이드-함유 화합물 또는 실릴-함유 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함하고, 상기 정공 저지층은 상기 발광층에 직접 (directly) 접촉되어 있고, 상기 정공 저지층이 상기 포스핀옥사이드-함유 화합물 또는 실릴-함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0222] 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.
- [0223] [도 1에 대한 설명]
- [0224] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 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.
- [0225] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0226] [제1전극(110)]
- [0227] 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.
- [0228] 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.
- [0229] 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.
- [0230] 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.

[0231] [유기층(150)]

[0232] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.

[0233] 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.

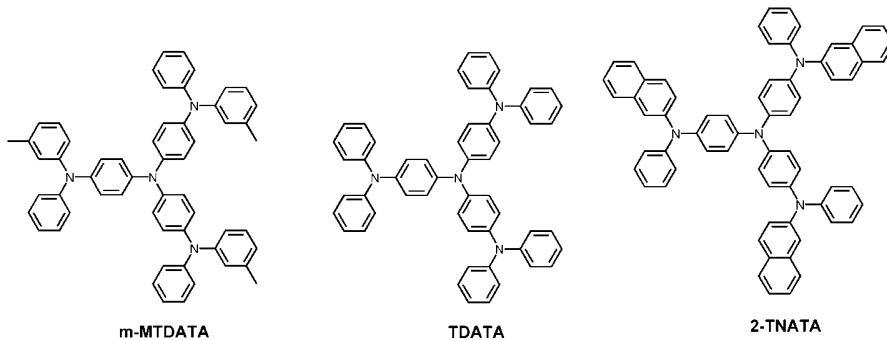
[0234] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]

[0235] 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.

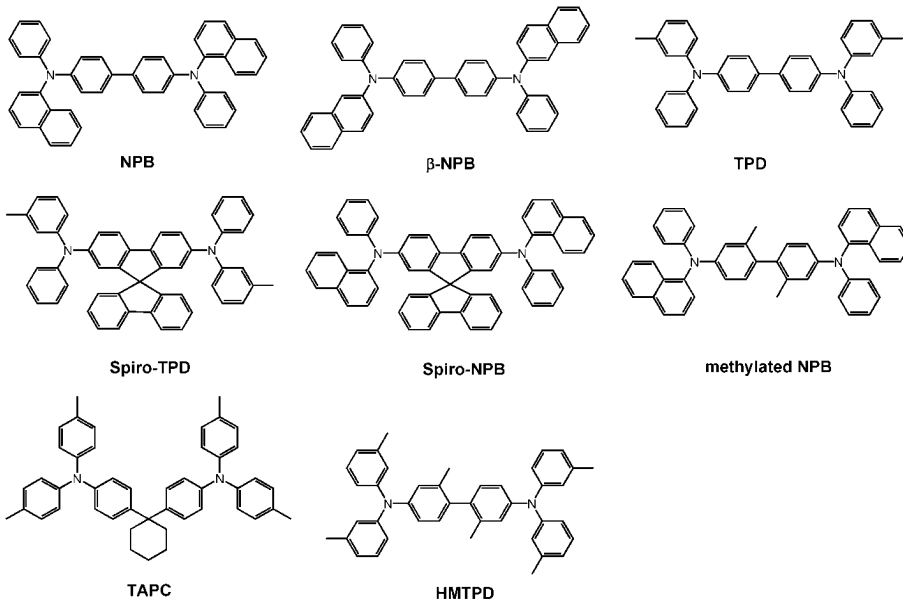
[0236] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.

[0237] 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.

[0238] 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:



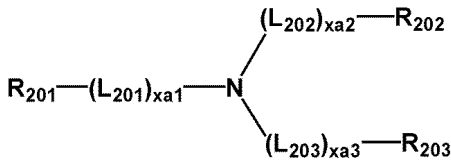
[0239]



[0240]

[0241]

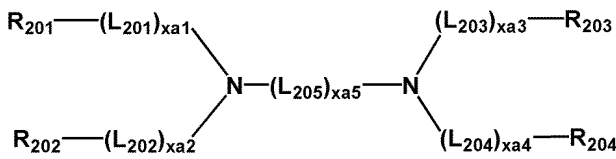
<화학식 201>



[0242]

[0243]

<화학식 202>



[0244]

[0245]

상기 화학식 201 및 202 중,

[0246]

L_{201} 내지 L_{204} 는 서로 독립적으로, 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,

[0247]

L_{205} 은, $*-O-*'$, $*-S-*'$, $*-N(Q_{201})-*'$, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{20} 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{20} 알케닐렌기, 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,

[0248]

x_{a1} 내지 x_{a4} 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0249]

x_{a5} 는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0250]

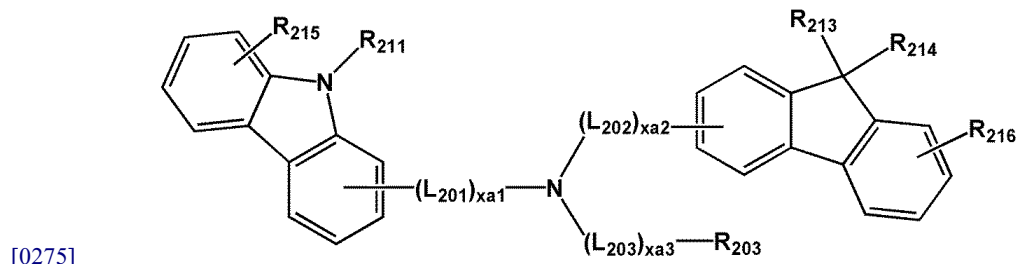
R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환

된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

- [0251] 예를 들어, 상기 화학식 202 중 R_{201} 과 R_{202} 는, 선택적으로(optionally), 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있고, R_{203} 과 R_{204} 는, 선택적으로, 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0252] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,
- [0253] L_{201} 내지 L_{205} 는 서로 독립적으로,
- [0254] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-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
- [0255] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1 - C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-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(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}) 및 -N(Q_{31})(Q_{32}) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-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;
- [0256] 중에서 선택되고,
- [0257] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0258] 다른 구현예에 따르면, xa_1 내지 xa_4 는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0259] 또 다른 구현예에 따르면, xa_5 는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.
- [0260] 또 다른 구현예에 따르면, R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-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; 및
- [0261] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1 - C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기,

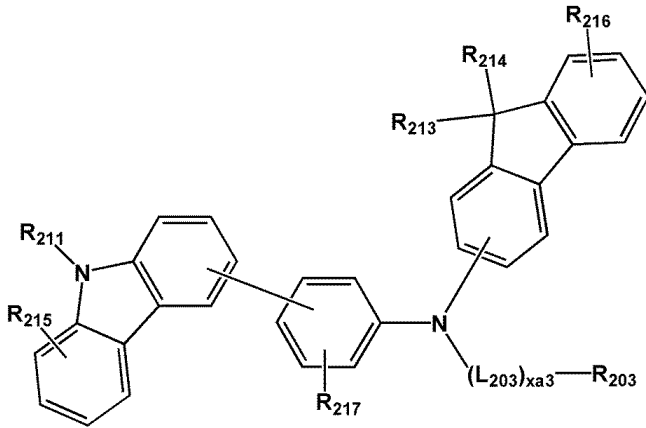
아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 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;

- [0262] 중에서 선택될 수 있고,
- [0263] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0264] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₃ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0265] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및
- [0266] 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;
- [0267] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0268] 또 다른 구현예에 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.
- [0269] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 중 적어도 하나는,
- [0270] 카바졸일기; 및
- [0271] 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;
- [0272] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0273] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:
- [0274] <화학식 201A>



[0276] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

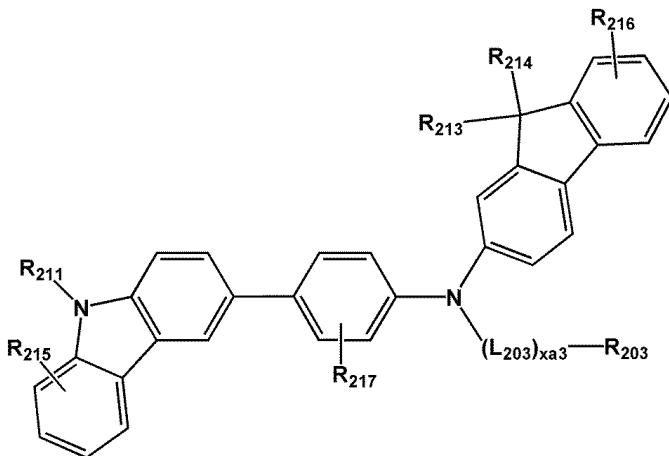
[0277] <화학식 201A(1)>



[0278]

[0279] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

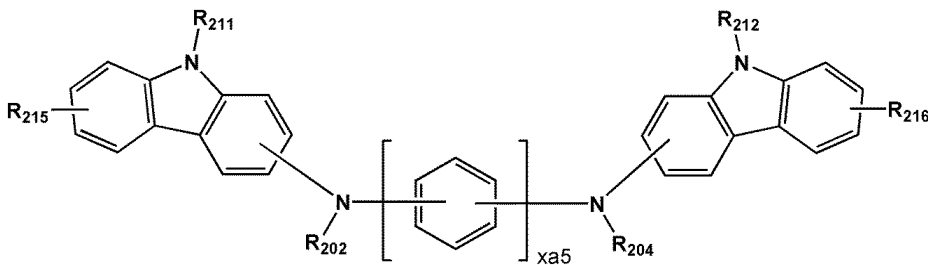
[0280] <화학식 201A-1>



[0281]

[0282] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

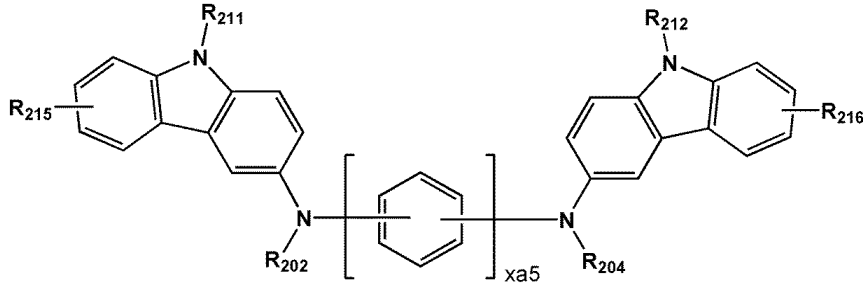
[0283] <화학식 202A>



[0284]

[0285] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0286] <화학식 202A-1>



[0287]

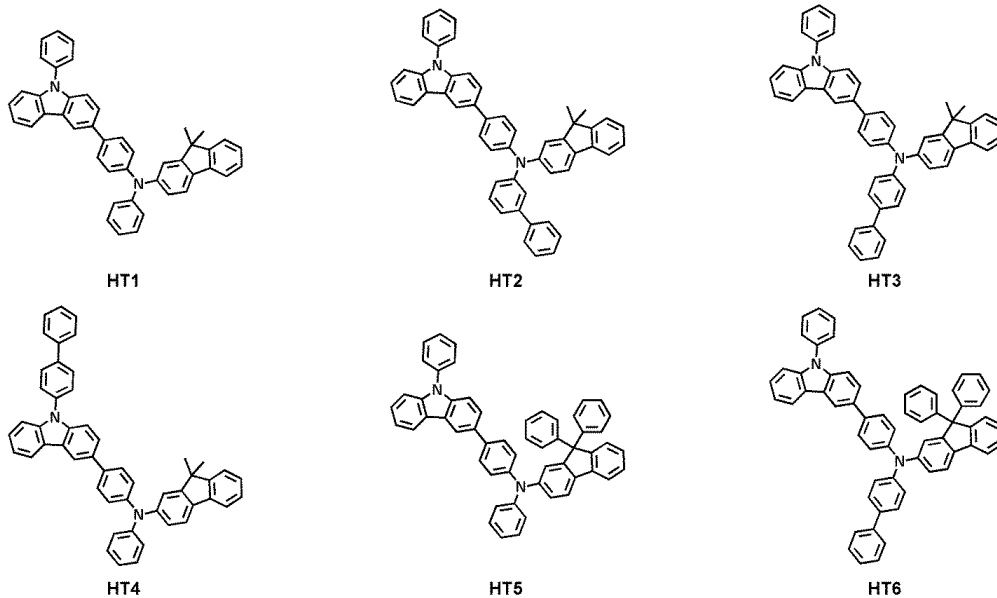
[0288] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

[0289] L₂₀₁ 내지 L₂₀₃, xa1 내지 xa3, xa5 및 R₂₀₂ 내지 R₂₀₄에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

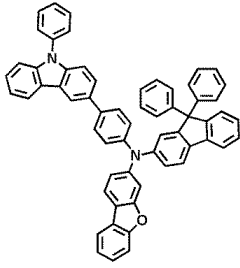
[0290] R₂₁₁ 및 R₂₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀₃에 대한 설명을 참조하고,

[0291] 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, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, कोरो네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

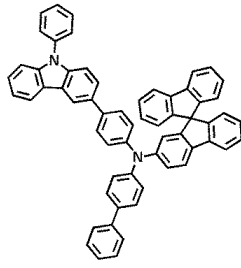
[0292] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



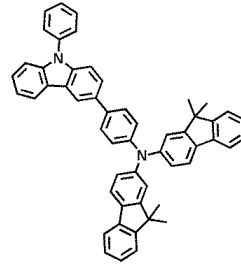
[0293]



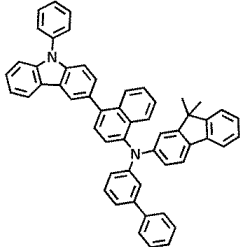
HT7



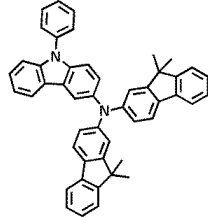
HT8



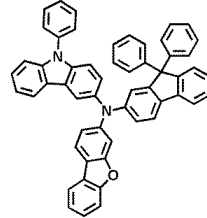
HT9



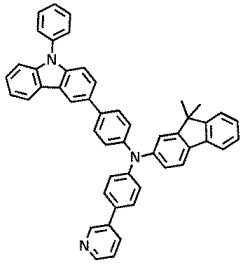
HT10



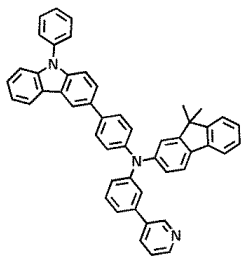
HT11



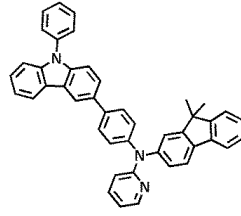
HT12



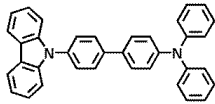
HT13



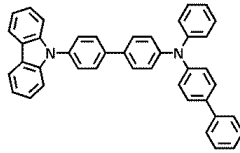
HT14



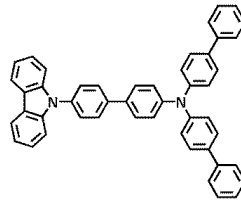
HT15



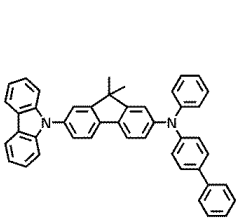
HT16



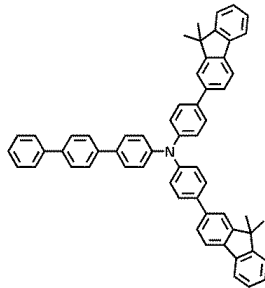
HT17



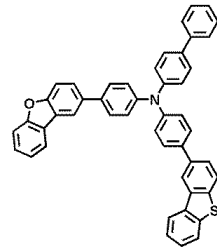
HT18



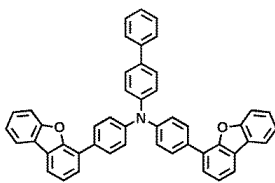
HT19



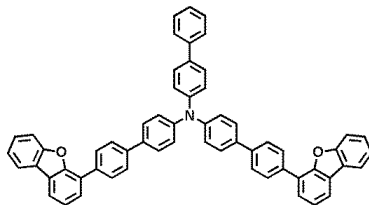
HT20



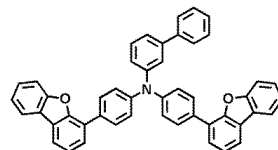
HT21



HT22



HT23

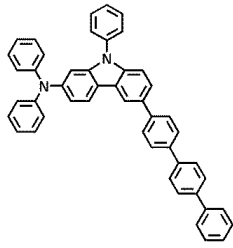


HT24

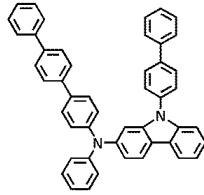
[0294]

[0295]

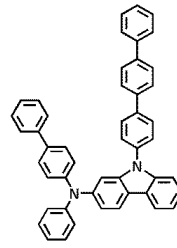
[0296]



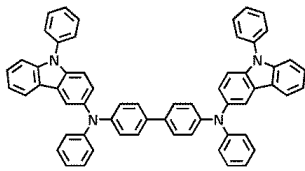
HT25



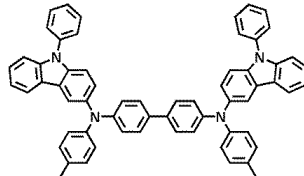
HT26



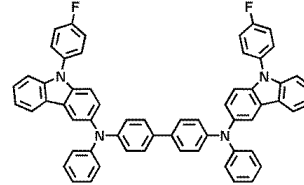
HT27



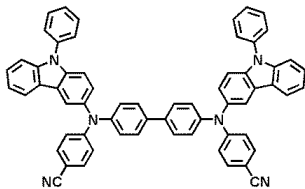
HT28



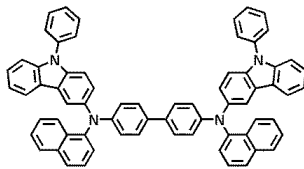
HT29



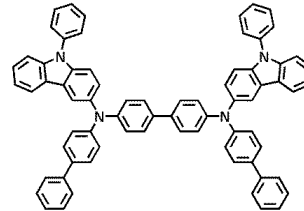
HT30



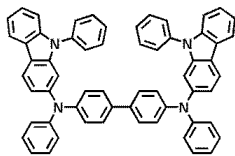
HT31



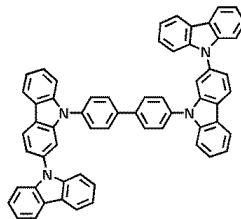
HT32



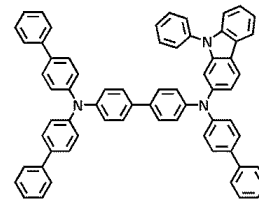
HT33



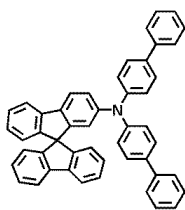
HT34



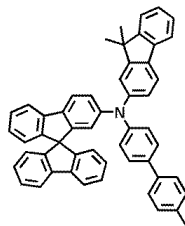
HT35



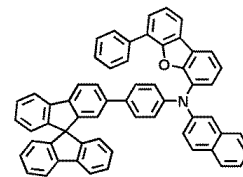
HT36



HT37



HT38



HT39

[0297]

[0298]

[0299]

[0300]

[0301]

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.

[0302] [p-도펀트]

[0303] 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.

[0304] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0305] 일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 이하일 수 있다.

[0306] 상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0307] 예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0308] TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체;

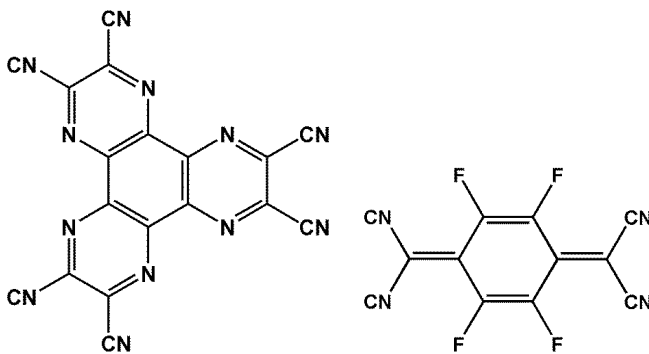
[0309] 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

[0310] HAT-CN (1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및

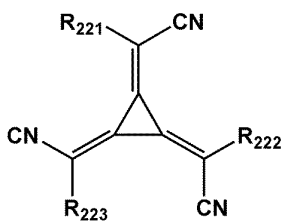
[0311] 하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

[0312] 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0313] <HAT-CN> <F4-TCNQ>



[0314] <화학식 221>



[0315] 상기 화학식 221 중,

[0316] R₂₂₁ 내지 R₂₂₃은 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 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R₂₂₁ 내지 R₂₂₃ 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Cl로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Br로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 및 -I로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0317] [유기층(150) 중 발광층]

[0318] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발

광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.

[0321] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

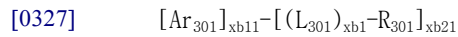
[0322] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0323] 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.

[0324] [발광층 중 호스트]

[0325] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0326] <화학식 301>



[0328] 상기 화학식 301 중,

[0329] Ar_{301} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,

[0330] $xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,

[0331] 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,

[0332] $xb1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0333] R_{301} 은, 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 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$, $-N(Q_{301})(Q_{302})$, $-B(Q_{301})(Q_{302})$, $-C(=O)(Q_{301})$, $-S(=O)_2(Q_{301})$ 및 $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$ 중에서 선택되고,

[0334] $xb21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0335] Q_{301} 내지 Q_{303} 는 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0336] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar_{301} 은,

[0337] 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, 펜타렌 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹; 및

[0338] 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;

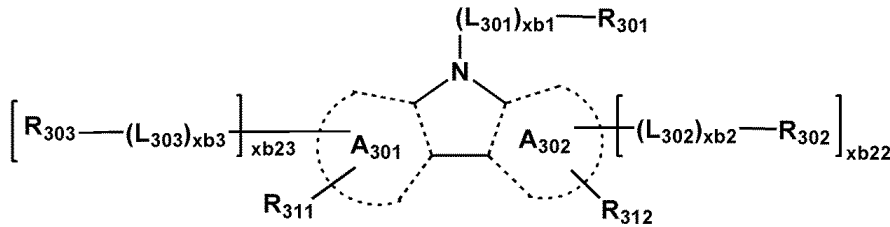
[0339] 중에서 선택되고,

[0340] Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0341] 상기 화학식 301 중 xb1이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₃₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

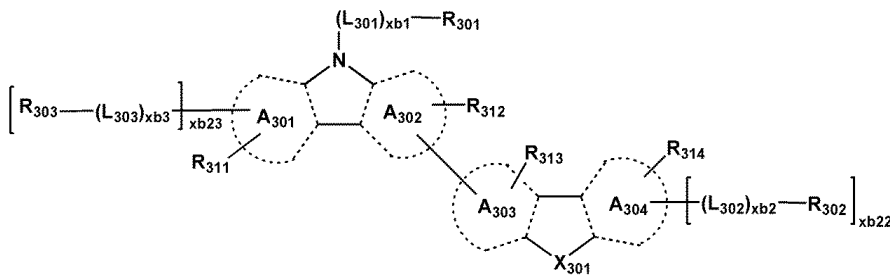
[0342] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0343] <화학식 301-1>



[0344]

[0345] <화학식 301-2>



[0346]

[0347] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0348] A₃₀₁ 내지 A₃₀₄는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 피리딘, 피리미딘, 인덴, 플루오렌, 스파이로-비플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 인돌, 카바졸, 벤조카바졸, 디벤조카바졸, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 나프토피란, 벤조나프토피란, 디나프토피란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 나프토티오펜, 벤조나프토티오펜 및 디나프토티오펜 중에서 선택되고,

[0349] X₃₀₁은 O, S 또는 N-[(L₃₀₄)xb4-R₃₀₄]이고,

[0350] 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,

[0351] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0352] L₃₀₁, xb1, R₃₀₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0353] L₃₀₂ 내지 L₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L₃₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0354] Xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,

- [0355] R₃₀₂ 내지 R₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R₃₀₁에 대한 설명을 참조한다.
- [0356] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L₃₀₁ 내지 L₃₀₄는 서로 독립적으로,
- [0357] 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, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및
- [0358] 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, 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, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -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, 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, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;
- [0359] 중에서 선택되고,
- [0360] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.
- [0361] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R₃₀₁ 내지 R₃₀₄는 서로 독립적으로,
- [0362] 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, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사

졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

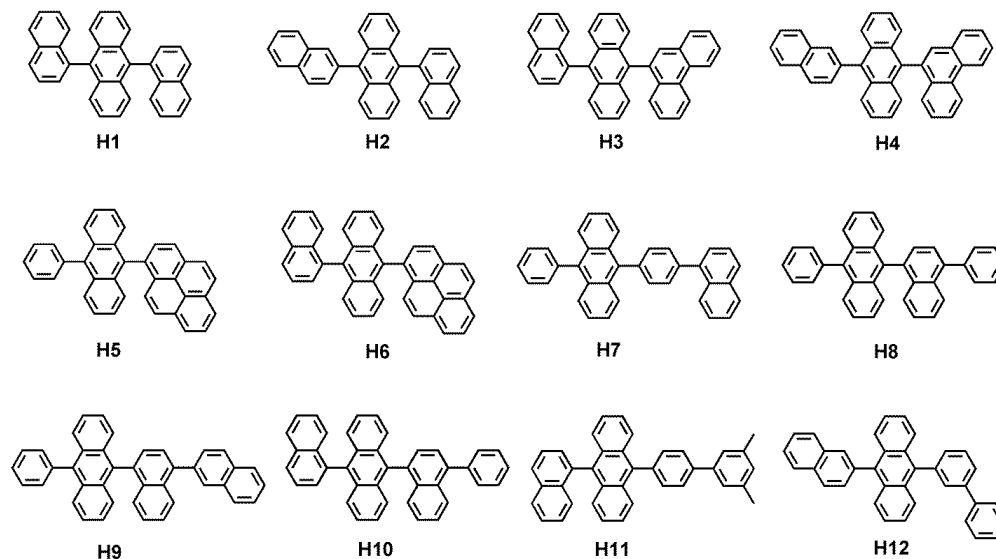
[0363] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 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(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, 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, 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;

[0364] 중에서 선택되고,

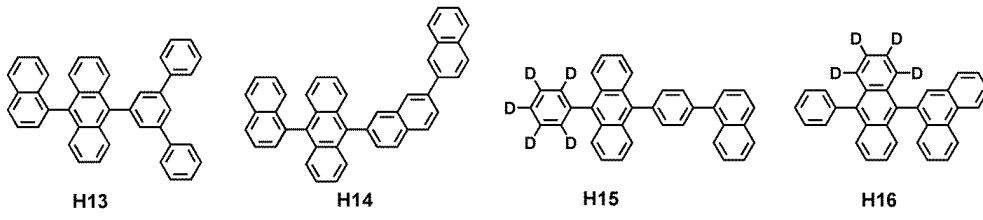
[0365] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0366] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 알칼리토 금속 착체를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 Be 착체 (예를 들면, 하기 화합물 H55), Mg 착체 및 Zn 착체 중에서 선택될 수 있다.

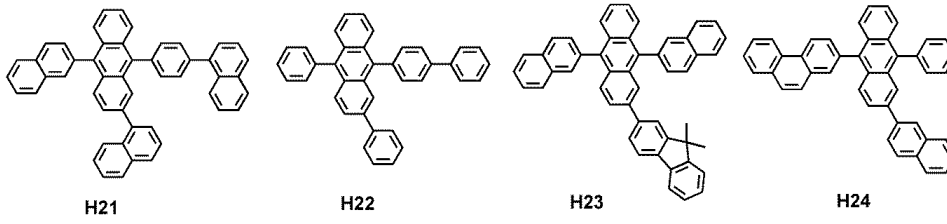
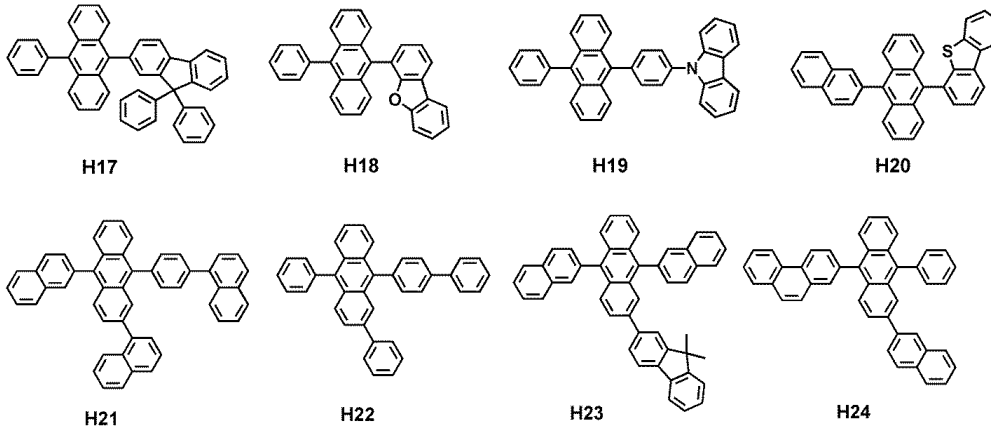
[0367] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



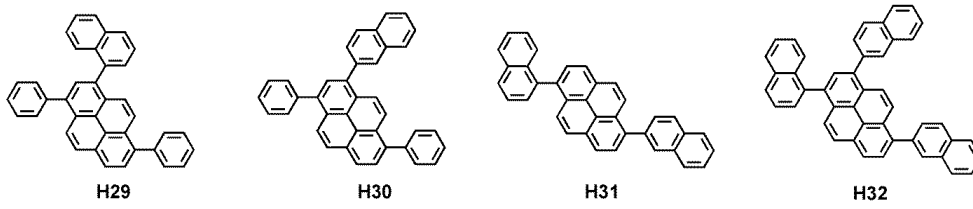
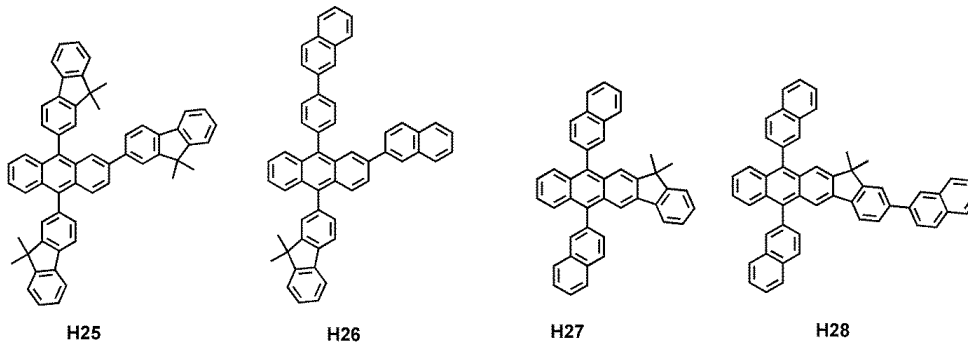
[0368]



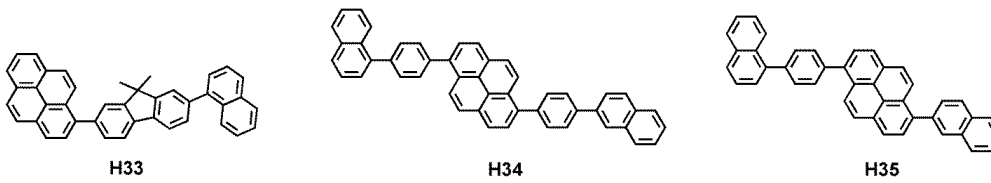
[0369]

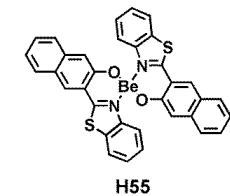
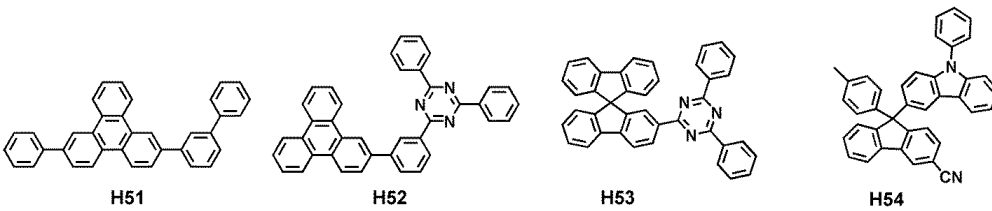
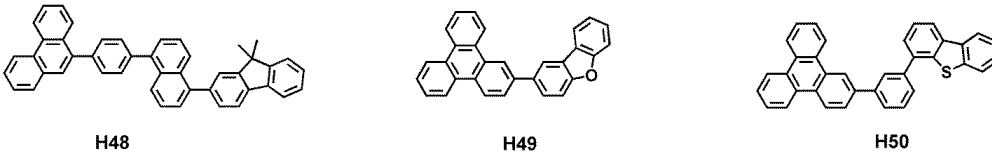
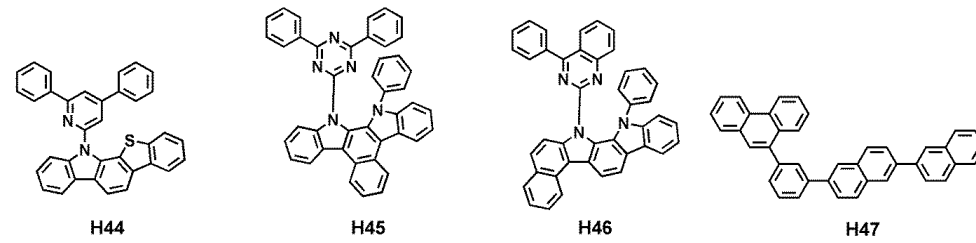
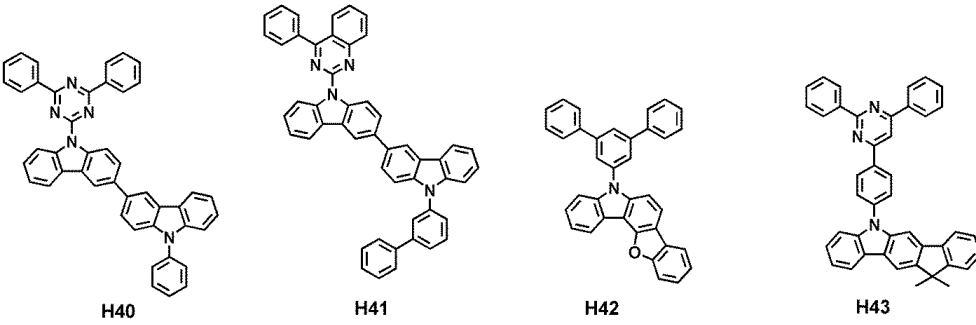
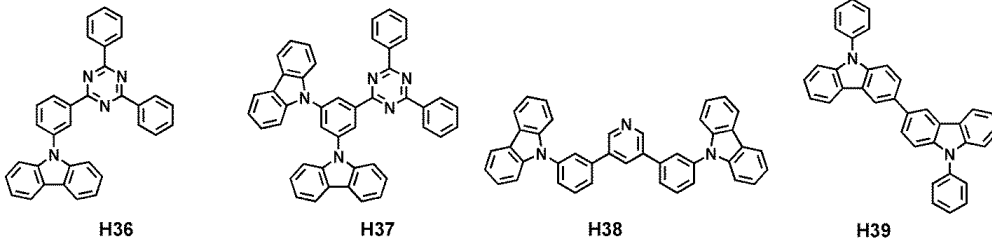


[0370]



[0371]





[0372]

[0373]

[0374]

[0375]

[0376]

[0377]

[0378]

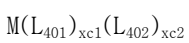
[0379]

[유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]

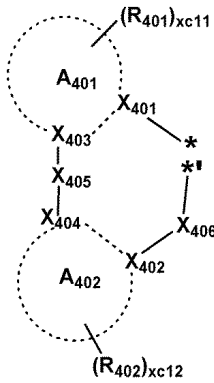
상기 인광 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.

상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 더 포함할 수 있다:

<화학식 401>



[0380] <화학식 402>



[0381]

[0382] 상기 화학식 401 및 402 중,

[0383] M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 로듐(Rh) 및 틀륨(Tm) 중에서 선택되고,

[0384] L₄₀₁은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, xc1은 1, 2 또는 3이고, xc1이 2 이상일 경우 2 이상의 L₄₀₁은 서로 동일하거나 상이하고,

[0385] L₄₀₂는 유기 리간드이고, xc2는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, xc2가 2 이상일 경우 2 이상의 L₄₀₂는 서로 동일하거나 상이하고,

[0386] X₄₀₁ 내지 X₄₀₄는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

[0387] X₄₀₁과 X₄₀₃은 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고, X₄₀₂와 X₄₀₄는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,

[0388] A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0389] X₄₀₅는 단일 결합, *-O-*', *-S-*', *-C(=O)-*', *-N(Q₄₁₁)-*', *-C(Q₄₁₁)(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=*' 또는 *=C=*'이고, 상기 Q₄₁₁ 및 Q₄₁₂는, 수소, 중수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,

[0390] X₄₀₆은 단일 결합, O 또는 S이고,

[0391] R₄₀₁ 및 R₄₀₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알콕시기, 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, -Si(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)(Q₄₀₃), -N(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -B(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -C(=O)(Q₄₀₁), -S(=O)₂(Q₄₀₁) 및 -P(=O)(Q₄₀₁)(Q₄₀₂) 중에서 선택되고, 상기 Q₄₀₁ 내지 Q₄₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기 및 C₁-C₂₀헤테로아릴기 중에서 선택되고,

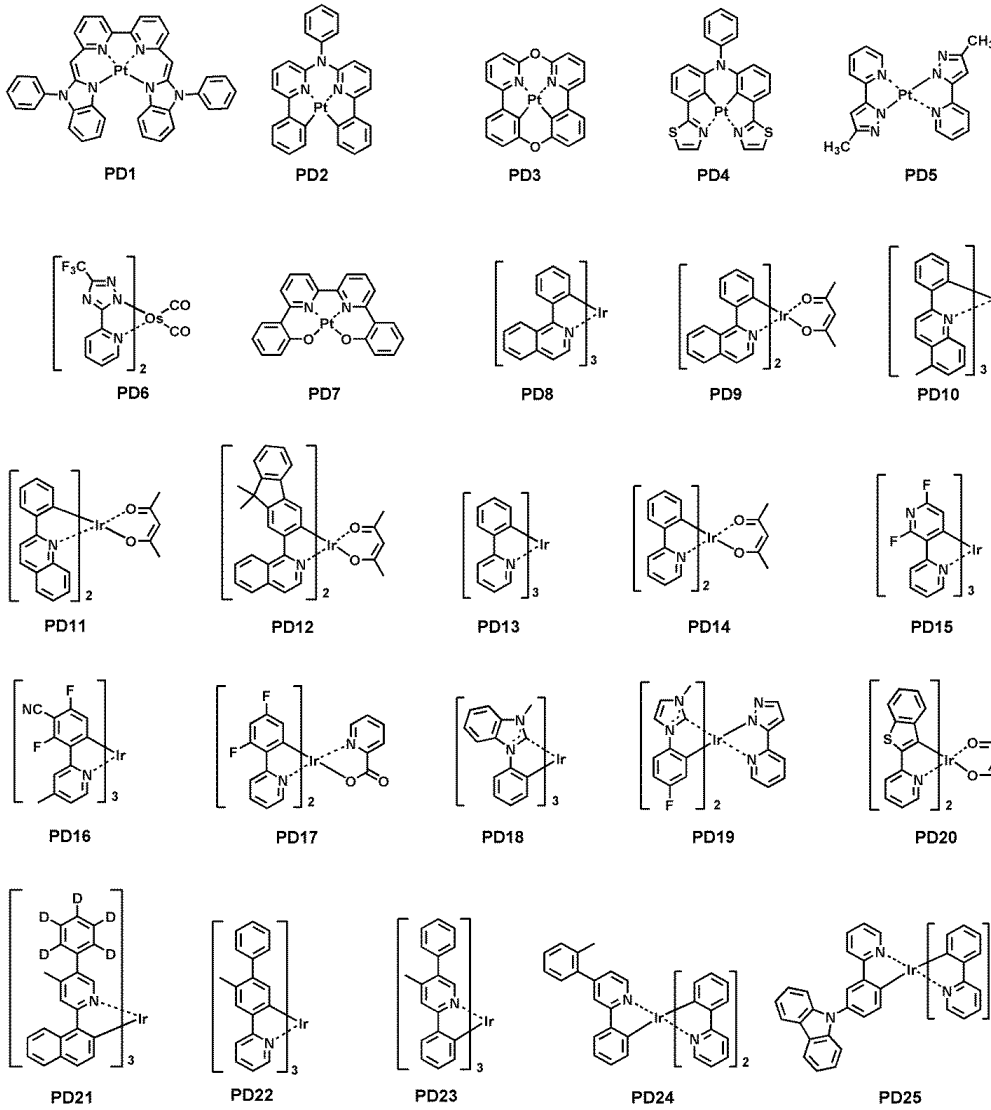
[0392] xc11 및 xc12는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0393] 상기 화학식 402 중 * 및 *'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.

[0394] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 인덴 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란(furan) 그룹, 이미다졸 그룹, 피

라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸(isoxazole) 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 카바졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조퓨란(benzofuran) 그룹, 벤조티오펜 그룹, 이소벤조티오펜 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 디벤조퓨란(dibenzofuran) 그룹 및 디벤조티오펜 그룹 중에서 선택될 수 있다.

- [0395] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 i) X_{401} 은 질소이고, X_{402} 는 탄소이거나, 또는 ii) X_{401} 과 X_{402} 가 모두 질소일 수 있다.
- [0396] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 R_{401} 및 R_{402} 는 서로 독립적으로,
- [0397] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0398] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 페닐기, 나프틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기 및 노르보네닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0399] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기;
- [0400] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기; 및
- [0401] $-Si(Q_{401})(Q_{402})(Q_{403})$, $-N(Q_{401})(Q_{402})$, $-B(Q_{401})(Q_{402})$, $-C(=O)(Q_{401})$, $-S(=O)_2(Q_{401})$ 및 $-P(=O)(Q_{401})(Q_{402})$;
- [0402] 중에서 선택되고,
- [0403] 상기 Q_{401} 내지 Q_{403} 은 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0404] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 401 중 x_{c1} 이 2 이상일 경우, 2 이상의 L_{401} 중 2개의 A_{401} 은 선택적으로 (optionally), 연결기인 X_{407} 을 통하여 서로 연결되거나, 2개의 A_{402} 는 선택적으로, 연결기인 X_{408} 을 통하여 서로 연결될 수 있다 (하기 화합물 PD1 내지 PD4 및 PD7 참조). 상기 X_{407} 및 X_{408} 은 서로 독립적으로, 단일 결합, $*-O-*$, $*-S-*$, $*-C(=O)-*$, $*-N(Q_{413})-*$, $*-C(Q_{413})(Q_{414})-*$ 또는 $*-C(Q_{413})=C(Q_{414})-*$ (여기서, Q_{413} 및 Q_{414} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기임)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0405] 상기 화학식 401 중 L_{402} 는 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기 L_{402} 는 할로겐, 디케톤 (예를 들면, 아세틸아세토네이트), 카르복실산(예를 들면, 피콜리네이트), $-C(=O)$, 이소니트릴, $-CN$ 및 포스포러스 (예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphite)) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0406] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0407]

[0408]

[0409]

[0410]

[0411]

[0412]

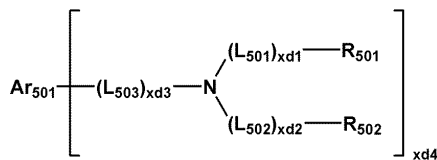
[0413]

[발광층 중 형광 도펀트]

상기 형광 도펀트는 아릴아민 화합물 또는 스티릴아민 화합물을 포함할 수 있다.

상기 형광 도펀트는 하기 화학식 501로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

<화학식 501>



[0414]

[0415]

[0416]

[0417]

[0418]

상기 화학식 501 중,

Ar₅₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로, 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,

xd1 내지 xd3는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

- [0419] R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헥테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헥테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헥테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0420] xd4는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.
- [0421] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar₅₀₁은,
- [0422] 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 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 및 인데노페난트렌 그룹; 및
- [0423] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 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 및 인데노페난트렌 그룹;
- [0424] 중에서 선택될 수 있다.
- [0425] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로,
- [0426] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및
- [0427] 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 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기;
- [0428] 중에서 선택될 수 있다.
- [0429] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로,
- [0430] 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 및 피리디닐기; 및
- [0431] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤

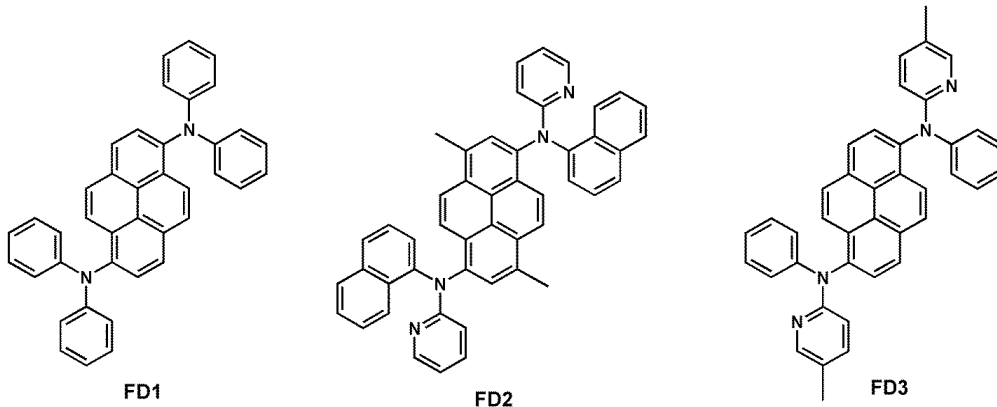
조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기 및 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;

[0432] 중에서 선택되고,

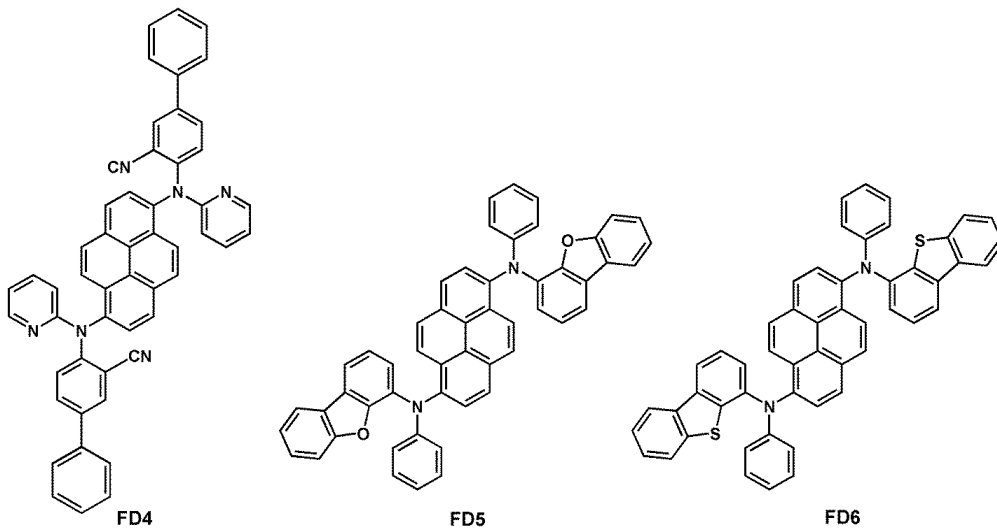
[0433] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0434] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd_4 는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

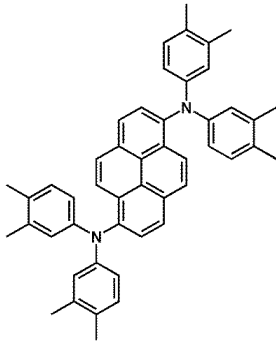
[0435] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:



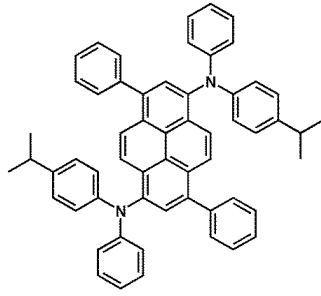
[0436]



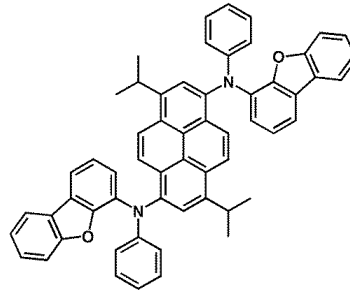
[0437]



FD7

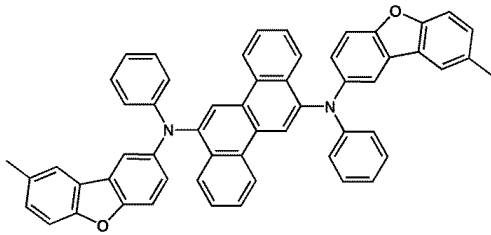


FD8

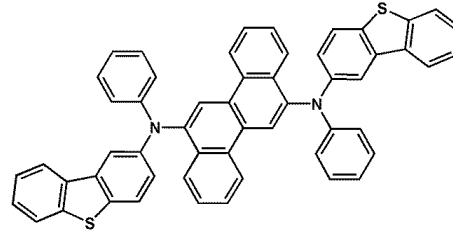


FD9

[0438]

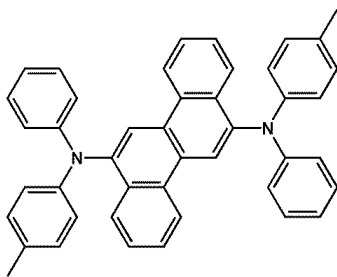


FD10

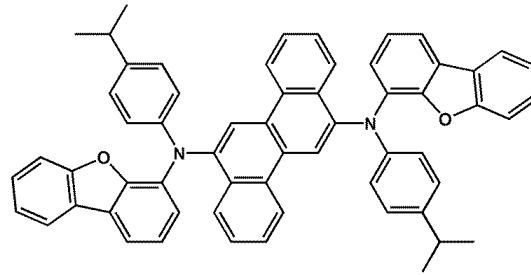


FD11

[0439]

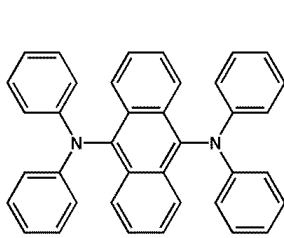


FD12

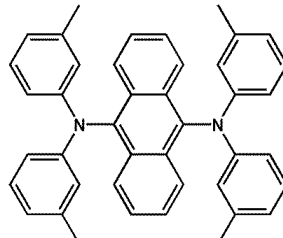


FD13

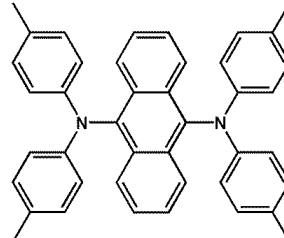
[0440]



FD14

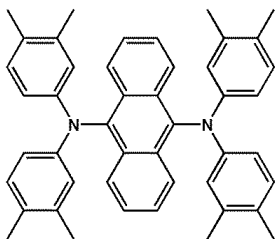


FD15

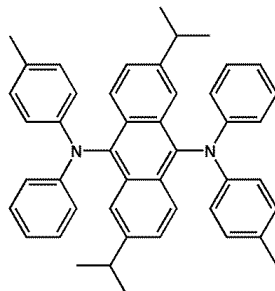


FD16

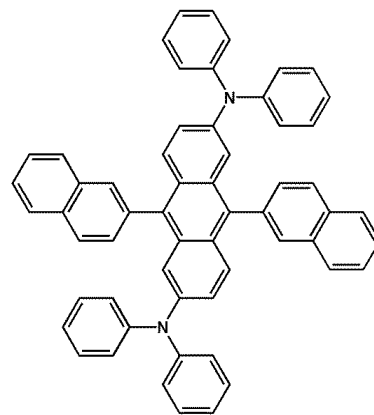
[0441]



FD17

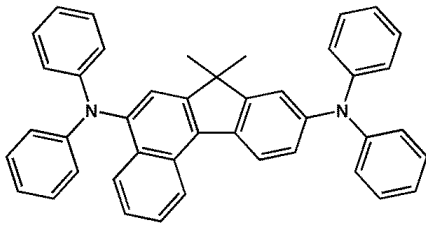


FD18

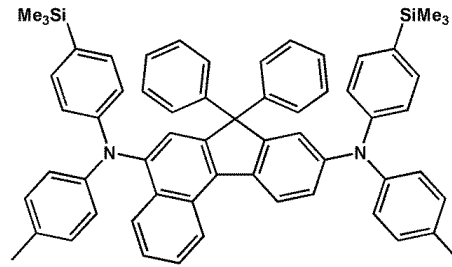


FD19

[0442]

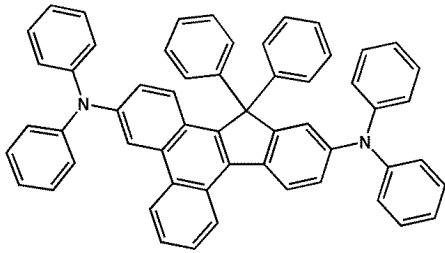


FD20



FD21

[0443]

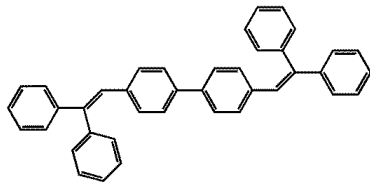


FD22

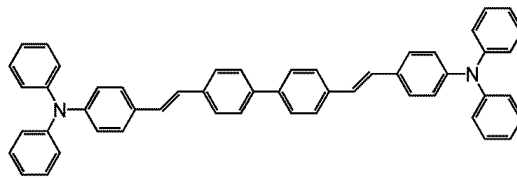
[0444]

[0445]

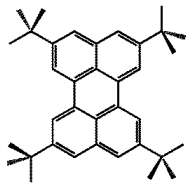
또는, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물들 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



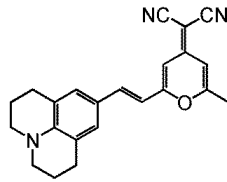
DPVBi



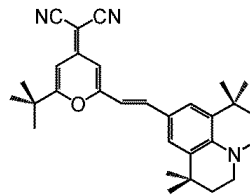
DPAVBi



TBPc

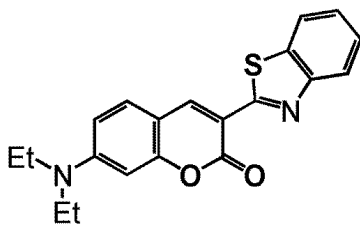


DCM

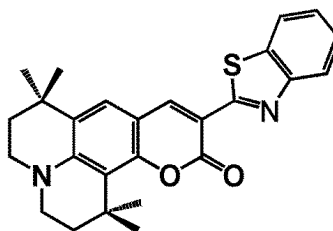


DCJTb

[0446]



Coumarin 6



C545T

[0447]

[0448]

[유기층(150) 중 전자 수송 영역]

[0449]

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.

[0450]

상기 전자 수송 영역은, 버퍼층, 정공 지지층, 전자 조절층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0451]

예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적층된 전자 수송층/전자 주입층, 정공 지지층/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.

- [0452] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은, π 전자 결핍성 함질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0453] 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 의미한다.
- [0454] 예를 들어, 상기 " π 전자 결핍성 함질소 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.
- [0455] 상기 π 전자 결핍성 함질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 인다졸, 푸린(purine), 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴놀살린, 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.
- [0456] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0457] <화학식 601>
- [0458] $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$
- [0459] 상기 화학식 601 중,
- [0460] Ar₆₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0461] xe11은 1, 2 또는 3이고,
- [0462] 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,
- [0463] xe1은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0464] 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 그룹, -Si(Q₆₀₁)(Q₆₀₂)(Q₆₀₃), -C(=O)(Q₆₀₁), -S(=O)₂(Q₆₀₁) 및 -P(=O)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂) 중에서 선택되고,
- [0465] 상기 Q₆₀₁ 내지 Q₆₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0466] xe21은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0467] 일 구현예에 따르면, 상기 xe11개의 Ar₆₀₁ 및 xe21개의 R₆₀₁ 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 함질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0468] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar₆₀₁은,
- [0469] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스퀴이로-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

[0470] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스피이로-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;

[0471] 중에서 선택될 수 있고,

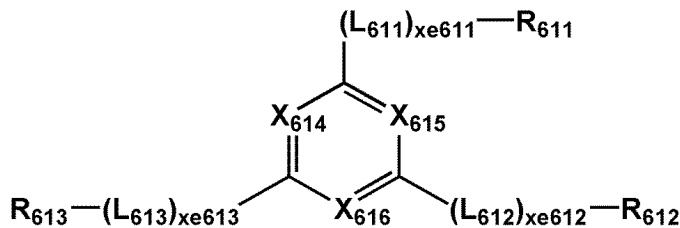
[0472] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0473] 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0474] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0475] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

[0476] <화학식 601-1>



[0477]

[0478] 상기 화학식 601-1 중,

[0479] X₆₁₄는 N 또는 C(R₆₁₄)이고, X₆₁₅는 N 또는 C(R₆₁₅)이고, X₆₁₆은 N 또는 C(R₆₁₆)이고, X₆₁₄ 내지 X₆₁₆ 중 적어도 하나는 N이고,

[0480] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0481] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0482] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0483] R₆₁₄ 내지 R₆₁₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

- [0484] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L_{601} 및 L_{611} 내지 L_{613} 은 서로 독립적으로,
- [0485] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아IRO-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 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
- [0486] 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, 스퀘아IRO-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, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아IRO-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 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;
- [0487] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0488] 다른 구현예에 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.
- [0489] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R_{601} 및 R_{611} 내지 R_{613} 은 서로 독립적으로,
- [0490] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아IRO-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, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

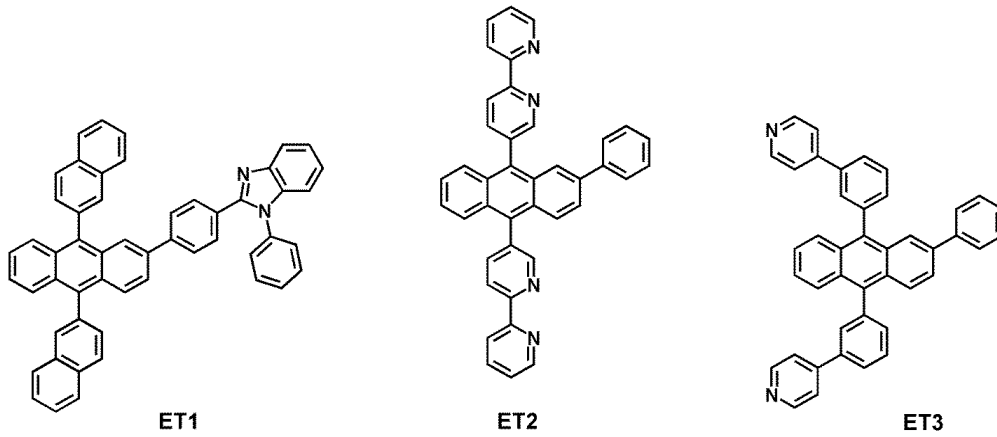
[0491] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 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, 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, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0492] -S(=O)₂(Q₆₀₁) 및 -P(=O)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂);

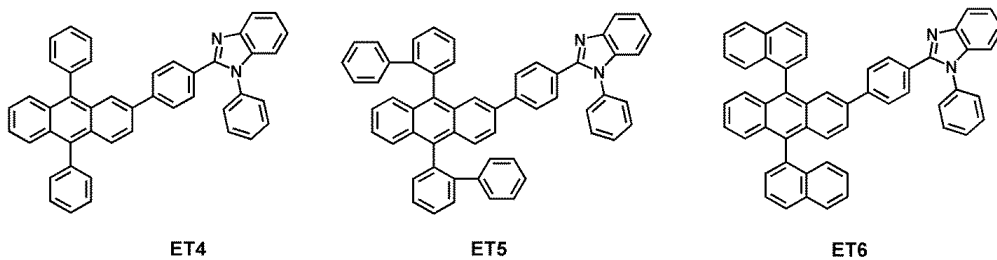
[0493] 중에서 선택되고,

[0494] 상기 Q₆₀₁ 및 Q₆₀₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

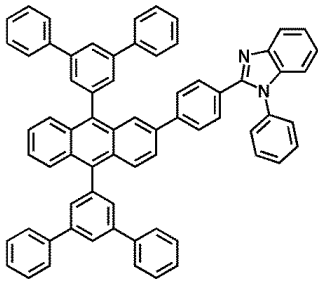
[0495] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



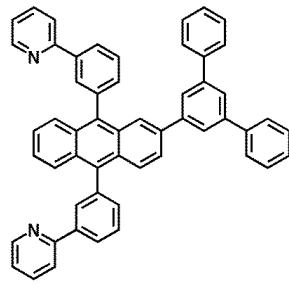
[0496]



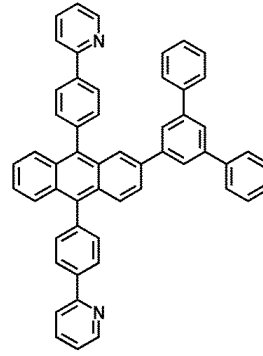
[0497]



ET7

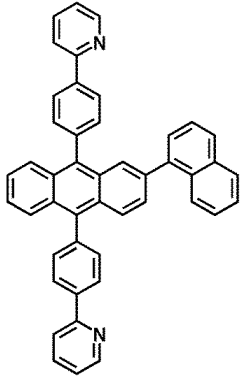


ET8

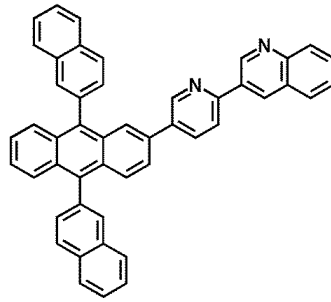


ET9

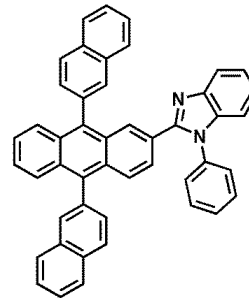
[0498]



ET10

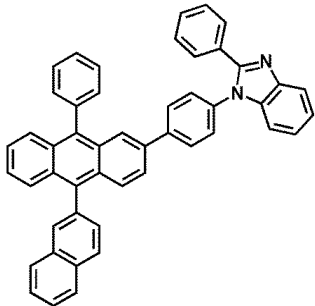


ET11

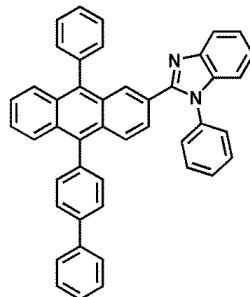


ET12

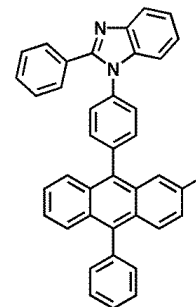
[0499]



ET13

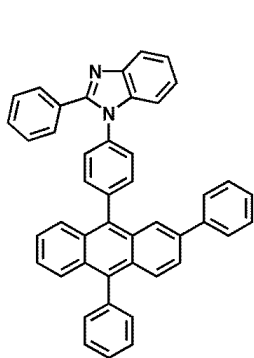


ET14

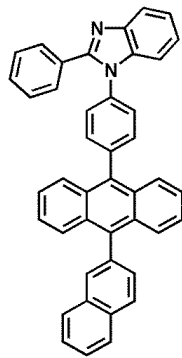


ET15

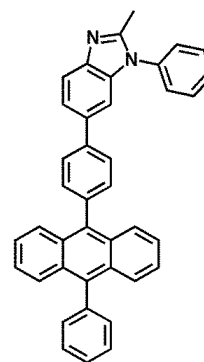
[0500]



ET16

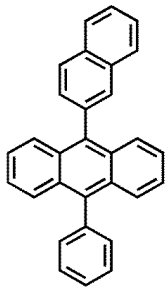


ET17

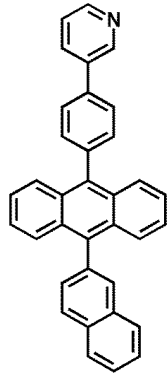


ET18

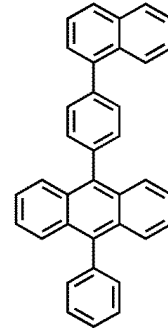
[0501]



ET19

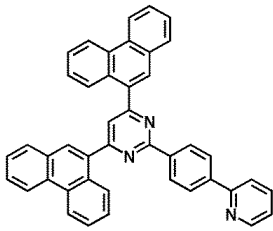


ET20

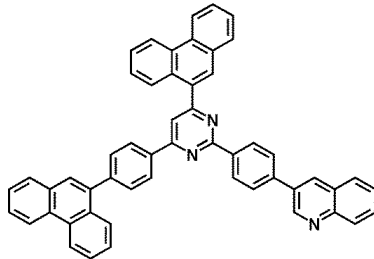


ET21

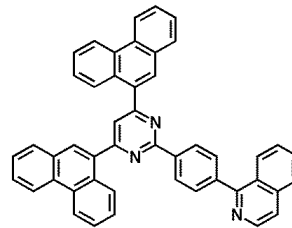
[0502]



ET22

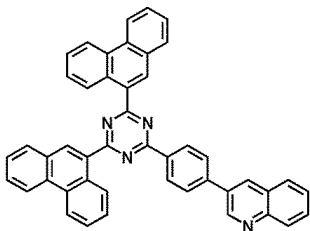


ET23

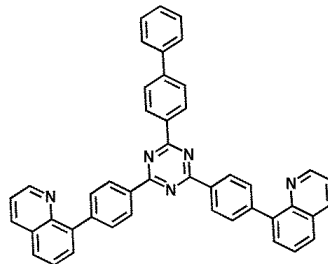


ET24

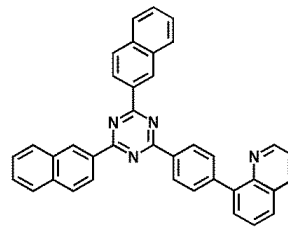
[0503]



ET25

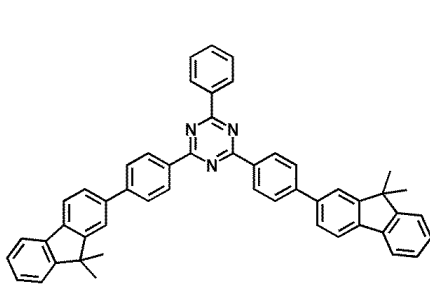


ET26

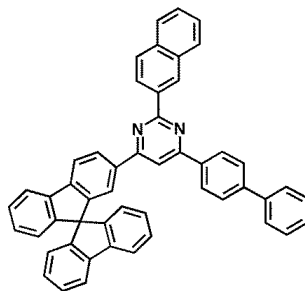


ET27

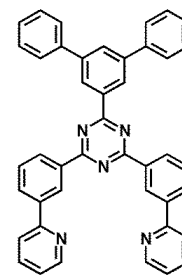
[0504]



ET28

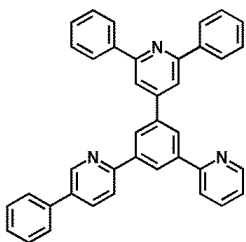


ET29

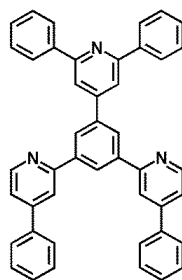


ET30

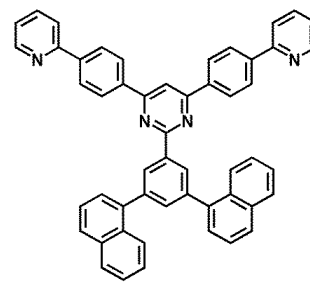
[0505]



ET31

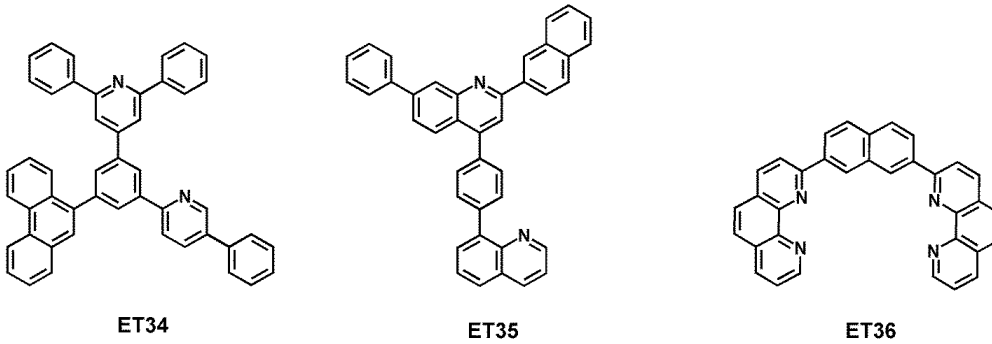


ET32



ET33

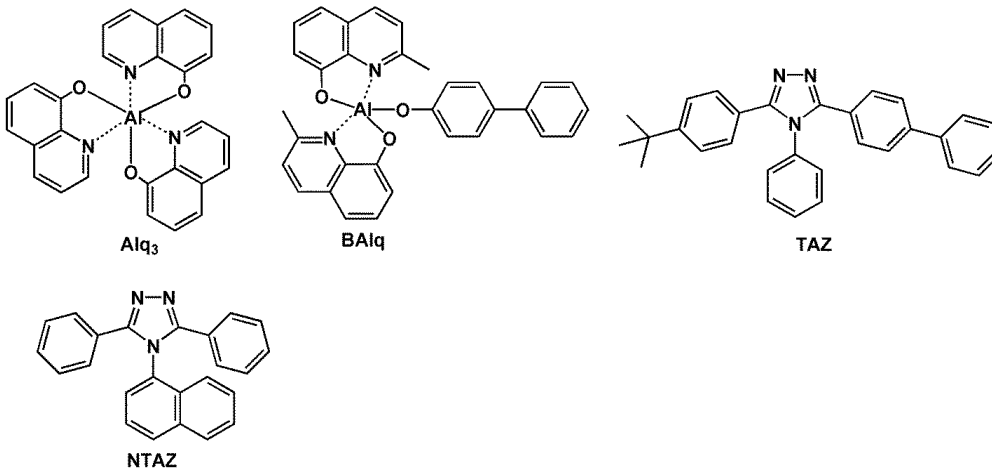
[0506]



[0507]

[0508]

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) 및 NTAZ 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다.



[0509]

[0510]

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.

[0511]

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.

[0512]

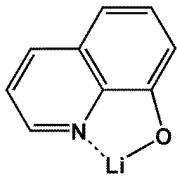
상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0513]

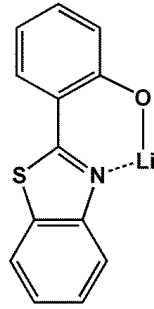
상기 금속-함유 물질은 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체의 금속 이온은, Li 이온, Na 이온, K 이온, Rb 이온 및 Cs 이온 중에서 선택될 수 있고, 상기 알칼리 토금속 착체의 금속 이온은 Be 이온, Mg 이온, Ca 이온, Sr 이온 및 Ba 이온 중에서 선택될 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘,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

[0514]

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.



ET-D1



ET-D2

[0515]

[0516]

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.

[0517]

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.

[0518]

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.

[0519]

상기 알칼리 금속은, Li, Na, K, Rb 및 Cs 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li, Na 또는 Cs일 수 있다. 다른 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li 또는 Cs일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0520]

상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.

[0521]

상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.

[0522]

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.

[0523]

상기 알칼리 금속 화합물은, Li_2O , Cs_2O , K_2O 등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속 화합물은, LiF, Li_2O , NaF, LiI, NaI, CsI, KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0524]

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 구현예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0525]

상기 희토류 금속 화합물은, YbF_3 , ScF_3 , ScO_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , 및 TbF_3 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은 YbF_3 , ScF_3 , TbF_3 , YbI_3 , ScI_3 , TbI_3 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0526]

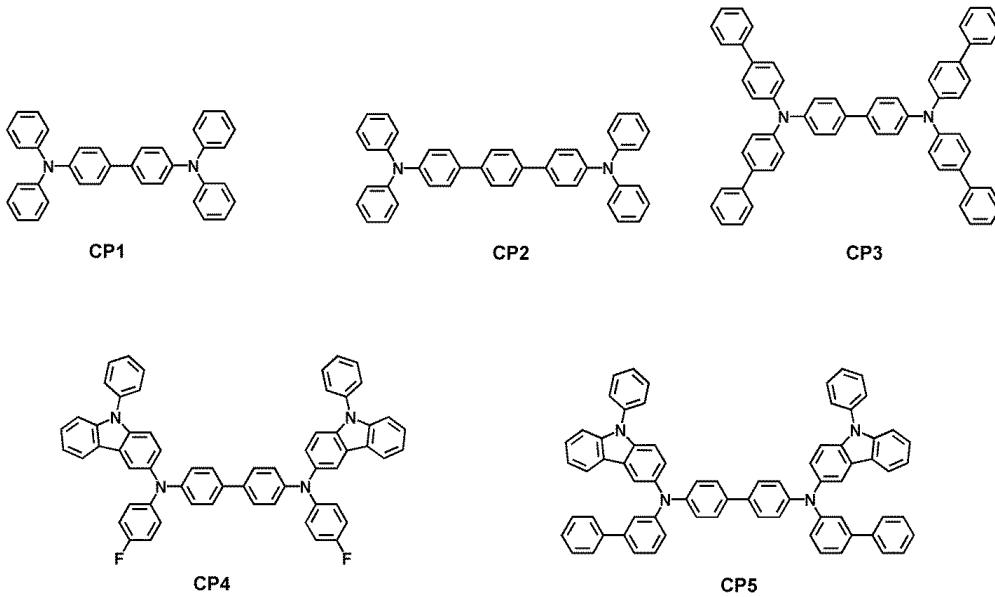
상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트린, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0527]

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.

- [0528] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 적절한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0529] [제2전극(190)]
- [0530] 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.
- [0531] 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.
- [0532] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0533] [도 2 내지 4에 대한 설명]
- [0534] 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.
- [0535] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.
- [0536] 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.
- [0537] 상기 제1캐핑층(210) 및 제2캐핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.
- [0538] 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.
- [0539] 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.
- [0540] 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.
- [0541] 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.



[0542]

[0544]

[0545]

[0546]

[0547]

[0548]

[0549]

[0550]

[0551]

[0552]

[0553]

이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1 내지 4를 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

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.

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°C의 증착 온도, 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

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°C 내지 200°C의 열처리 온도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.

[치환기의 일반적인 정의]

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.

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.

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.

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.

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.

[0554] 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(tetrahydrofuranly), 테트라히드로티오펜기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0555] 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.

[0556] 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.

[0557] 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, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

[0558] 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.

[0559] 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.

[0560] 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.

[0561] 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.

[0562] 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.

[0563] 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.

[0564] 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-C₆₀알키닐기, 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 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0565] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0566] 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, 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;

[0567] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0568] 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, 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, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0569] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0570] 중에서 선택되고,

[0571] 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, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,

비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0572] 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.

[0573] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

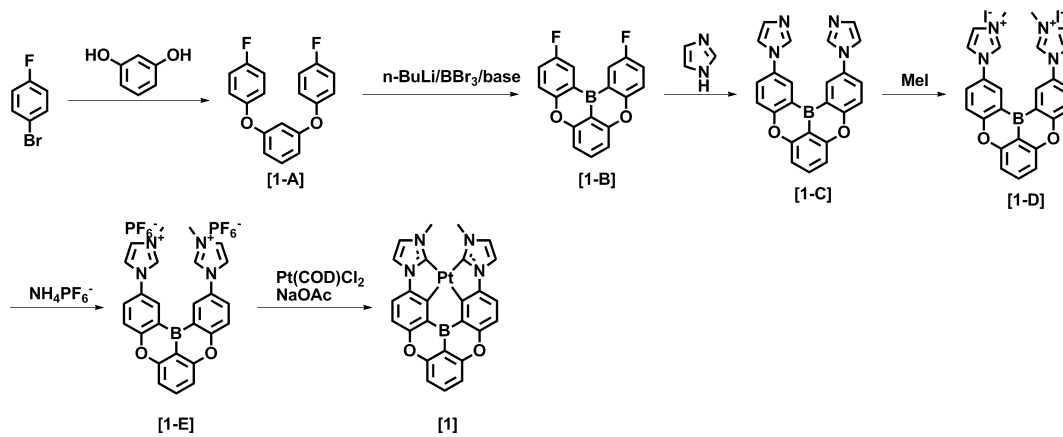
[0574] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0575] 본 명세서 중 *, *' 및 *''은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0576] 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.

[0577] [합성에]

[0578] **합성에 1: 화합물 1의 합성**



[0579]

[0580] (1) 중간체 [1-A] 의 합성

[0581] 1-브로모-4-플루오로벤젠 10.0 g(57.14 mmol), 레소시놀 5.04 g(57.14 mmol), 포타슘 터셔리부톡사이드 15.4 g(171.43 mmol) 및 요오드구리 1.00 g을 디메틸포름아미드 용매 200 ml로 현탁하고 140℃로 승온하여 48시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 염화메틸렌과 증류수로 추출하였다. 유기층을 증류수로 3회 세척하고 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하여 감압 농축하였다. 농축액을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적화합물 중간체 [1-A] 5.96 g(수율 35%)을 수득하였다.

[0582] (2) 중간체 [1-B] 의 합성

[0583] 상기와 같이 합성한 중간체 [1-A] 5.80 g(19.4 mmol)을 오르쏘자일렌 40ml 에 용해시켜 -78℃에서 노말 부틸리튬(1.05 eq)의 헥산 용액에 적가하고 승온하여 70℃에서 4시간 동안 교반하였다. 이어서, -40℃로 냉각한 반응 혼합물에 보론 트리브로마이드(1.2 eq)를 적가하고 상온에서 1시간, 40℃에서 1시간 동안 각각 교반하였다. 감압농축하여 용매를 제거하고 N,N-디이소프로필에틸아민(2.0 eq)을 가해 120℃에서 5시간 교반하였다. 반응 혼합물을 필터하고 메탄올로 세척하여 목적화합물 중간체 [1-B] 4.76 g(수율 42%)을 수득하였다.

[0584] (3) 중간체 [1-C] 의 합성

[0585] 상기와 같이 합성한 중간체 [1-B] 4.50 g(15.09 mmol), 이미다졸 2.06 g(30.18 mmol) 및 포타슘카보네이트 4.17 g(30.18 mmol)을 디메틸포름아미드에 용해시키고 150℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 냉각하고 감압 농축하였다. 농축액을 컬럼크로마토그래피로 정제(전개액은 에틸아세테이트 : 노말헥산 = 5 : 1 ~ 2 : 1)하여 목적화합물 중간체 [1-C] 4.86 g(수율 80 %)을 수득하였다.

[0586] (4) 중간체 [1-D] 의 합성

[0587] 상기 중간체 [1-C](1.0 eq)를 아세톤에 용해시킨 후 Iodomethane(2.2 eq)를 가하고 상온에서 3일 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 감압하여 농축한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 중간체 [1-D](수율 91%)를 수득하였다.

[0588] (5) 중간체 [1-E]의 합성

[0589] 상기 중간체 [1-D](1.0 eq)를 메탄올과 물을 4:1로 혼합한 용매에 용해시킨 후 암모늄 헥사플로로포스페이트(2.0 eq)를 가하고 상온에서 1일 동안 교반하였다. 생성된 고체를 필터하고 디에틸에테르로 세척하여 화합물 [1-E](수율 95%)를 수득하였다.

[0590] (6) 화합물 1의 합성

[0591] 상기와 같이 합성한 중간체 [1-E](1.0 eq)과 potassium tetrachloroplatinate (K₂PtCl₄)(1.1 eq) 및 tetrabutylammonium bromide(0.1 eq)를 acetic acid(0.1M)에 용해시킨 후, 120℃에서 72시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, dichloromethane과 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 magnesium sulfate로 건조시킨 후, 농축하여 컬럼 크로마토그래피를 이용해 화합물 1(수율 22%)을 수득하였다.

[0592] **합성예 2: 화합물 2의 합성**

[0593] 상기 중간체 [1-C]의 합성에서 이미다졸 대신 피라졸을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

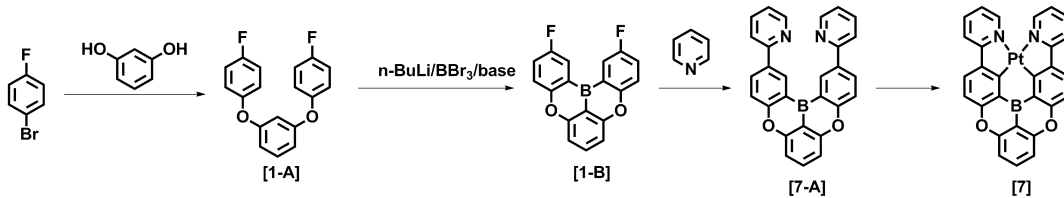
[0594] **합성예 3: 화합물 4의 합성**

[0595] 상기 중간체 [1-D]의 합성에서 Iodomethane을 사용하는 대신 디페닐아이오도늄 테트라플루오로보로네이트를 사용하여 반응을 수행한 것을 제외하고는 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

[0596] **합성예 4: 화합물 5의 합성**

[0597] 상기 중간체 [1-C]의 합성에서 이미다졸을 2당량 사용하는 대신, 1당량의 3,5-디메틸피라졸을 먼저 사용하고 이어서 1당량의 이미다졸을 사용하는 2단계의 반응을 거쳐 중간체를 얻은 것을 제외하고는 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

[0598] **합성예 5: 화합물 7의 합성**



[0599]

[0600] (1) 중간체 [7-A]의 합성

[0601] 상기 중간체 [1-C]의 합성에서 이미다졸 대신 피리딘을 사용하는 금속촉매 반응을 수행하는 것을 제외하고는 중간체 [1-C]의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 [7-A]를 수득하였다.

[0602] (2) 화합물 7의 합성

[0603] 상기 화합물 1의 합성에서 중간체 [1-E] 대신 중간체 [7-A]를 사용하는 것을 제외하고 상기 화합물 1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

[0604] **합성예 6: 화합물 8의 합성**

[0605] 상기 중간체 [1-C]의 합성에서 1당량의 피리딘을 사용하는 금속촉매 반응을 수행한 후, 이어서 1당량의 이미다졸을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

[0606] **합성예 7: 화합물 10의 합성**

[0607] 상기 중간체 [1-C]의 합성에서 이미다졸 대신 트리아졸을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성예 6과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

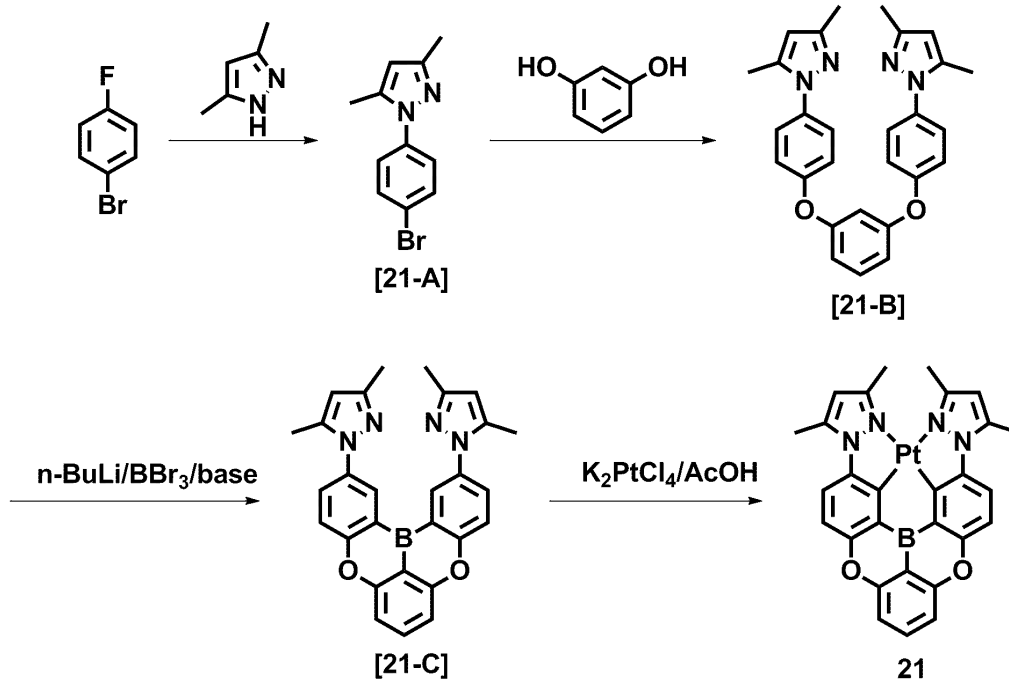
[0608] **합성예 8: 화합물 11의 합성**

[0609] 피리딘 대신 4-터셔리부틸피리딘을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 6과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

[0610] **합성예 9: 화합물 19의 합성**

[0611] 상기 중간체 [1-C]의 합성에서 이미다졸 대신 벤즈이미다졸을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

[0612] **합성예 10: 화합물 21의 합성**



[0613]

[0614] (1) 중간체 [21-A] 의 합성

[0615] 1-브로모-4-플루오로벤젠 10.0 g(57.14 mmol), 3,5-디메틸피라졸 6.04 g(62.85 mmol) 및 포타슘카보네이트 8.68 g(62.85 mmol)을 디메틸포름아미드에 용해시키고 150℃에서 12시간 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 냉각하고 감압 농축하였다. 농축액을 컬럼크로마토그래피로 정제(전개액은 에틸아세테이트 : 노말헥산 = 10 : 1 ~ 5 : 1)하여 목적화합물 중간체 [21-A] 11.50 g(수율 80 %)을 수득하였다.

[0616] (2) 중간체 [21-B] 의 합성

[0617] 상기와 같이 합성한 중간체 [21-A] 11.50 g(45.80 mmol), 레소니놀 5.04 g (45.80 mmol), 포타슘 터셔리부톡사이드 10.27 g(91.60 mmol) 및 요오드구리 0.87 g을 디메틸포름아미드 용매 200 ml로 현탁하고 140℃로 승온하여 48시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 염화메틸렌과 증류수로 추출하였다. 유기층을 증류수로 3회 세척하고 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하여 감압 농축하였다. 농축액을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적화합물 중간체 [21-B] 11.14 g(54%)을 수득하였다.

[0618] (3) 중간체 [21-C] 의 합성

[0619] 상기와 같이 합성한 중간체 [21-B] 11.14 g(24.73 mmol)을 오르쏘자일렌 40ml 에 용해시켜 -78℃에서 노말 부틸 리튬(1.05 eq)의 헥산 용액에 적가하고 승온하여 70℃에서 4시간 동안 교반하였다. 이어서 -40℃로 냉각한 반응 혼합물에 보론 트리브로마이드(1.2 eq)를 적가하고 상온에서 1시간, 40℃에서 1시간 동안 각각 교반하였다. 감압농축하여 용매를 제거하고 N,N-디이소프로필에틸아민(2.0 eq)을 가해 120℃에서 5시간 교반하였다. 반응 혼합물을 필터하고 메탄올로 세척하여 목적화합물 중간체 [21-C] 4.76 g(42%)을 수득하였다.

[0620] (4) 화합물 21의 합성

[0621] 상기와 같이 합성한 중간체 [1-C](1.0 eq)과 potassium tetrachloroplatinate (K_2PtCl_4)(1.1 eq) 및 tetrabutylammonium bromide(0.1 eq)를 acetic acid(0.1M)에 용해시킨 후, 120℃에서 72시간 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, dichloromethane과 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득하였다. 상기 수득한

유기층을 magnesium sulfate로 건조시킨 후, 농축하여 컬럼 크로마토그래피를 이용해 화합물 21 1.35g(수율 20%)를 수득하였다.

[0622] 상기 합성에 1 내지 10에서 합성된 화합물들의 ¹H NMR 및 HR-EIMS 을 하기 표 1에 나타내었다.

[0623] 표 1에 나타난 화합물 이외의 다른 화합물들도 위의 합성 경로 및 원료 물질을 참조하여 기술 분야에 숙련된 이들이 그 합성 방법을 용이하게 인식할 수 있다.

표 1

화합물	¹ H NMR (CDCl ₃ , 500 MHz)	HR-EIMS	
		found	calc.
1	δ 7.57(d, 2H), 7.45(d, 2H), 7.27 ~ 7.31(m, 3H), 7.02(d, 2H), 6.72(m, 2H), 3.68(s, 3H)	623.1055	623.1125
2	δ 8.47(d, 2H), 8.32(d, 2H), 7.57(d, 2H), 7.31(m, 1H), 7.01(d, 2H), 6.89(2d, H), 6.72(m, 2H)	595.2855	595.2855
4	δ 7.70 ~ 7.74 (m, 4H), 7.57(d, 2H), 7.43 ~ 7.48(m, 6H), 7.31 ~ 7.38 (m, 5H), 7.02 ~ 7.10(m, 2H), 6.72(d, 2H)	747.1425	747.1428
5	δ 7.57(d, 2H), 7.45(d, 2H), 7.28 ~ 7.33(m, 2H), 6.95(d, 2H), 6.72(m, 2H), 3.72(s, 3H), 2.89(s, 3H), 2.77(s, 3H)	637.1225	637.1246
7	δ 8.48 ~ 8.56(m, 2H), 8.09 ~ 8.12(m, 2H), 7.82(d, 2H), 7.26 ~ 7.39(m, 3H), 7.15 ~ 7.19(d, 2H), 6.95(t, 2H), 6.70 ~ 6.74(m, 2H)	617.0937	617.0956
8	δ 8.48 ~ 8.55(m, 1H), 8.12(d, 2H), 7.80 ~ 7.83(m, 1H), 7.57(m, 2H), 7.25 ~ 7.44(m, 4H), 7.10 ~ 7.19(m, 2H), 6.98 ~ 7.01(m, 2H), 6.95(d, 2H), 3.75(s, 3H)	622.1154	622.1182
10	δ 8.98(s, 1H), 8.55(d, 1H), 8.10 ~ 8.13(d, 1H), 7.82(, 2H), 7.57(d, 2H), 7.28 ~ 7.33(m, 2H), 7.12 ~ 7.18(m, 1H), 6.98 ~ 7.00(m, 2H), 6.72(m, 2H), 3.64(s, 3H)	623.1344	623.1326
11	δ 8.45(m, 1H), 8.09 ~ 8.13(m, 2H), 7.84(s, 1H), 7.54 ~ 7.57(m, 1H), 7.40 ~ 7.44(m, 1H), 7.25 ~ 7.30(m, 2H), 6.98 ~ 7.02(m, 2H), 6.68 ~ 6.72(m, 2H) 3.68(s, 3H), 1.34(s, 9H)	676.1628	676.1625
19	δ 8.54 ~ 8.57(m, 2H), 7.55 ~ 7.64(m, 4H), 7.25 ~ 7.34(m, 3H), 6.85(d, 2H), 6.70 ~ 6.73(m, 4H), 3.47(s, 6H)	723.2488	723.2425
21	δ 7.55 ~ 7.58(m, 2H), 7.30(t, 1H), 6.89 ~ 6.92(d, 2H), 6.80 ~ 6.84(m, 2H), 6.38 ~ 6.41(s, 2H), 2.86(s, 6H), 2.73(s, 6H)	651.1457	651.1468

[0625] [실시에]

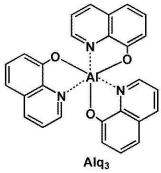
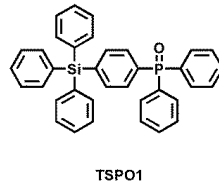
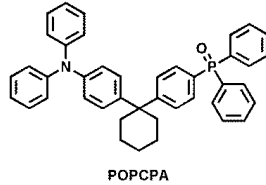
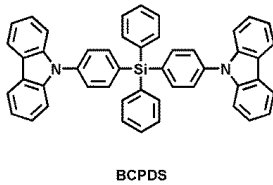
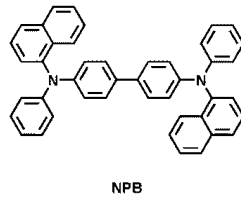
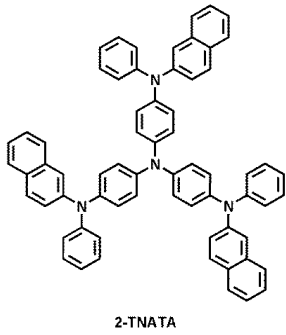
[0626] 실시예 1

[0627] 기판 및 애노드로서 코닝(corning)사의 15Ω/cm² (1200Å) ITO가 형성된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 상기 유리 기판을 설치하였다.

[0628] 상기 유리 기판에 형성된 ITO 애노드 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0629] 상기 정공 수송층 상부에 코-호스트인 BCPDS 및 POPCPA (BCPDS와 POPCPA의 중량비는 1:1)와 도펀트인 화합물 1을 코-호스트와 도펀트의 중량비가 90 : 10이 되도록 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0630] 상기 발광층 상부에 TSP01을 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상부에 Alq₃를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 후, 상기 전자 주입층 상부에 Al를 진공 증착하여 3000Å 두께의 캐소드를 형성하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.



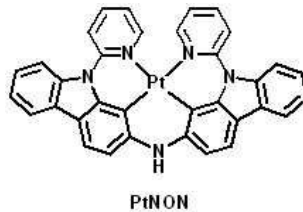
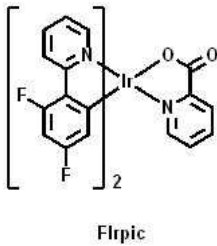
실시예 2 내지 10

발광층 형성시 도펀트로서 상기 화합물 1 대신 하기 표 2에 기재된 화합물을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

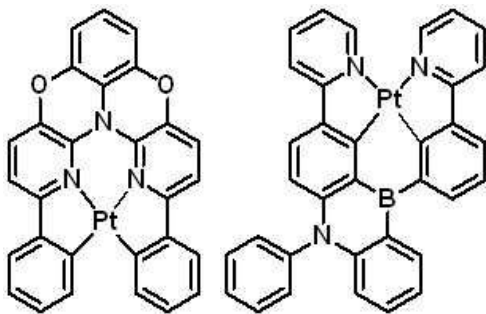
비교예 1 내지 4

발광층 형성시 도펀트로서 상기 화합물 1 대신 하기 화합물 A, B, C, D를 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

<화합물 A> <화합물 B>



<화합물 C> <화합물 D>



상기 실시예 1 내지 10 및 비교예 1 내지 4에서 제작된 유기 발광 소자의 구동전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율 및 최대 발광 파장을 Keithley SMU 236 및 휘도계 PR650을 이용하여 측정하여, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었

다.

표 2

	도펀트 화합물 No.	구동 전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	발광 효율 (cd/A)	발광색	최대 발광 파장(nm)	T95 수명 (hr)
실시예 1	1	4.0	0.11	15	19.6	청색	455	5.0
실시예 2	2	3.9	0.08	15	17.2	청색	459	5.2
실시예 3	4	3.8	0.10	15	15.1	청색	452	4.4
실시예 4	5	4.0	0.10	15	16.2	청색	456	3.2
실시예 5	7	4.1	0.12	15	16.7	청색	462	2.9
실시예 6	8	4.2	0.18	15	15.3	청색	460	4.8
실시예 7	10	3.8	0.10	15	19.2	청색	458	3.8
실시예 8	11	4.2	0.18	15	18.4	청색	452	3.0
실시예 9	19	4.3	0.22	15	16.9	청색	453	4.5
실시예 10	21	3.8	0.12	15	18.2	청색	470	7.2
비교예 1	A	4.3	0.23	15	5.9	청색	460	0.5
비교예 2	B	4.2	0.17	15	6.5	하늘색	478	1.5
비교예 3	C	4.5	0.25	15	8.9	하늘색	475	0.8
비교예 4	D	4.2	0.19	15	12.9	녹색	498	2.9

[0643] 상기 표 2로부터 실시예 1 내지 10의 유기 발광 소자는 비교예 1 내지 4의 유기 발광 소자에 비하여 저구동 전압, 고효율, 고색순도 및 장수명을 가짐을 확인할 수 있다.

[0644] 즉, 본 발명의 화합물이 소자의 발광층 재료로 사용될 경우, 구동전압, 효율 및 수명 측면에서 우수한 효과를 발휘할 수 있고, 고색순도의 청색 소자 구현이 가능함을 알 수 있다.

[0645] 본 발명에 대해 상기 합성에 및 실시예를 참고하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

부호의 설명

[0646] 10, 20, 30, 40: 유기 발광 소자

110: 제1전극

150: 유기층

190: 제2전극

210: 제1캐핑층

220: 제2캐핑층

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)	有机金属化合物和包括该有机金属化合物的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020200077673A	公开(公告)日	2020-07-01
申请号	KR1020180166415	申请日	2018-12-20
[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		
[标]发明人	김성범 고수병 한정훈 신수진 안은수 이은영 이재성 이현정		
发明人	김성범 고수병 한정훈 신수진 안은수 이은영 이재성 이현정 전미나		
IPC分类号	H01L51/00 C07F15/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0077 C07F15/0086 H01L51/0094 H01L51/5012		

摘要(译)

公开了一种有机金属化合物和包括该有机金属化合物的有机发光器件。

10

190
150
110