



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년02월20일
(11) 등록번호 10-2637103
(24) 등록일자 2024년02월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 15/00 (2024.01) C09K 11/06 (2006.01)
G01N 21/64 (2006.01) H10K 50/00 (2023.01)
H10K 99/00 (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07F 15/0086 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
(21) 출원번호 10-2018-0008412
(22) 출원일자 2018년01월23일
심사청구일자 2021년01월25일
(65) 공개번호 10-2019-0089626
(43) 공개일자 2019년07월31일
(56) 선행기술조사문헌
US20120223634 A1*
US20070190359 A1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
삼성전자주식회사
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)
삼성에스디아이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20 (공세동)
(72) 발명자
배혜진
경기도 수원시 영통구 봉영로1517번길 27, 909동
1803호 (영통동, 벽적골 주공아파트)
노창호
경기도 수원시 영통구 봉영로 1526, 702동 1904호
(영통동, 살구골 진덕아파트)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 18 항

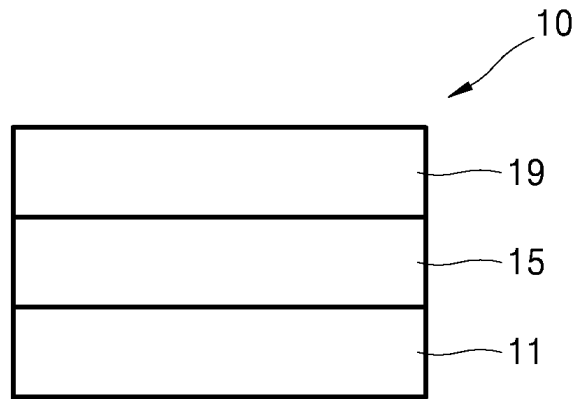
심사관 : 김지은

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

(57) 요약

유기금속 화합물, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자 및 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물이 개시된다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

G01N 21/64 (2013.01)

H10K 50/12 (2023.02)

H10K 85/346 (2023.02)

C09K 2211/185 (2013.01)

(72) 발명자

권은숙

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (삼성종합기술원)

김상모

경기도 화성시 동탄중앙로 51, 621동 1104호 (반송동, 동탄나루마을 한화꿈에그린아파트)

민민식

경기도 수원시 영통구 신원로294번길 40-24, 503호 (원천동)

박상호

경기도 안양시 동안구 시민대로159번길 62, 203동 1003호 (비산동, 은하수아파트)

라이 비렌드라 쿠마

경기도 화성시 동탄반석로 193, 224동 1904호 (반송동, 시범한빛마을동탄아이파크아파트)

손준모

경기도 용인시 기흥구 이현로29번길 86-11, 111동 601호 (보정동, 대림아파트)

정용식

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동560삼성전자소재연구단지)

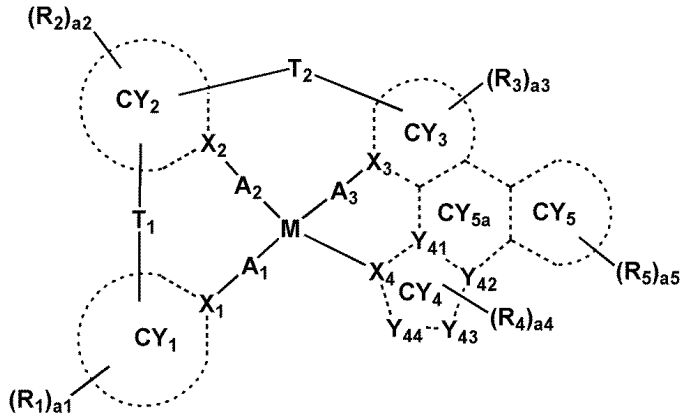
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

M은 팔라듐(Pd), 백금(Pt) 또는 금(Au)이고,

X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

X₃는 C이고, X₄는 N이고,

Y₄₁ 내지 Y₄₄는 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

A₁ 내지 A₃는 서로 독립적으로, 화학 결합이고, A₁이 화학 결합일 경우, X₁과 M은 직접(directly) 결합하고, A₂가 화학 결합일 경우, X₂와 M은 직접 결합하고, A₃가 화학 결합일 경우, X₃와 M은 직접 결합하고,

X₁과 M 사이의 결합 및 X₂와 M 사이의 결합 중 1개는 배위 결합이고, 나머지 1개는 공유 결합이고,

X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고,

고리 CY₁은 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹, 트리아자실롤 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 벤즈옥사졸 그룹, 벤즈티아졸 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 카바졸 그룹 또는 아자카바졸 그룹이고,

고리 CY₂는 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 카바졸 그룹 또는 아자카바졸 그룹이고,

고리 CY₃ 및 고리 CY₅는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹 또는 트리아진 그룹이고,

고리 CY₄는 트리아졸 그룹 또는 테트라졸 그룹이고,

고리 CY_{5a}는 6원환이고,

T₁은 단일 결합, *-N(R₆)-*', *-C(R₆)(R₇)-*', *-Si(R₆)(R₇)-*', *-S-*', *-Se-*' 또는 *-O-*'이고,

T₂는 단일 결합, *-N(R₈)-*', *-B(R₈)-*', *-P(R₈)-*', *-C(R₈)(R₉)-*', *-Si(R₈)(R₉)-*', *-Ge(R₈)(R₉)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*' 또는 *-S(=O)₂-*'이고,

R₁ 내지 R₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 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 C₇-C₆₀알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂) 및 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) 중에서 선택되고,

a₁ 내지 a₃ 및 a₅는 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수 중에서 선택되고,

a₄는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

서로 이웃한 복수의 R₁ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

서로 이웃한 복수의 R₂ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

서로 이웃한 복수의 R₃ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

서로 이웃한 복수의 R₄ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

서로 이웃한 복수의 R₅ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

R₁ 내지 R₉ 중 2개는 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 R_{10a}에 대한 설명은 상기 R₁에 대한 설명과 동일하고,

* 및 *'은 각각 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

상기 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 C₇-C₆₀알킬아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴

옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂) 및 -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂) 및 -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

-N(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅);

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₅, Q₁₁ 내지 Q₁₅, Q₂₁ 내지 Q₂₅ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₅는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기; 및

C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₉은 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, C₁-C₂₀알킬페닐기, 나프틸기, 플루오렌틸기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기,

파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, C₁-C₂₀알킬페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, C₁-C₂₀알킬페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

-N(Q₁)(Q₂) 및 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅);

중에서 선택되고,

Q₁ 내지 Q₅는 서로 독립적으로,

-CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CH₂CH₃, -CH₂CD₃, -CH₂CD₂H, -CH₂CDH₂, -CHDCH₃, -CHDCD₂H, -CHDCDH₂, -CHDCD₃, -CD₂CD₃, -CD₂CD₂H 및 -CD₂CDH₂;

n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

중수소, C₁-C₁₀알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

중에서 선택된, 유기금속 화합물.

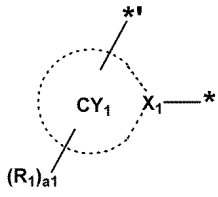
청구항 5

제1항에 있어서,

- a) 하기 <조건 1>, <조건 2> 및 <조건 3> 중 하나를 만족하거나;
- b) 하기 <조건 4> 및 <조건 5> 중 하나를 만족하거나; 또는
- c) 하기 <조건 1>, <조건 2> 및 <조건 3> 중 하나를 만족하고, 하기 <조건 4> 및 <조건 5> 중 하나를 만족한, 유기금속 화합물:

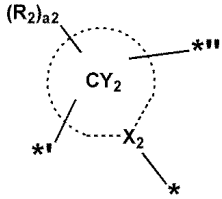
<조건 1>

A₁ 및 A₂는 화학 결합이고,



로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A1-1로 표시되고,

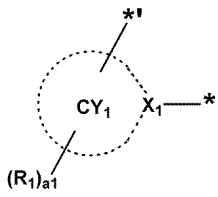
T₁은 *-N(R₆)-*', *-C(R₆)(R₇)-*', *-Si(R₆)(R₇)-*', *-S-*', *-Se-*' 또는 *-O-*'이고,



로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-1로 표시됨

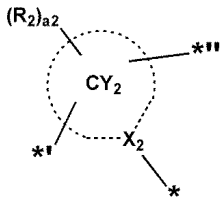
<조건 2>

A₁ 및 A₂는 화학 결합이고,



로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A1-2로 표시되고,

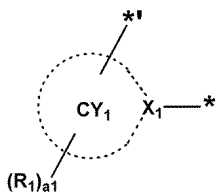
T₁은 단일 결합이고,



로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-1로 표시됨

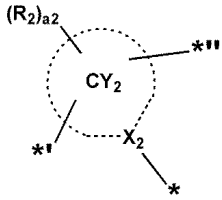
<조건 3>

A₁ 및 A₂는 화학 결합이고,



로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A1-1로 표시되고,

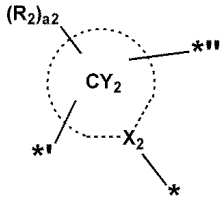
T₁은 단일 결합이고,



로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-3으로 표시됨

<조건 4>

A₂ 및 A₃은 화학 결합이고,

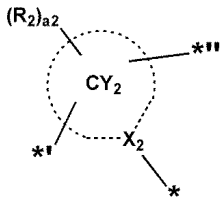


로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-1로 표시되고,

T₂는 *-N(R₈)-*', *-B(R₈)-*', *-P(R₈)-*', *-C(R₈)(R₉)-*', *-Si(R₈)(R₉)-*', *-Ge(R₈)(R₉)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*' 또는 *-S(=O)₂-*'임

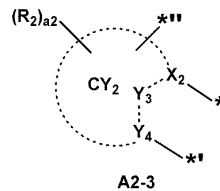
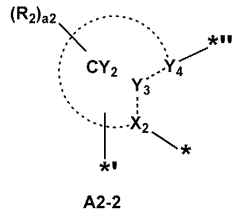
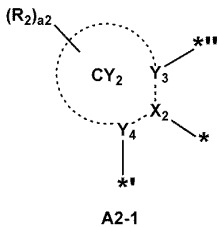
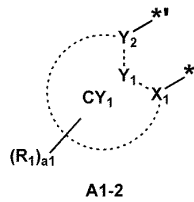
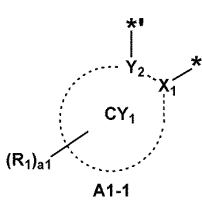
<조건 5>

A₂ 및 A₃은 화학 결합이고,



로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-2로 표시되고,

T₂는 단일 결합임



상기 화학식 A1-1, A1-2, A2-1, A2-2 및 A2-3 중

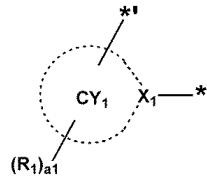
X₁, X₂, 고리 CY₁, 고리 CY₂, R₁, R₂, a₁ 및 a₂에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고, Y₁ 내지 Y₄는 서로 독립적으로, C 또는 N이고, X₁과 Y₂ 사이의 결합, Y₁과 Y₂ 사이의 결합, X₂와 Y₄ 사이의 결합, X₂와 Y₃ 사이의 결합 및 Y₃와 Y₄ 사이의 결합은 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 이중 결합이고,

상기 화학식 A1-1 및 A1-2 중 *는 화학식 1 중 A₁ 또는 M과의 결합 사이트이고 *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고,

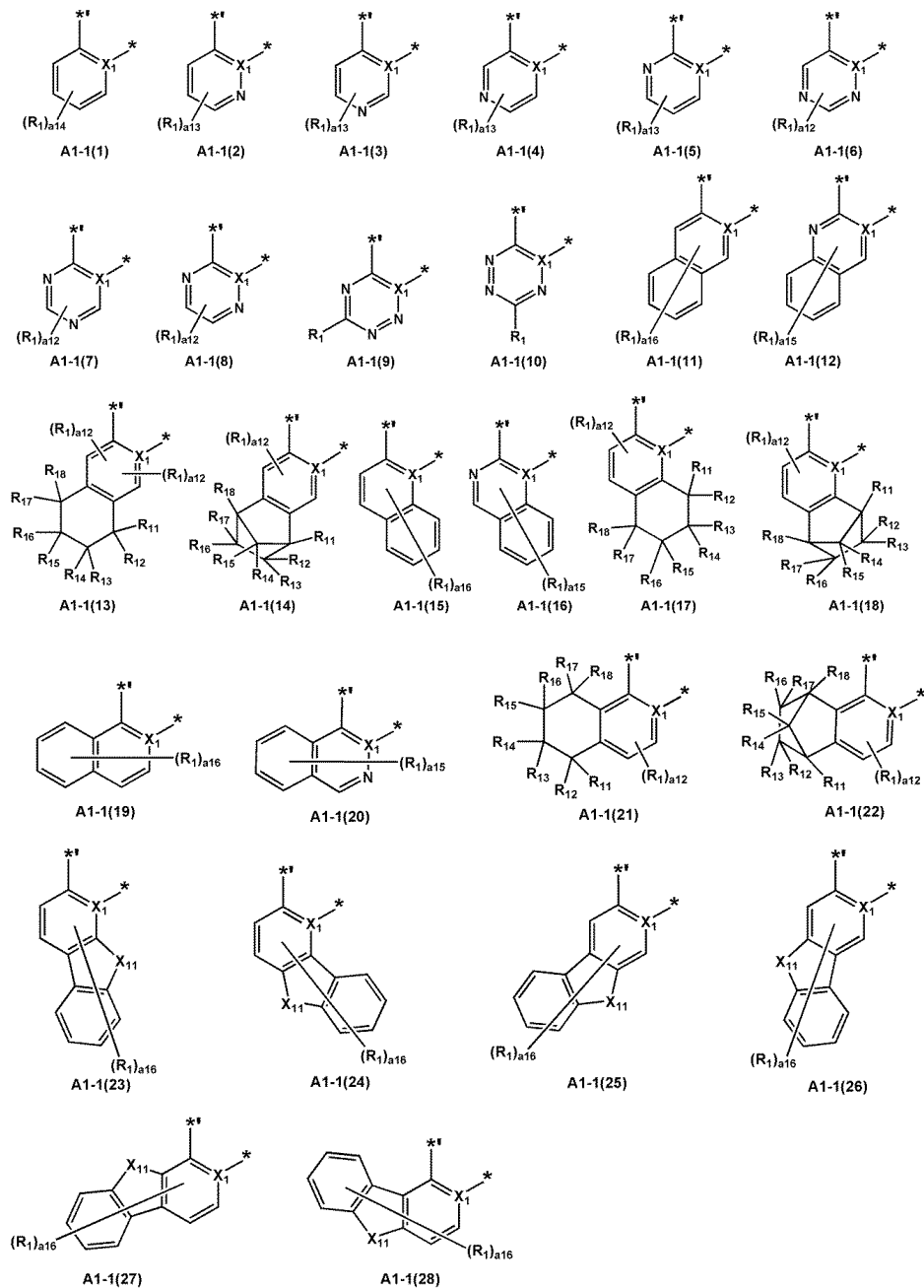
상기 화학식 A2-1, A2-2 및 A2-3 중 *는 화학식 1 중 A₂ 또는 M과의 결합 사이트이고 *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고, *''은 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이다.

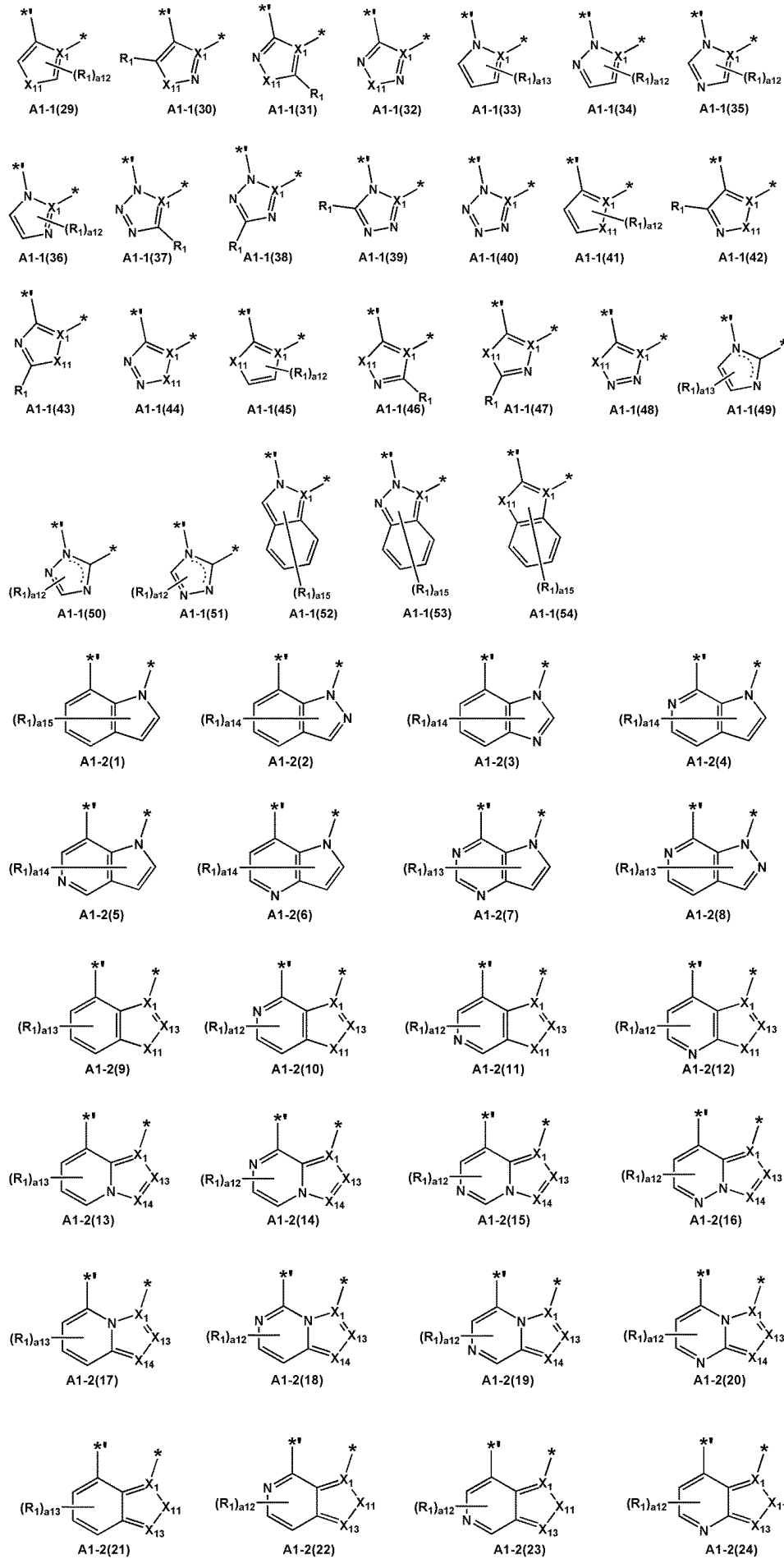
청구항 6

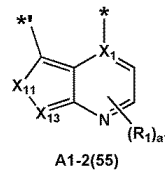
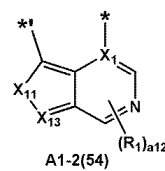
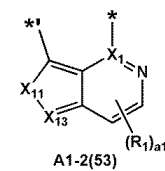
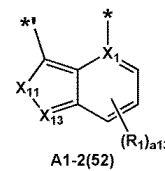
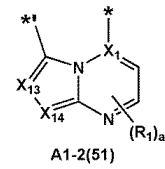
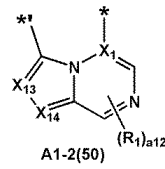
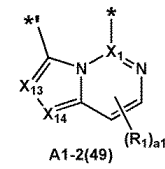
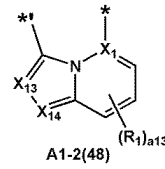
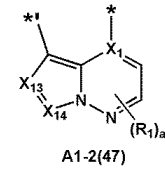
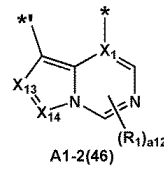
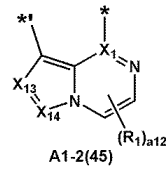
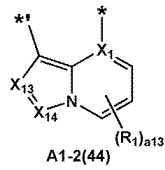
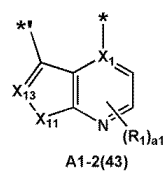
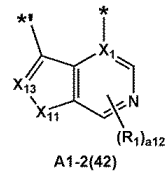
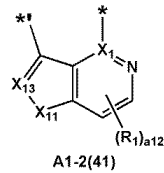
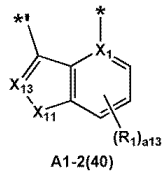
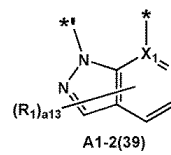
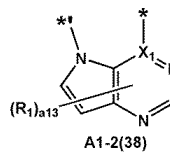
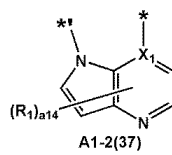
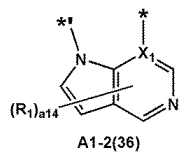
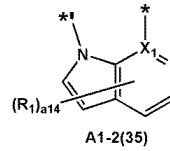
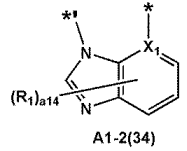
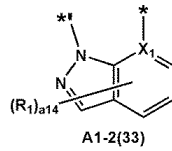
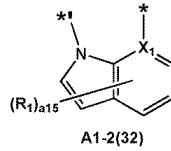
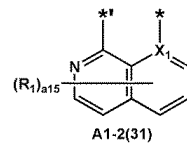
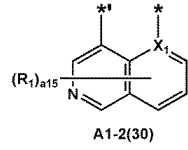
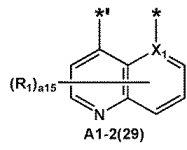
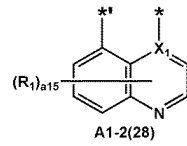
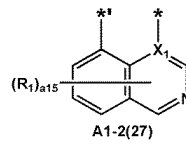
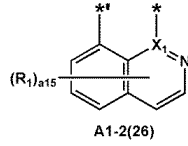
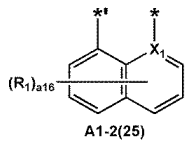
제1항에 있어서,

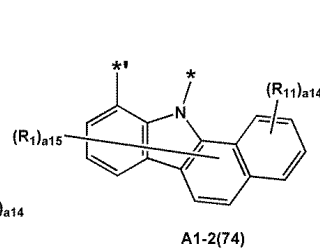
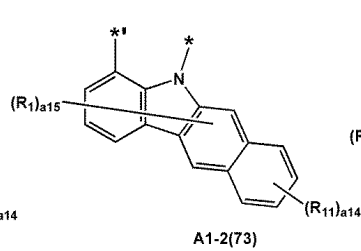
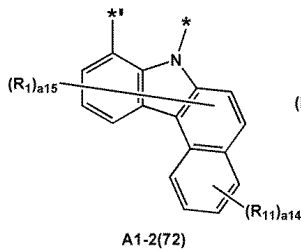
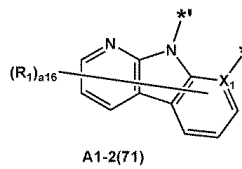
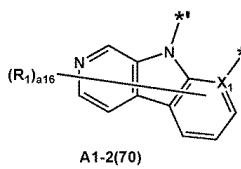
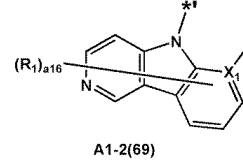
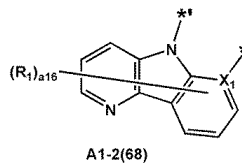
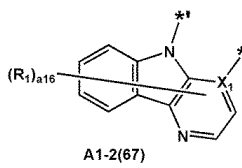
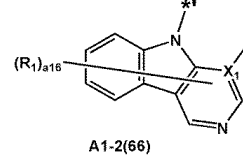
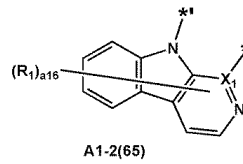
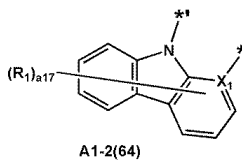
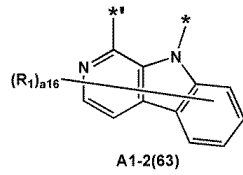
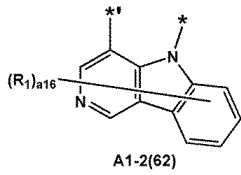
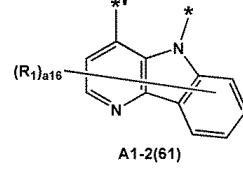
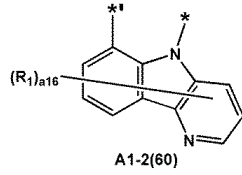
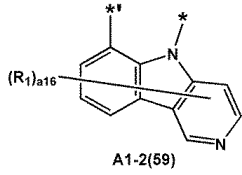
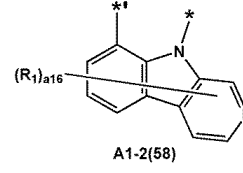
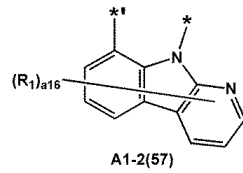
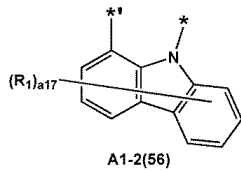


로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A1-1(1) 내지 A1-1(54) 및 A1-2(1) 내지 A1-2(74) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물:









상기 화학식 A1-1(1) 내지 A1-1(54) 및 A1-2(1) 내지 A1-2(74) 중,

X₁ 및 R₁에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

X₁₁은 O, S, N(R₁₁), C(R₁₁)(R₁₂) 또는 Si(R₁₁)(R₁₂)이고,

R₁₁ 내지 R₁₈에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₁에 대한 설명과 동일하고,

a₁₇은 0 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

a₁₆은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

a₁₅는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고, 상기 화학식 A1-1(53) 중 a₁₅는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a₁₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a₁₃은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

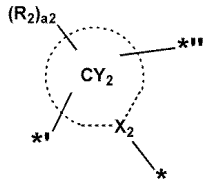
a₁₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되되, 상기 화학식 A1-1(13) 중 a₁₂는 0 또는 1이고,

*는 화학식 1 중 A₁ 또는 M과의 결합 사이트이고,

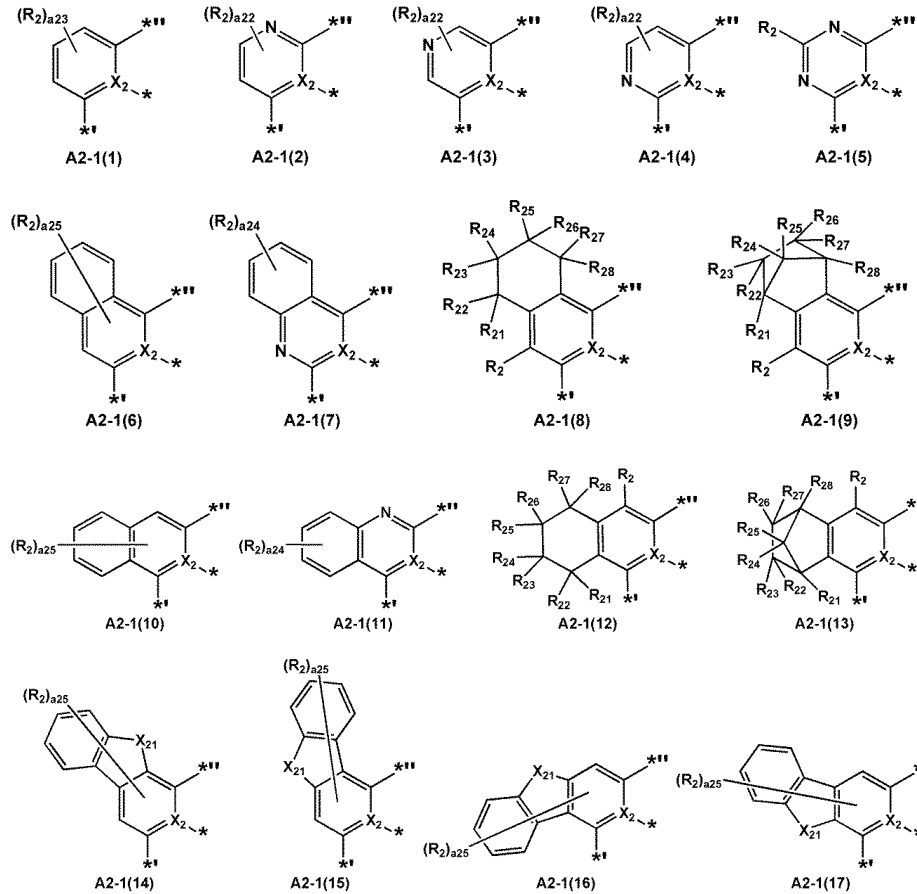
*'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이다.

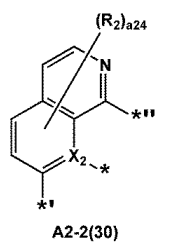
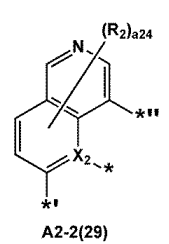
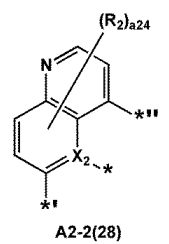
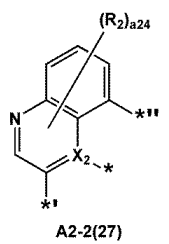
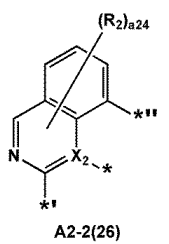
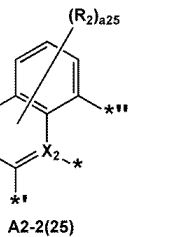
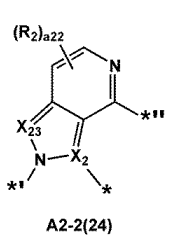
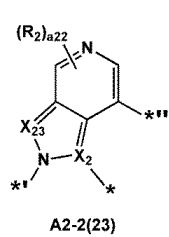
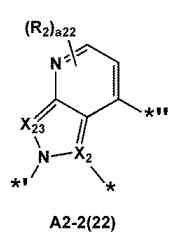
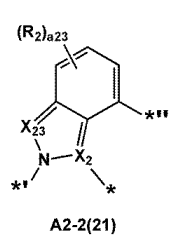
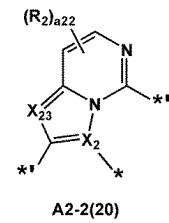
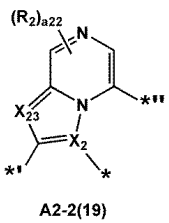
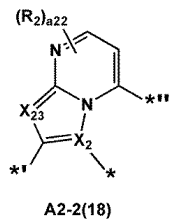
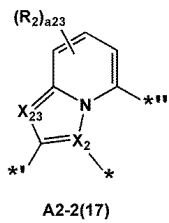
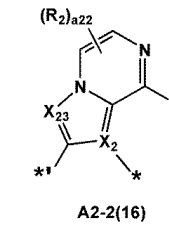
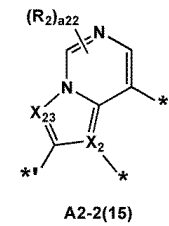
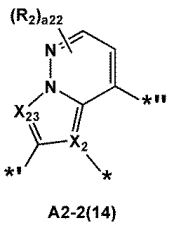
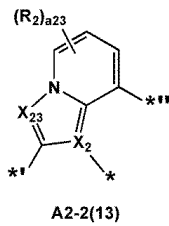
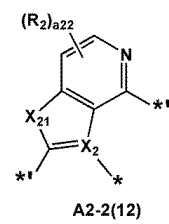
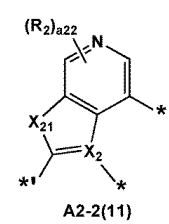
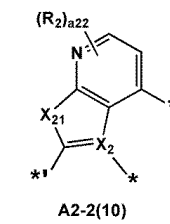
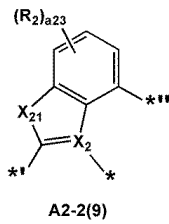
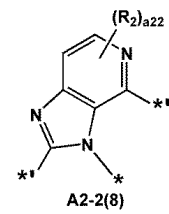
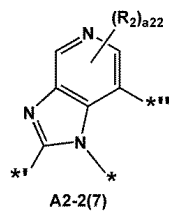
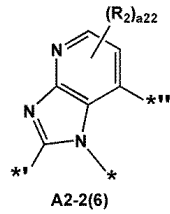
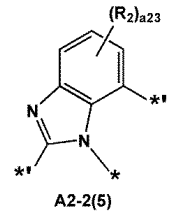
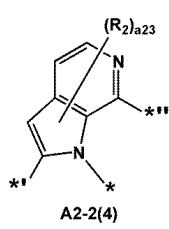
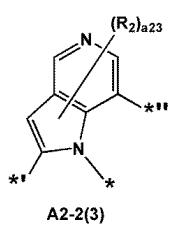
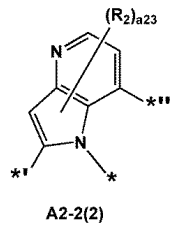
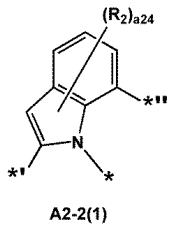
청구항 7

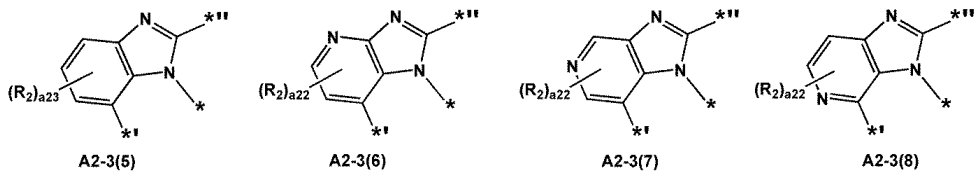
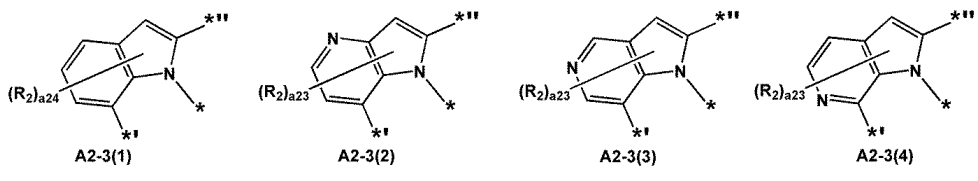
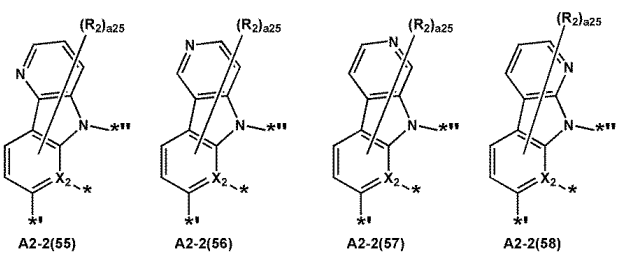
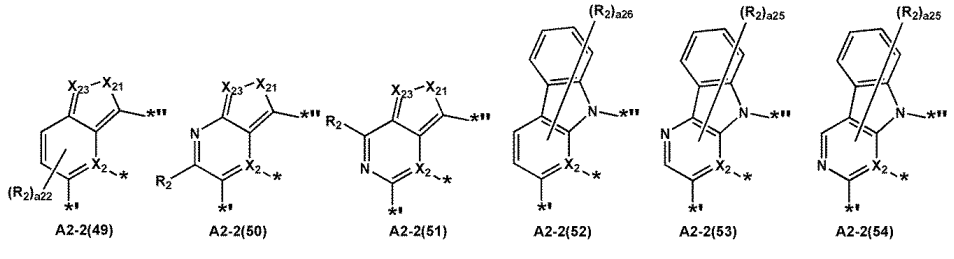
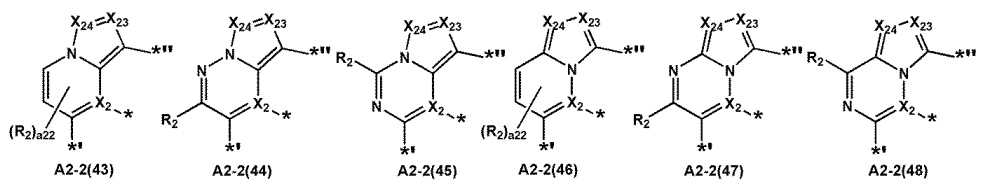
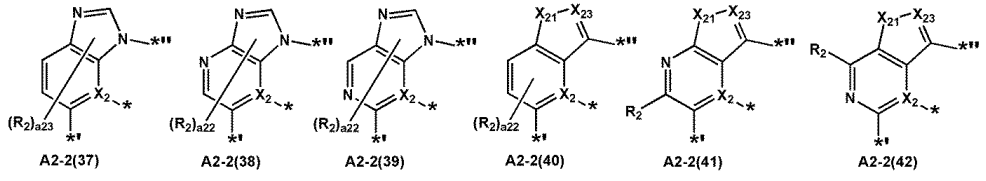
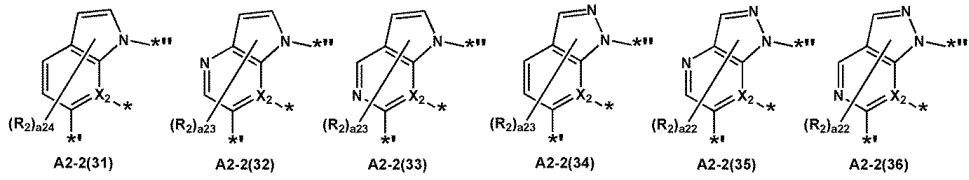
제1항에 있어서,

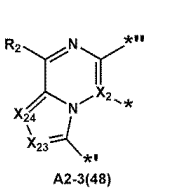
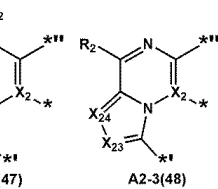
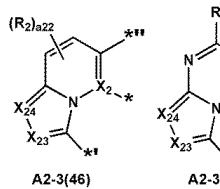
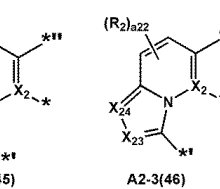
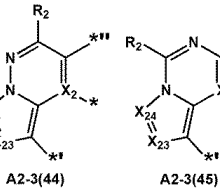
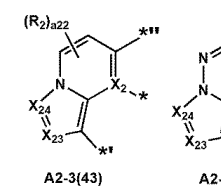
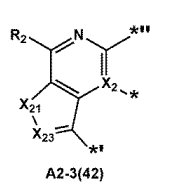
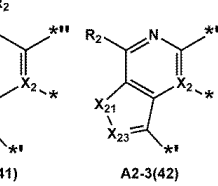
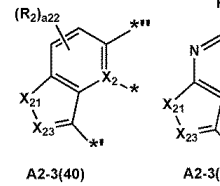
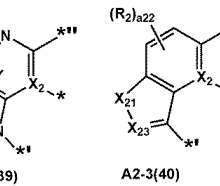
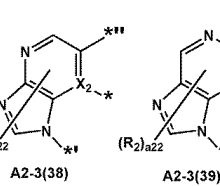
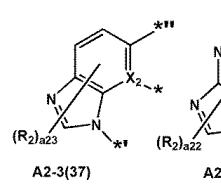
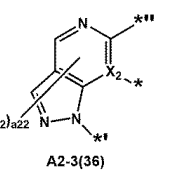
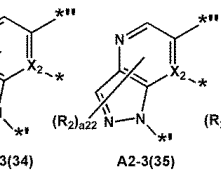
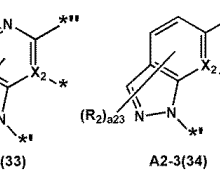
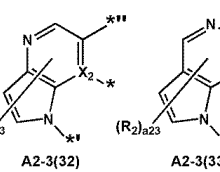
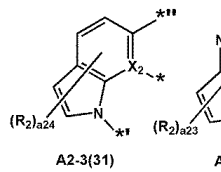
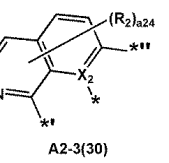
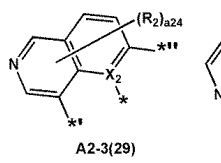
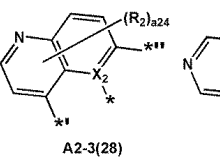
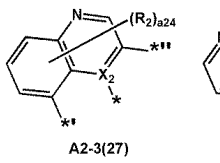
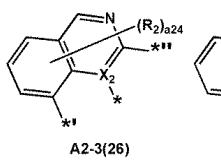
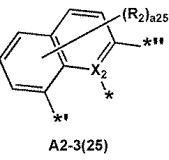
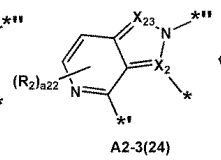
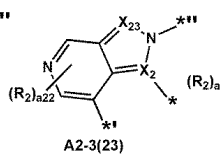
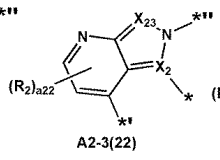
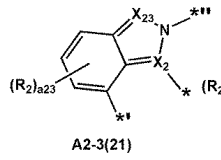
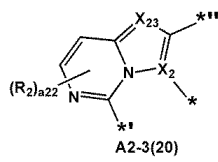
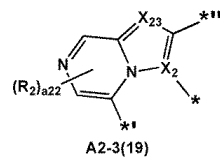
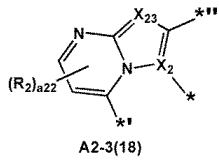
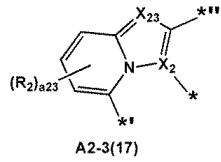
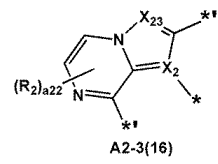
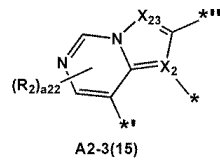
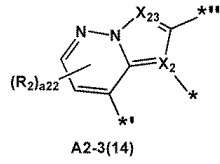
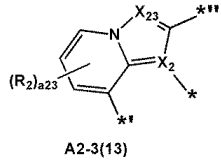
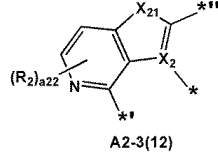
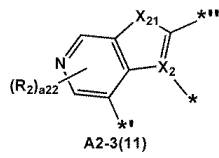
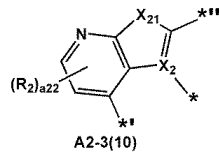
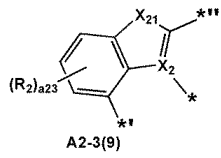


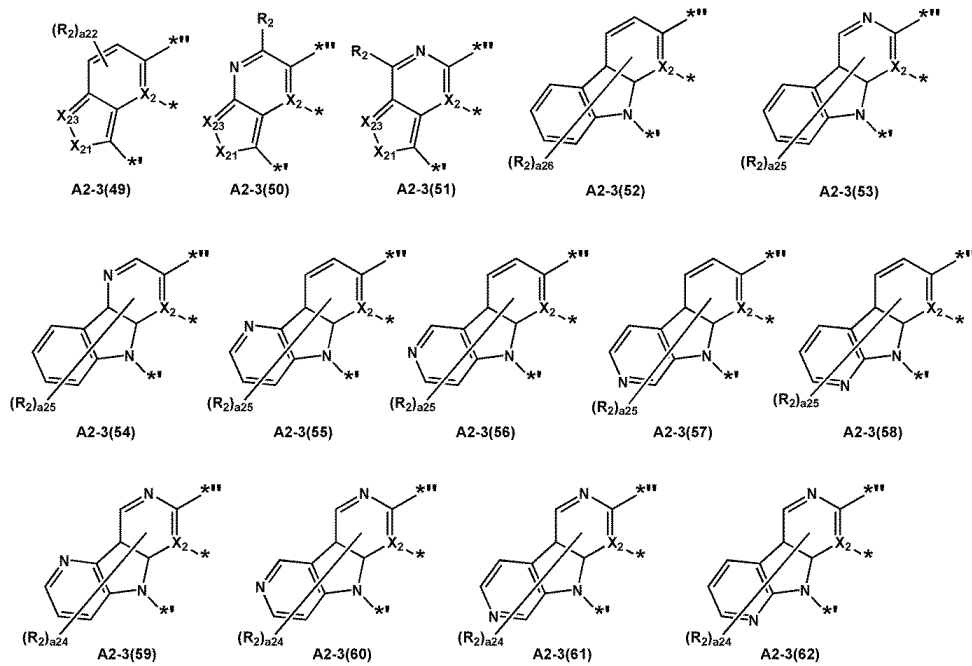
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(17), A2-2(1) 내지 A2-2(58) 및 A2-3(1) 내지 A2-3(62) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물:











상기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(17), A2-2(1) 내지 A2-2(58) 및 A2-3(1) 내지 A2-3(62) 중,
 X_2 및 R_2 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

X_{21} 은 O, S, $N(R_{21})$, $C(R_{21})(R_{22})$ 또는 $Si(R_{21})(R_{22})$ 이고,

R_{21} 내지 R_{28} 에 대한 설명은 각각 제1항 중 R_2 에 대한 설명과 동일하고,

a_{26} 은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

a_{25} 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a_{24} 은 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a_{23} 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a_{22} 은 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

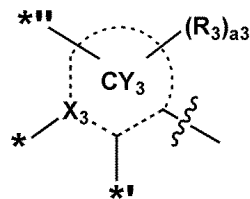
*는 화학식 1 중 A_2 또는 M과의 결합 사이트이고,

*'은 화학식 1 중 T_1 과의 결합 사이트이고,

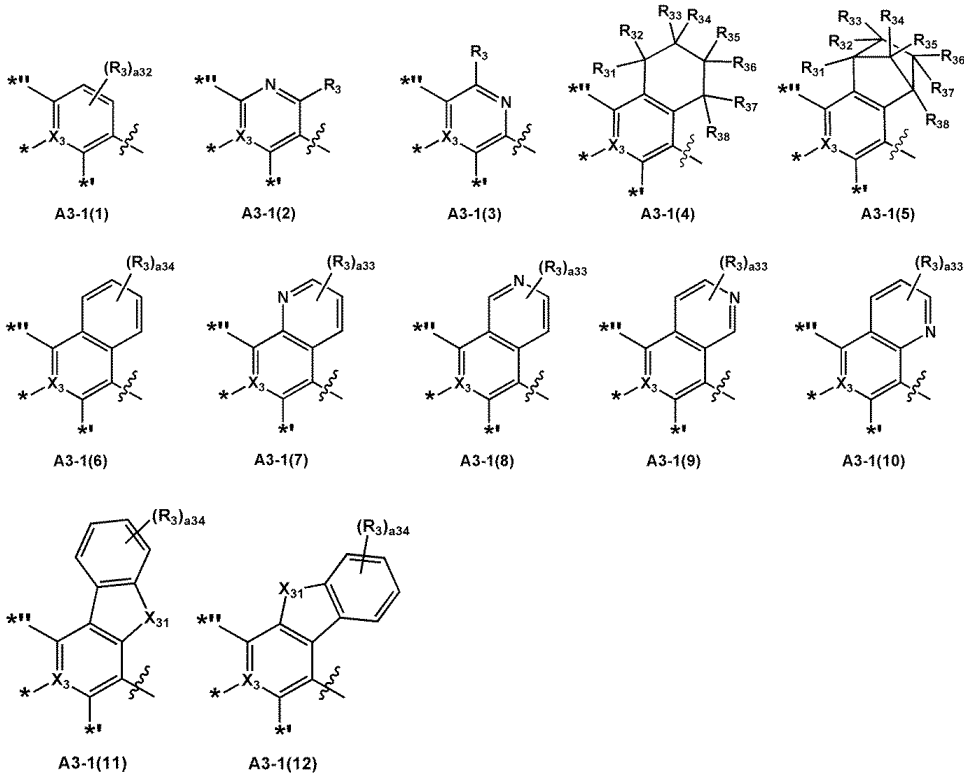
*"은 화학식 1 중 T_2 와의 결합 사이트이다.

청구항 8

제1항에 있어서,



로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A3-1(1) 내지 A3-1(12) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물:



상기 화학식 A3-1(1) 내지 A3-1(12) 중,

X_3 및 R_3 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

X_{31} 은 O, S, $N(R_{31})$, $C(R_{31})(R_{32})$ 또는 $Si(R_{31})(R_{32})$ 이고,

R_{31} 내지 R_{38} 에 대한 설명은 각각 제1항 중 R_3 에 대한 설명과 동일하고,

a_{34} 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a_{33} 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a_{32} 는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

*는 화학식 1 중 A_3 또는 M과의 결합 사이트이고,

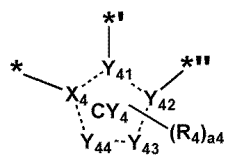
*"은 화학식 1 중 T_2 와의 결합 사이트이고,

*'은 화학식 1 중 Y_{41} 과의 결합 사이트이고,

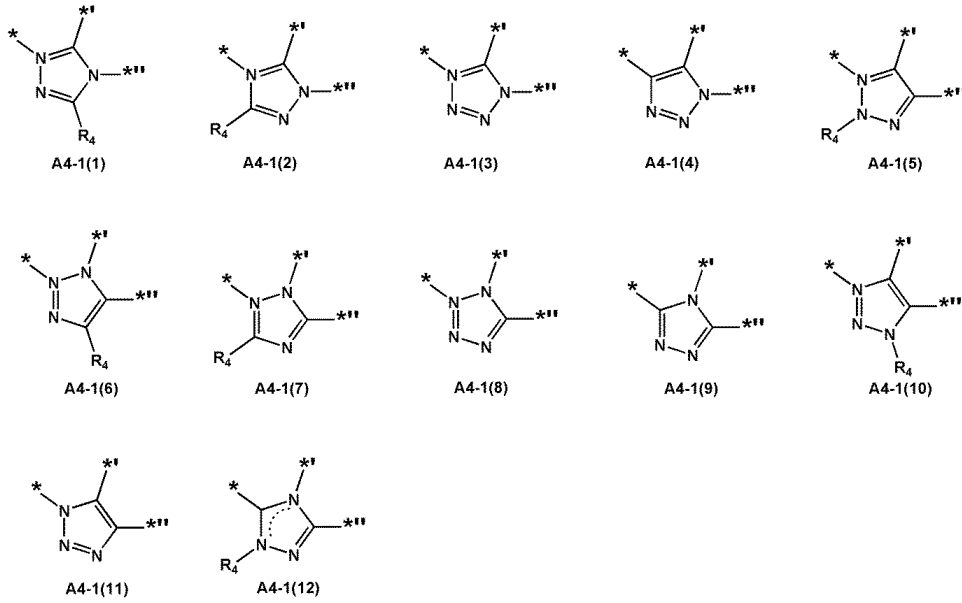
~~~~~ 화학식 1 중 고리  $CY_5$ 와의 결합 사이트이다.

### 청구항 9

제1항에 있어서,



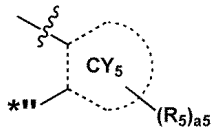
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A4-1(1) 내지 A4-1(12) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물:



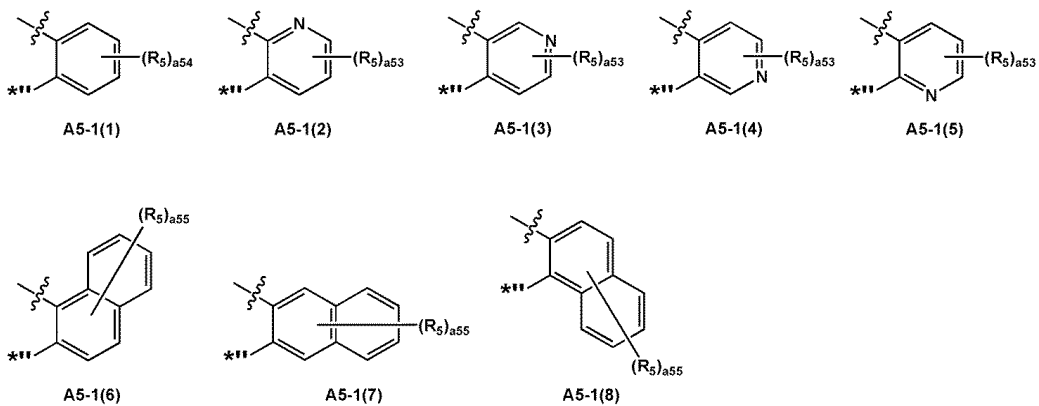
상기 화학식 A4-1(1) 내지 A4-1(12) 중,  
 $X_4$  및  $R_4$ 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,  
 \*는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,  
 \*'은 화학식 1 중 고리  $CY_3$ 와의 결합 사이트이고,  
 \*\*은 화학식 1 중 고리  $CY_5$ 와의 결합 사이트이다.

**청구항 10**

제1항에 있어서,



로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A5-1(1) 내지 A5-1(8) 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



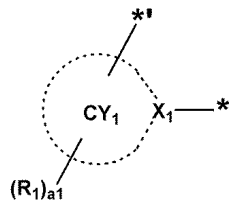
상기 화학식 A5-1(1) 내지 A5-1(8) 중,  
 $R_5$ 에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하고,  
 $a_{55}$ 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,  
 $a_{54}$ 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,  
 $a_{53}$ 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

~~~~ 화학식 1 중 고리 CY<sub>3</sub>과의 결합 사이트이다.

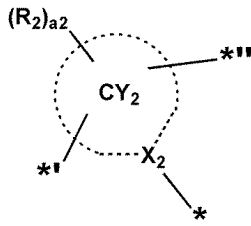
*"은 화학식 1 중 Y₄₂와의 결합 사이트이다.

청구항 11

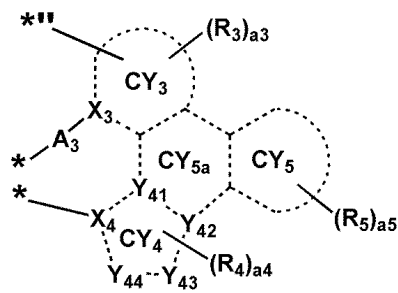
제1항에 있어서,



로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY1-1 내지 CY1-59 중 하나로 표시되고,

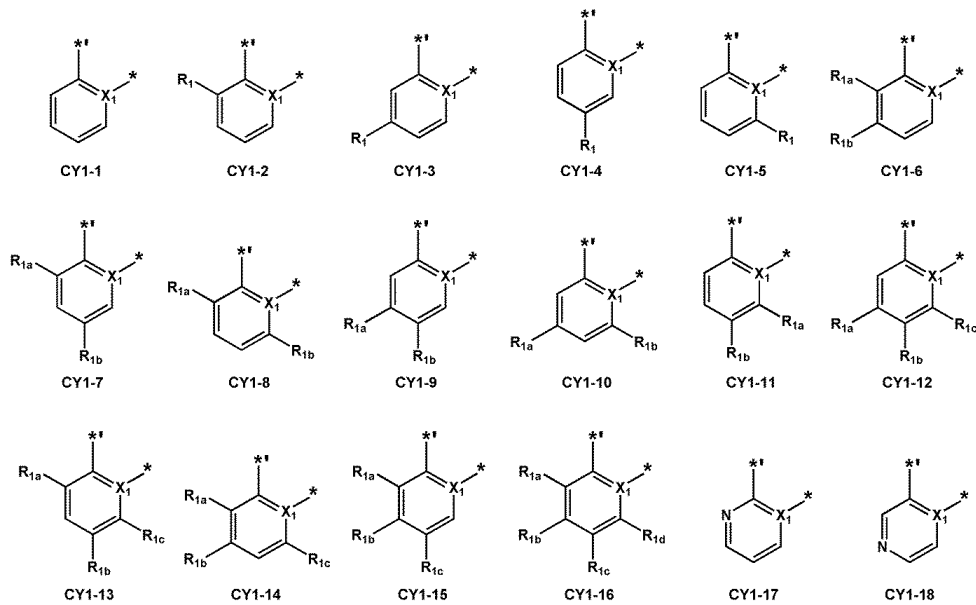


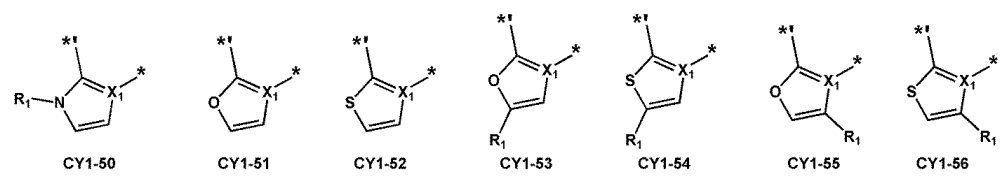
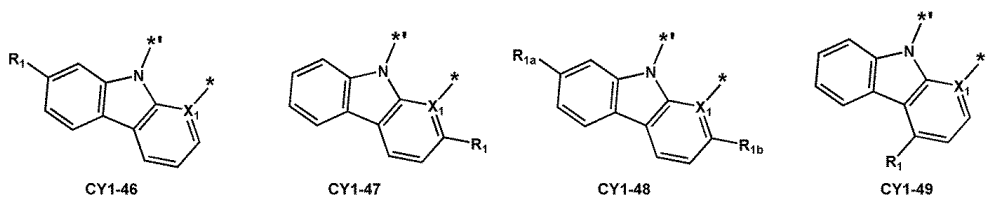
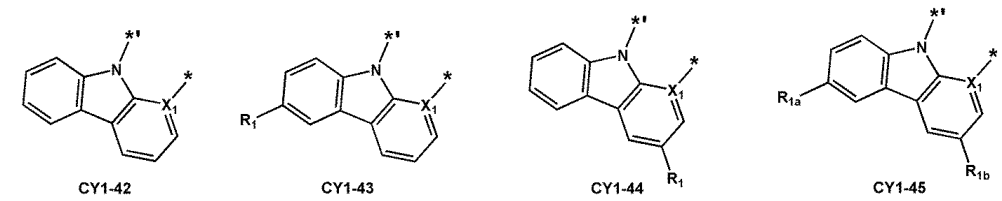
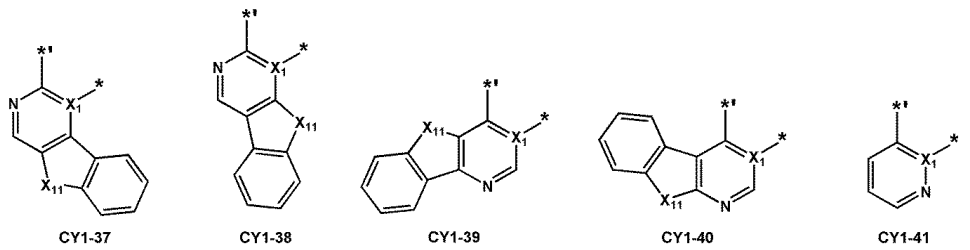
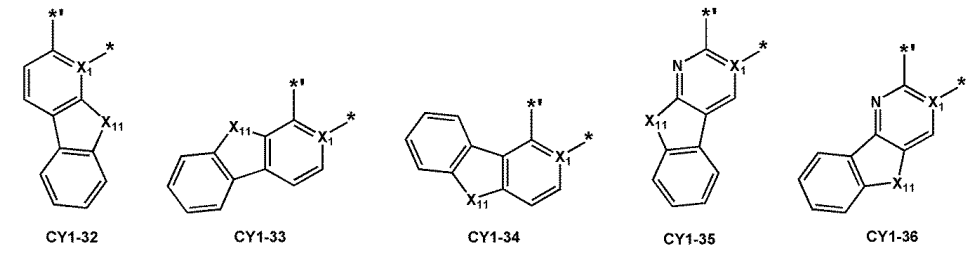
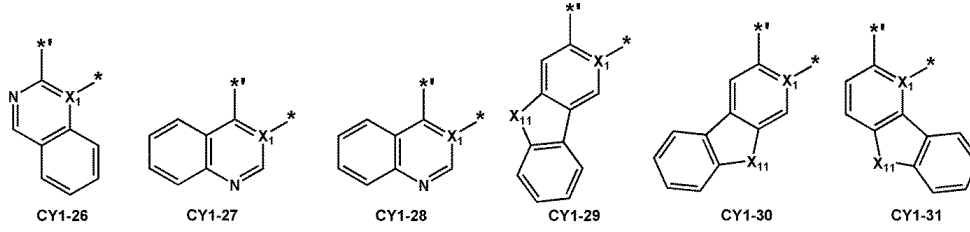
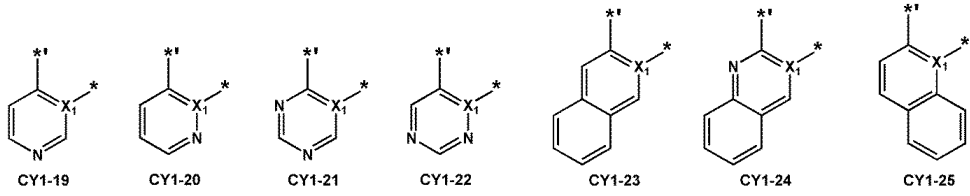
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY2-1 내지 CY2-30 중 하나로 표시되고,

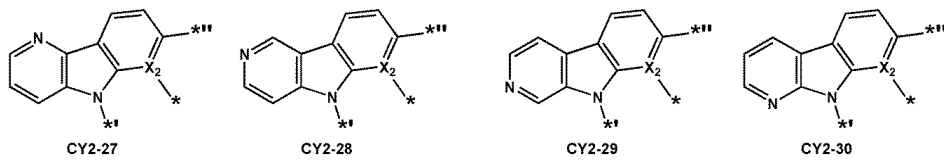
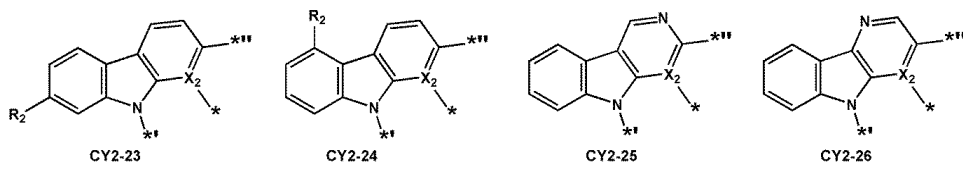
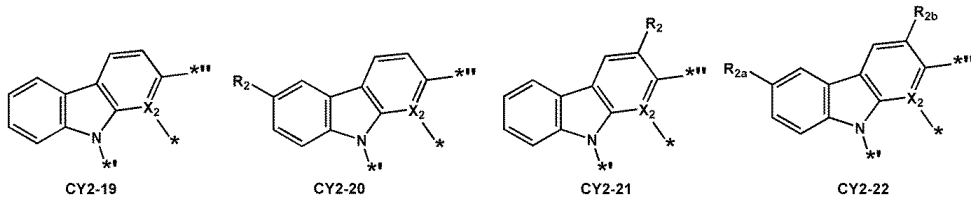
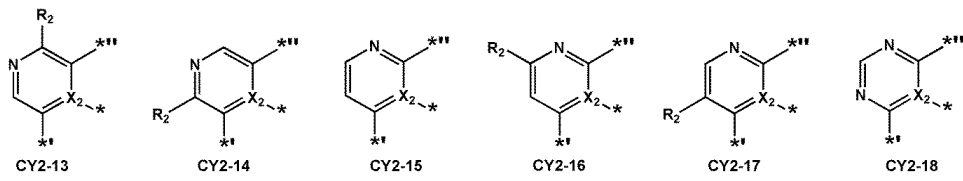
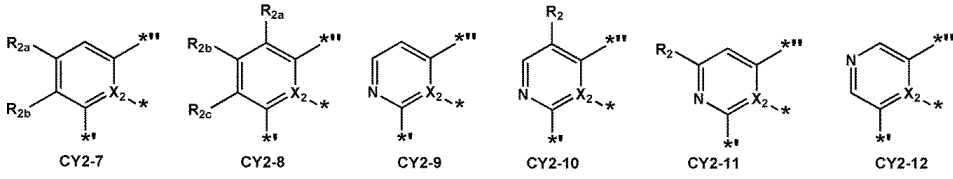
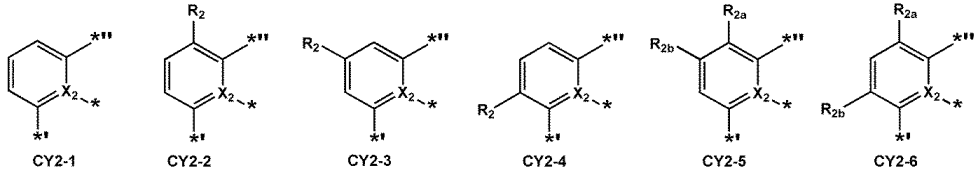
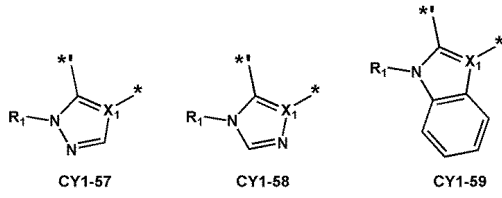


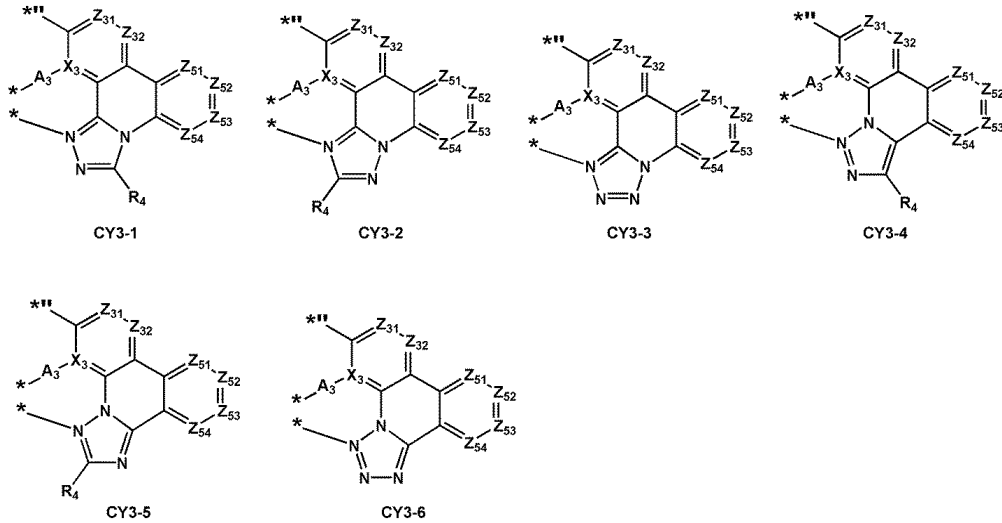
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY3-1 내지 CY3-6 중 하나로 표시된, 유

기금속 화합물:









상기 화학식 CY1-1 내지 CY1-59, CY2-1 내지 CY2-30 및 CY3-1 내지 CY3-6 중,

A₃, X₁ 내지 X₃, R₁, R₂ 및 R₄에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

X₁₁은 O, S, N(R₁₁), C(R₁₁)(R₁₂) 또는 Si(R₁₁)(R₁₂)이고,

R_{1a} 내지 R_{1d}, R₁₁ 및 R₁₂에 대한 설명은 각각 상기 R₁에 대한 설명과 동일하고,

R_{2a} 내지 R_{2c}에 대한 설명은 각각 상기 R₂에 대한 설명과 동일하고,

Z₃₁은 N 또는 C(R₃₁)이고, Z₃₂는 N 또는 C(R₃₂)이고,

R₃₁ 및 R₃₂에 대한 설명은 각각 상기 R₃에 대한 설명과 동일하고,

Z₅₁은 N 또는 C(R₅₁)이고, Z₅₂는 N 또는 C(R₅₂)이고, Z₅₃은 N 또는 C(R₅₃)이고, Z₅₄는 N 또는 C(R₅₄)이고,

R₅₁ 내지 R₅₄에 대한 설명은 각각 상기 R₅에 대한 설명과 동일하고,

단, R₁, R₂, R_{1a} 내지 R_{1d} 및 R_{2a} 내지 R_{2c}는 수소가 아니고,

상기 화학식 CY1-1 내지 CY1-59 중 *는 화학식 1 중 A₁ 또는 M과의 결합 사이트이고, *'는 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고,

상기 CY2-1 내지 CY2-34 중 *는 화학식 1 중 A₂ 또는 M과의 결합 사이트이고, *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고, *''는 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이고,

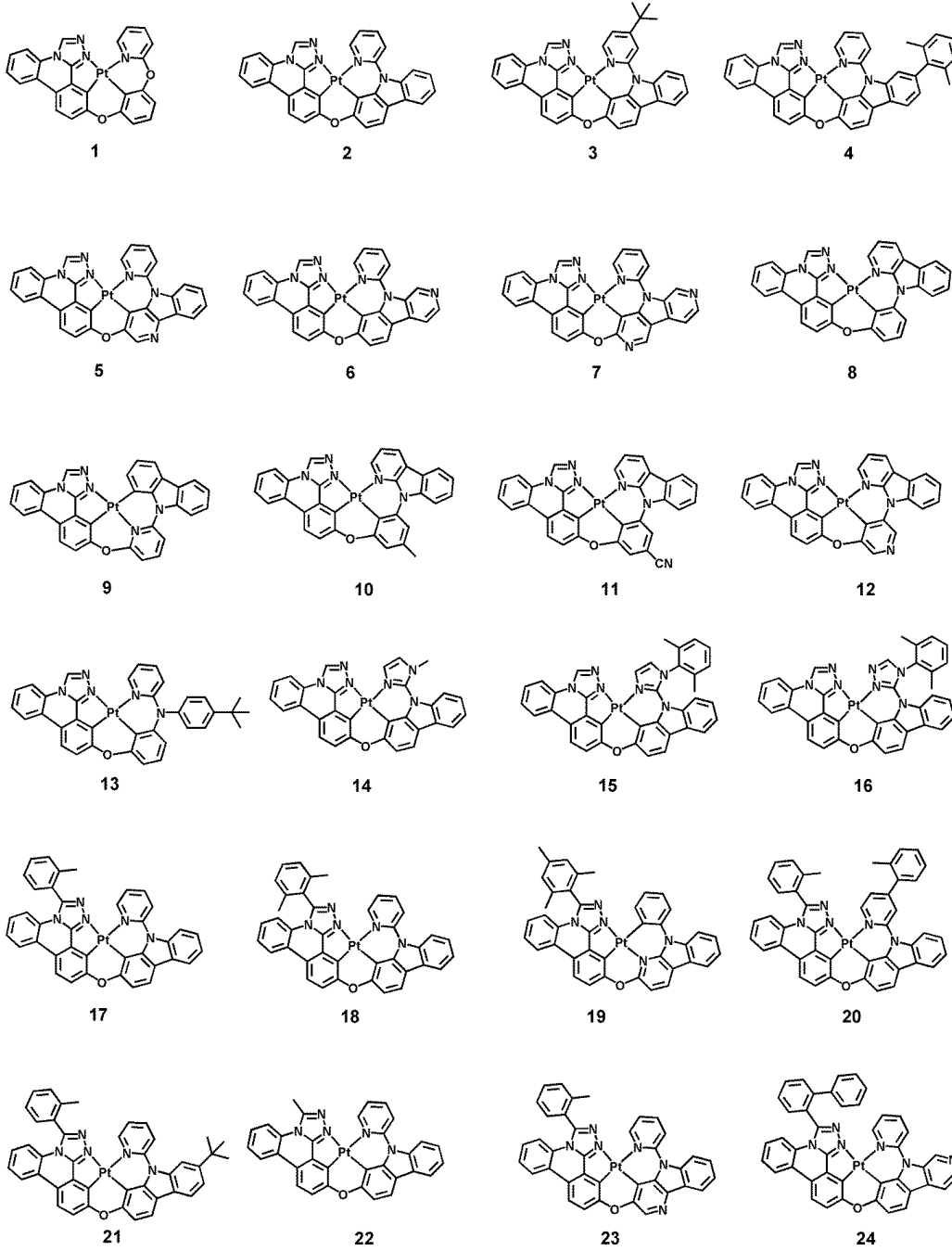
상기 CY3-1 내지 CY3-6 중 2개의 *는 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고, *''은 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이다.

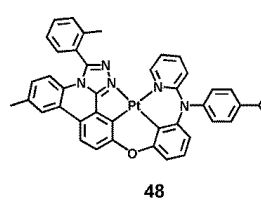
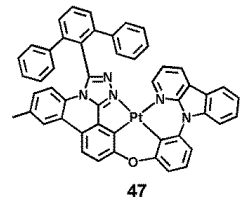
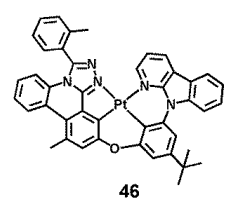
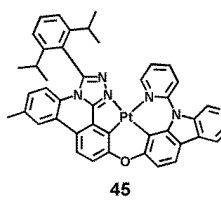
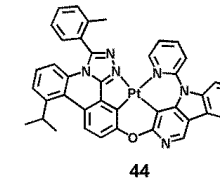
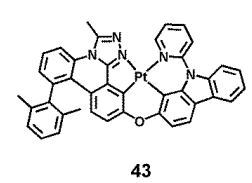
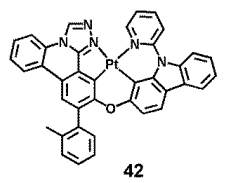
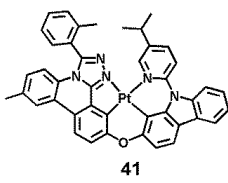
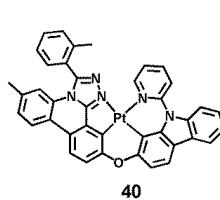
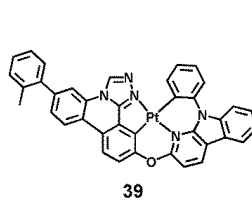
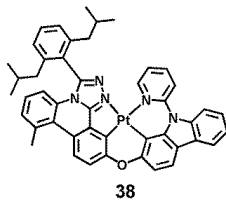
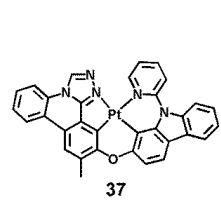
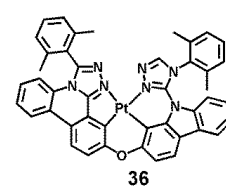
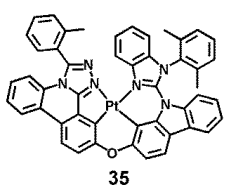
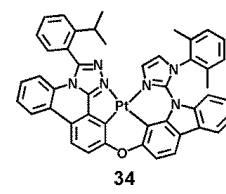
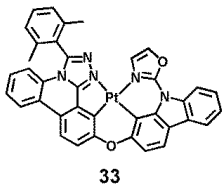
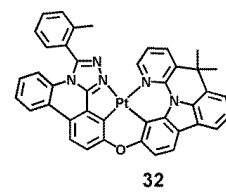
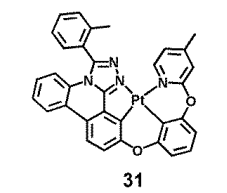
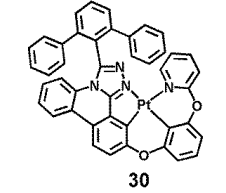
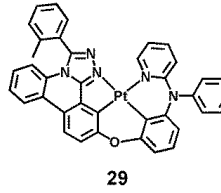
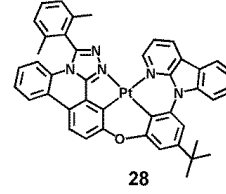
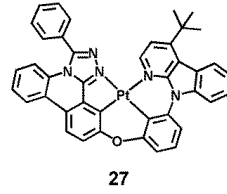
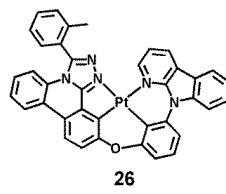
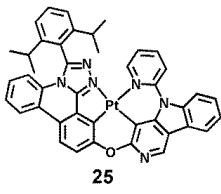
청구항 12

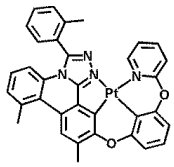
제1항에 있어서,

하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시된, 유기금속 화합물:

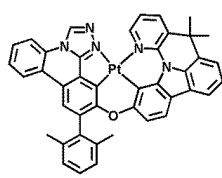
하기 화합물 1 내지 196 중 하나인, 유기금속 화합물:



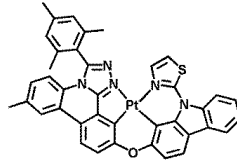




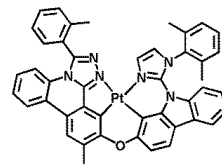
49



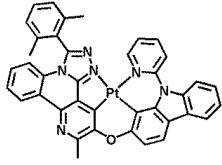
50



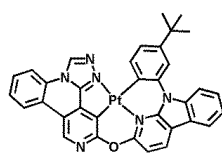
51



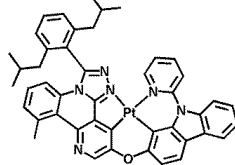
52



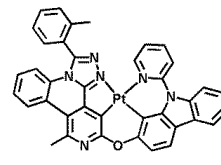
53



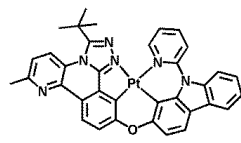
54



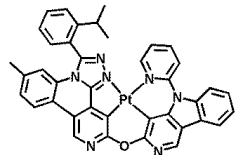
55



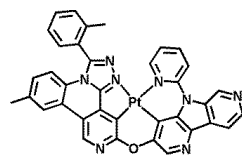
56



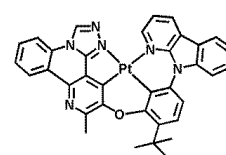
57



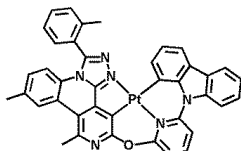
58



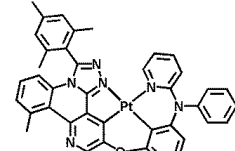
59



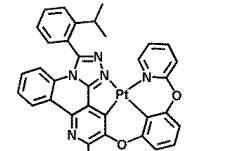
60



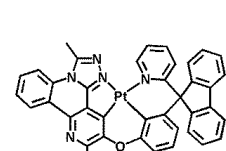
61



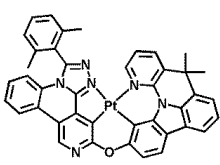
62



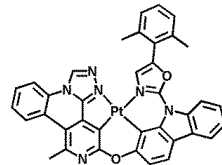
63



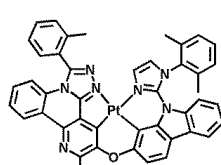
64



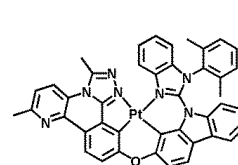
65



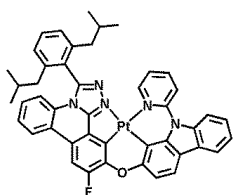
66



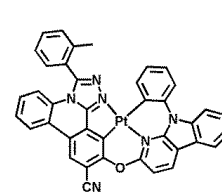
67



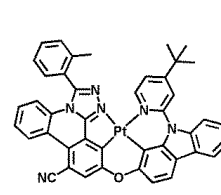
68



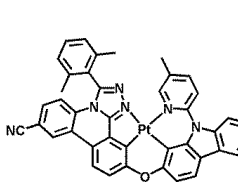
69



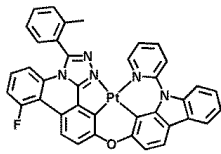
70



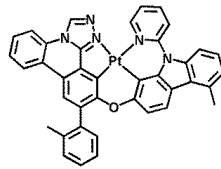
71



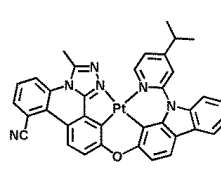
72



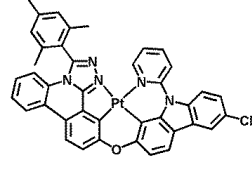
73



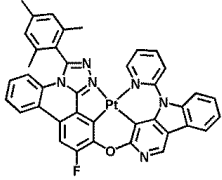
74



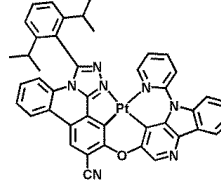
75



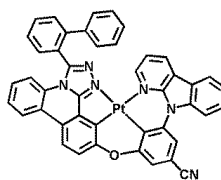
76



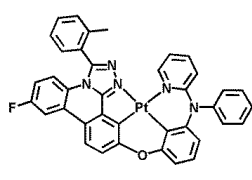
77



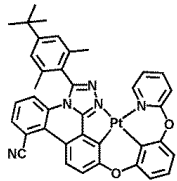
78



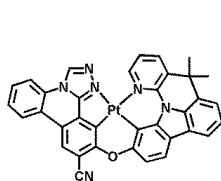
79



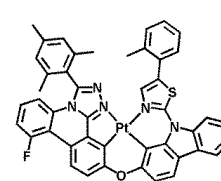
80



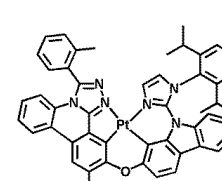
81



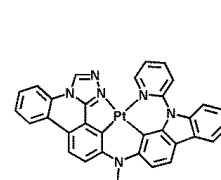
82



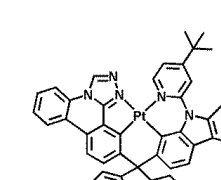
83



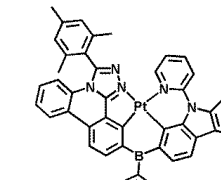
84



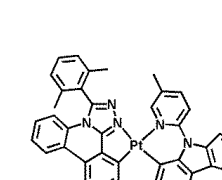
85



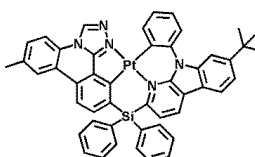
86



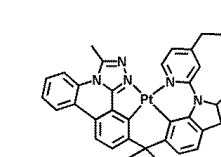
87



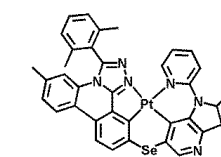
88



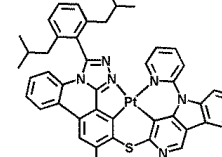
89



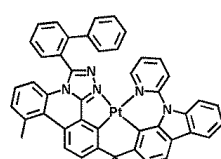
90



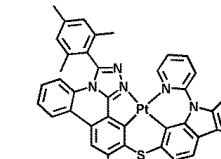
91



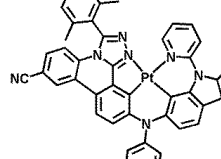
92



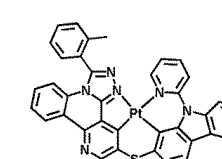
93



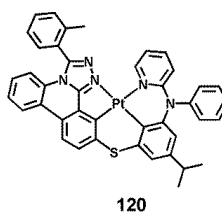
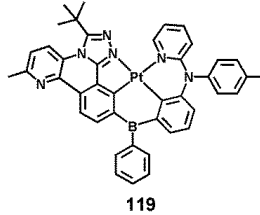
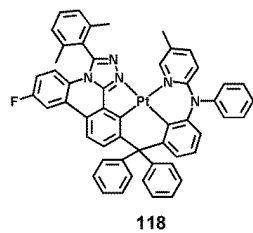
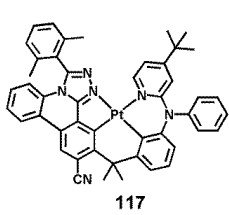
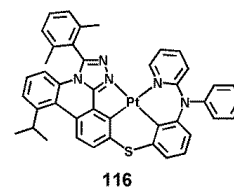
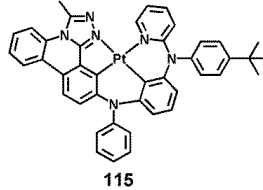
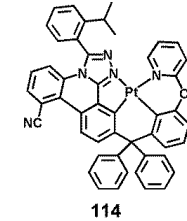
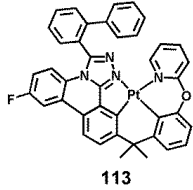
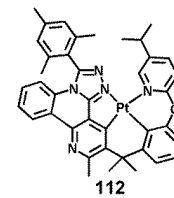
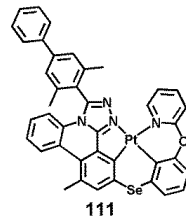
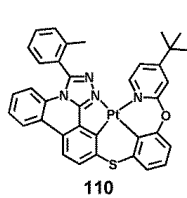
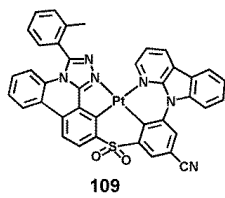
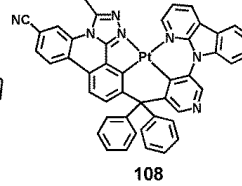
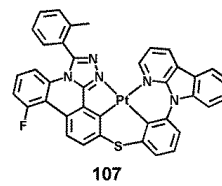
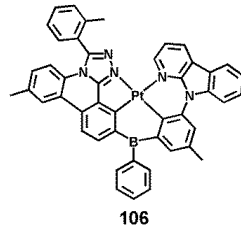
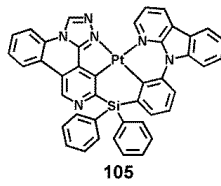
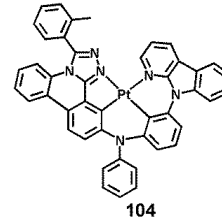
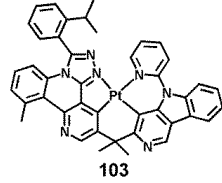
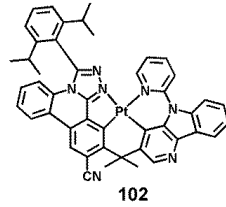
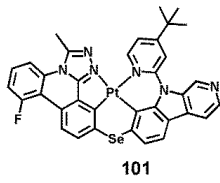
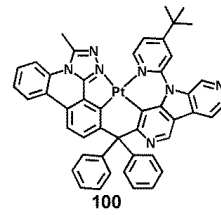
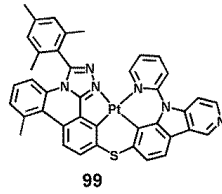
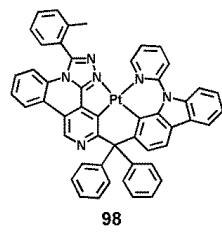
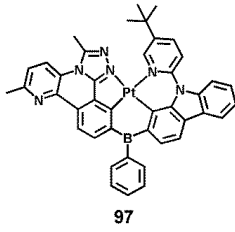
94

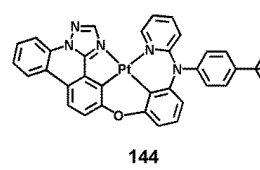
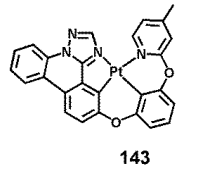
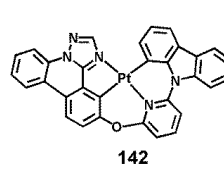
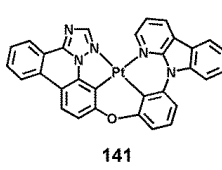
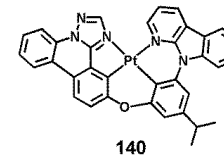
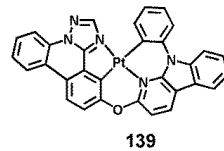
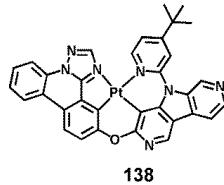
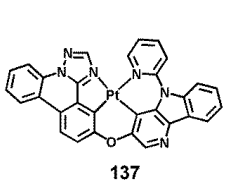
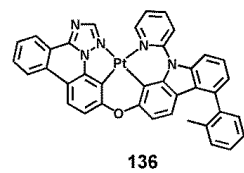
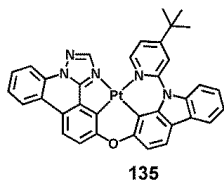
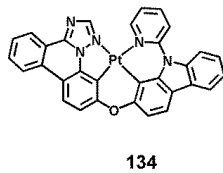
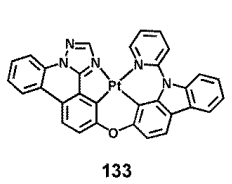
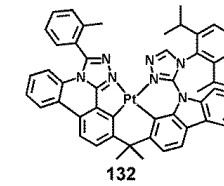
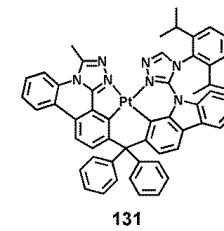
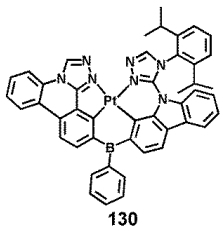
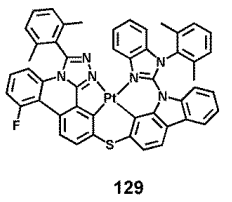
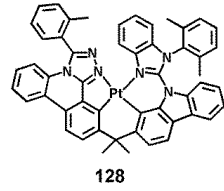
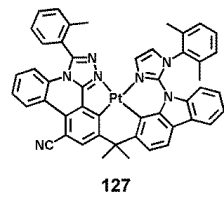
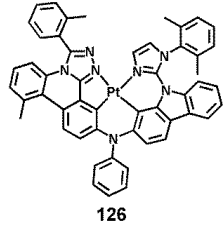
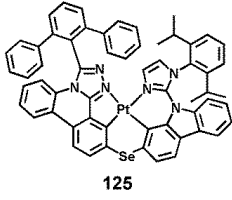
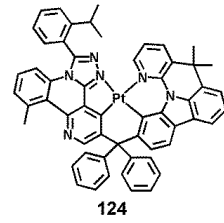
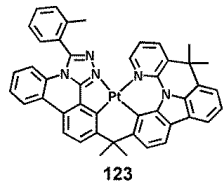
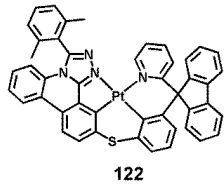
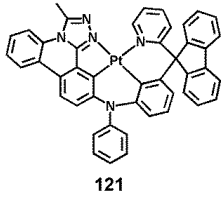


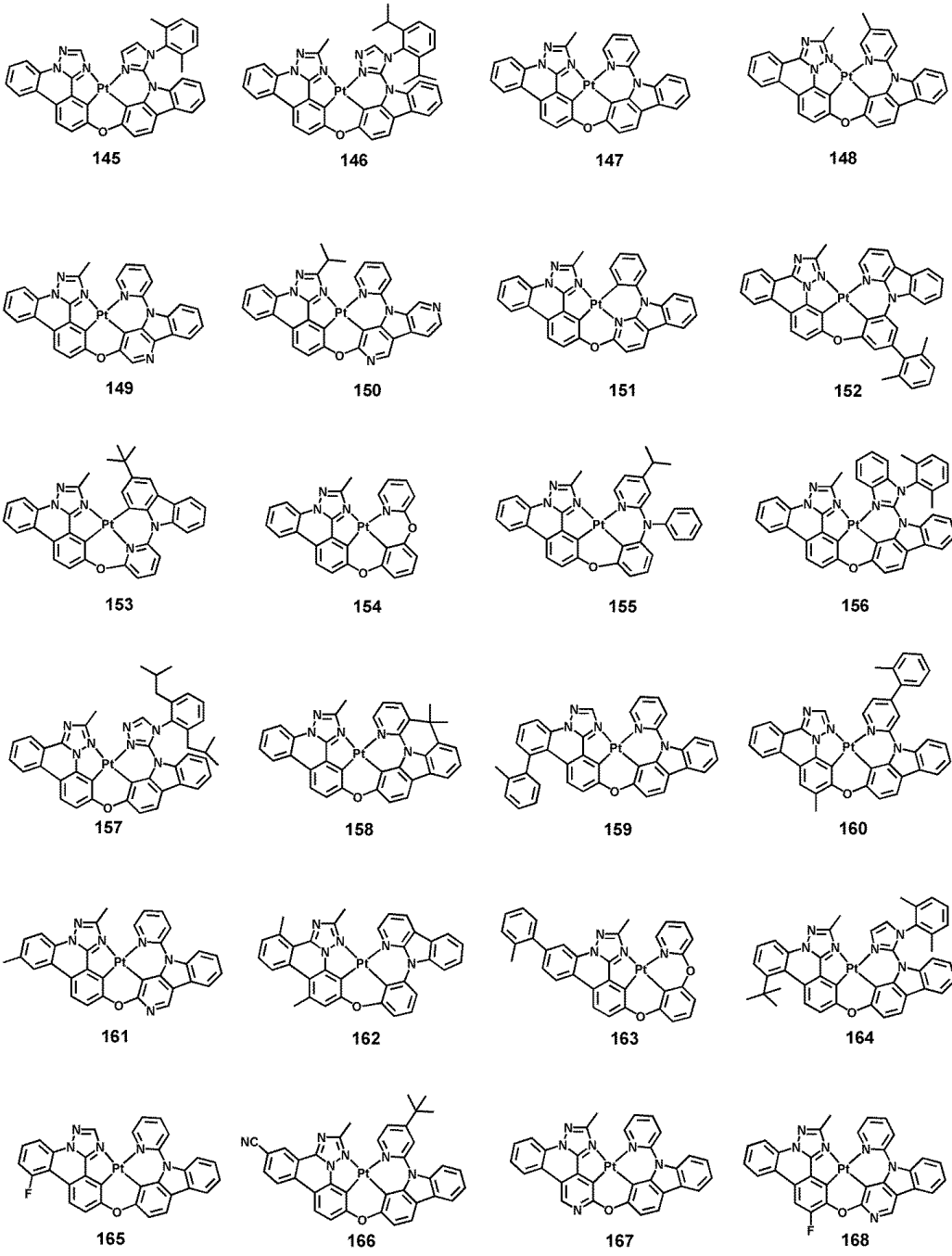
95

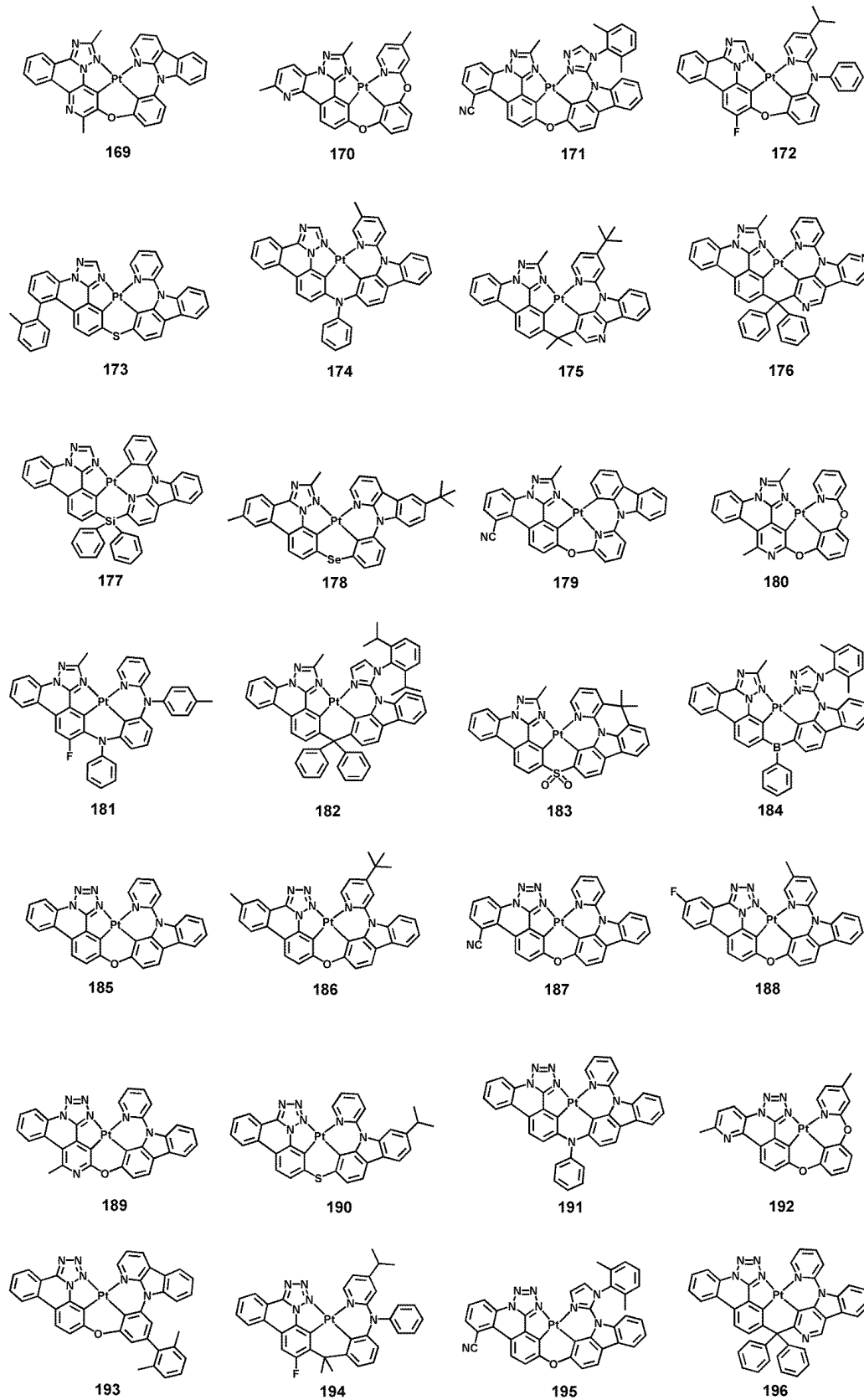


96









청구항 14

제1항에 있어서,

발광 스펙트럼 중 피크가 420nm 내지 500nm 범위의 최대 발광 파장 및 30nm 내지 80nm 범위의 반폭치비(FWHM)를 갖는, 유기금속 화합물.

청구항 15

제1전극;

제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 및 제4항 내지 제14항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 16

제15항에 있어서,

상기 제1전극은 애노드이고,

상기 제2전극은 캐소드이고,

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

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

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

청구항 17

제15항에 있어서,

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

청구항 18

제17항에 있어서,

상기 발광층으로부터 방출된 광이 청색광이고,

상기 청색광의 CIE y좌표가 0.10 내지 0.340 범위인, 유기 발광 소자.

청구항 19

제17항에 있어서,

상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 호스트의 함유 중량이 상기 유기금속 화합물의 함량보다 큰, 유기 발광 소자.

청구항 20

제1항 및 제4항 내지 제14항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 생물학적 물질의 모니터링, 센싱, 또는 검출용 조성물.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 이를 포함한 진단용 조성물이 제시된다.

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서, 시야각, 응답 시간, 휘도, 구동 전압

및 응답 속도 등이 우수하고, 다색화가 가능하다.

[0003] 일예에 따르면, 유기 발광 소자는, 애노드, 캐소드 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층 포함할 수 있다. 상기 애노드와 발광층 사이에는 정공 수송 영역이 구비될 수 있고, 상기 발광층과 캐소드 사이에는 전자 수송 영역이 구비될 수 있다. 상기 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자는 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

[0004] 한편, 각종 세포, 단백질 등과 같은 생물학적 물질의 모니터링, 센싱, 검출 등에도 발광 화합물, 예를 들면, 인광 발광 화합물이 사용될 수 있다.

발명의 내용

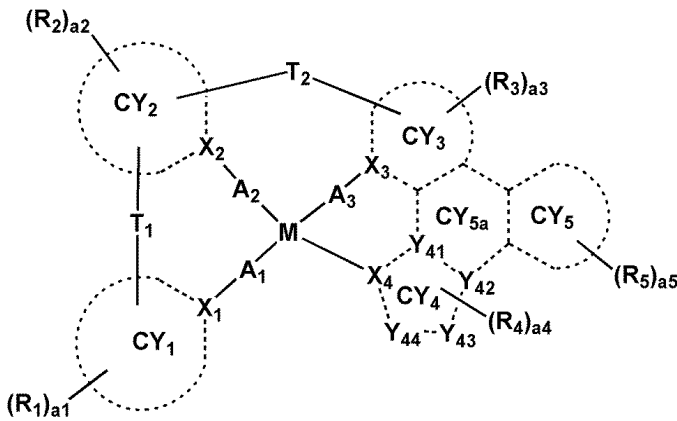
해결하려는 과제

[0005] 신규 유기금속 화합물, 이를 채용한 유기 발광 소자 및 이를 채용한 진단용 조성물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0006] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물이 제공된다:

[0007] <화학식 1>



[0008] [0009] 상기 화학식 1 중,

[0010] M은 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 칼슘(Ca), 티타늄(Ti), 망간(Mn), 코발트(Co), 구리(Cu), 아연(Zn), 갈륨(Ga), 게르마늄(Ge), 지르코늄(Zr), 루테튬(Ru), 로듐(Rh), 팔라듐(Pd), 은(Ag), 레늄(Re), 백금(Pt) 또는 금(Au)이고,

[0011] X₁ 내지 X₄, Y₄₁ 및 Y₄₂는 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

[0012] Y₄₃ 및 Y₄₄는 서로 독립적으로, C, N, O, S 또는 Si이고,

[0013] A₁ 내지 A₃는 서로 독립적으로, 화학 결합, O, S, B(R'), N(R'), P(R'), C(R')(R''), Si(R')(R''), Ge(R')(R''), C(=O), B(R')(R''), N(R')(R'') 또는 P(R')(R'')이고, A₁이 화학 결합일 경우, X₁과 M은 직접(directly) 결합하고, A₂가 화학 결합일 경우, X₂와 M은 직접 결합하고, A₃가 화학 결합일 경우, X₃와 M은 직접 결합하고,

[0014] X₁ 또는 A₁과 M 사이의 결합, X₂ 또는 A₂와 M 사이의 결합, X₃ 또는 A₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 2개는 배위 결합이고, 나머지 2개는 공유 결합이고,

[0015] 고리 CY₁ 내지 고리 CY₃ 및 고리 CY₅는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0016] 고리 CY₄는 5원환이고, 고리 CY₄의 X₄, Y₄₁, Y₄₂, Y₄₃ 및 Y₄₄ 중 3개 이상은 N이고,

- [0017] 고리 CY_{5a} 는 6원환이고,
- [0018] T_1 은 단일 결합, 이중 결합, $*-N(R_6)-*$, $*-B(R_6)-*$, $*-P(R_6)-*$, $*-C(R_6)(R_7)-*$, $*-Si(R_6)(R_7)-*$, $*-Ge(R_6)(R_7)-*$, $*-S-*$, $*-Se-*$, $*-O-*$, $*-C(=O)-*$, $*-S(=O)-*$, $*-S(=O)_2-*$, $*-C(R_6)=*$, $*=C(R_6)-*$, $*-C(R_6)=C(R_7)-*$, $*-C(=S)-*$ 또는 $*-C\equiv C-*$ 이고,
- [0019] T_2 는 단일 결합, 이중 결합, $*-N(R_8)-*$, $*-B(R_8)-*$, $*-P(R_8)-*$, $*-C(R_8)(R_9)-*$, $*-Si(R_8)(R_9)-*$, $*-Ge(R_8)(R_9)-*$, $*-S-*$, $*-Se-*$, $*-O-*$, $*-C(=O)-*$, $*-S(=O)-*$, $*-S(=O)_2-*$, $*-C(R_8)=*$, $*=C(R_8)-*$, $*-C(R_8)=C(R_9)-*$, $*-C(=S)-*$ 또는 $*-C\equiv C-*$ 이고,
- [0020] R_1 내지 R_9 , R' 및 R'' 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-SF_5$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 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_7-C_{60} 알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$, $-B(Q_6)(Q_7)$ 및 $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$ 중에서 선택되고,
- [0021] a_1 내지 a_3 및 a_5 는 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수 중에서 선택되고,
- [0022] a_4 는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,
- [0023] 서로 이웃한 복수의 R_1 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0024] 서로 이웃한 복수의 R_2 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0025] 서로 이웃한 복수의 R_3 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0026] 서로 이웃한 복수의 R_4 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0027] 서로 이웃한 복수의 R_5 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0028] R_1 내지 R_9 , R' 및 R'' 중 2개는 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a} 로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0029] 상기 R_{10a} 에 대한 설명은 상기 R_1 에 대한 설명을 참조하고,
- [0030] * 및 *'은 각각 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,
- [0031] 상기 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환된 C_7-C_{60} 알킬아릴기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환된 C_2-C_{60} 알킬헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방

방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0032] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0033] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅), -B(Q₁₆)(Q₁₇) 및 -P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0034] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0035] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅), -B(Q₂₆)(Q₂₇) 및 -P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0036] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), -B(Q₃₆)(Q₃₇) 및 -P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉);

[0037] 중에서 선택되고,

[0038] 상기 Q₁ 내지 Q₉, Q₁₁ 내지 Q₁₉, Q₂₁ 내지 Q₂₉ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0039] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0040] 상기 유기층 중 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 할 수 있다.

[0041] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

발명의 효과

[0042] 상기 유기금속 화합물은 우수한 전기적 특성 및/또는 열적 안정성을 갖는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한

유기 발광 소자는 향상된 발광 효율, 외부 양자 효율, 롤-오프비 및 수명 특성을 가질 수 있다. 또한, 상기 유기금속 화합물은 우수한 인광 발광 특성을 가지므로, 이를 이용하면, 높은 진단 효율을 갖는 진단용 조성물을 제공할 수 있다.

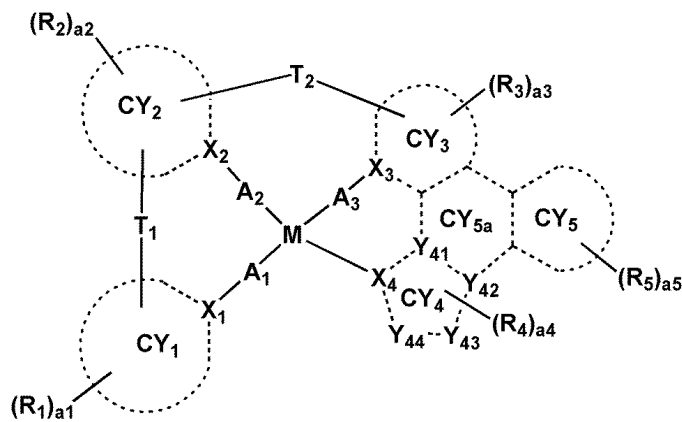
도면의 간단한 설명

- [0043] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.
- 도 2는 화합물 3 및 17의 PL 스펙트럼이다.
- 도 3은 실시예 1 및 비교예 A의 유기 발광 소자의 EL 스펙트럼이다.
- 도 4는 실시예 1의 유기 발광 소자의 구동전압-전류밀도 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0044] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0045] <화학식 1>



- [0046] 상기 화학식 1 중 M은 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 칼슘(Ca), 티타늄(Ti), 망간(Mn), 코발트(Co), 구리(Cu), 아연(Zn), 갈륨(Ga), 게르마늄(Ge), 지르코늄(Zr), 루테튬(Ru), 로듐(Rh), 팔라듐(Pd), 은(Ag), 레늄(Re), 백금(Pt) 또는 금(Au)일 수 있다.
- [0047] 일 구현예에 따르면, 상기 M은 Pt, Pd 또는 Au일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0048] 상기 화학식 1 중 X1 내지 X4, Y41 및 Y42는 서로 독립적으로, C 또는 N이고, Y43 및 Y44는 서로 독립적으로, C, N, O, S 또는 Si일 수 있다.
- [0049] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,
 - [0050] i) X1 및 X4는 N이고, X2 및 X3는 C이거나; 또는
 - [0051] ii) X1 및 X3는 C이고, X2 및 X4는 N일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0052] 상기 화학식 1 중 A1 내지 A3는 서로 독립적으로, 화학 결합(예를 들면, 배위 결합, 공유 결합 등), O, S, B(R'), N(R'), P(R'), C(R')(R''), Si(R')(R''), Ge(R')(R''), C(=O), B(R')(R''), N(R')(R'') 또는 P(R')(R'')이고, A1이 화학 결합일 경우, X1과 M은 직접(directly) 결합하고, A2가 화학 결합일 경우, X2와 M은 직접 결합하고, A3가 화학 결합일 경우, X3와 M은 직접 결합할 수 있다. 상기 R' 및 R''에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0053] 상기 화학식 1 중 X1 또는 A1과 M 사이의 결합, X2 또는 A2와 M 사이의 결합, X3 또는 A3와 M 사이의 결합 및 X4와 M 사이의 결합 중 2개는 배위 결합이고, 나머지 2개는 공유 결합일 수 있다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 전기적으로 중성(neutral)일 수 있다.
- [0054] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,

- [0056] A₁ 내지 A₃는 화학 결합이고,
- [0057] i) X₁과 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합이거나; 또는
- [0058] ii) X₁과 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0059] 상기 화학식 1 중 고리 CY₁ 내지 고리 CY₃ 및 고리 CY₅는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹이고, 고리 CY₄는 5원환이고, 고리 CY_{5a}는 6원환일 수 있다. 여기서, 상기 고리 CY₄의 X₄, Y₄₁, Y₄₂, Y₄₃ 및 Y₄₄ 중 3개 이상(예를 들면, 3개 또는 4개)은 N일 수 있다.
- [0060] 일 구현예에 따르면, 상기 고리 CY₁ 내지 고리 CY₃ 및 고리 CY₅는, 서로 독립적으로, i) 제1고리, ii) 제2고리, iii) 2 이상의 제1고리가 서로 축합된 축합환, iv) 2 이상의 제2고리가 서로 축합된 축합환 및 v) 1 이상의 제1고리와 1 이상의 제2고리가 서로 축합된 축합환 중에서 선택되고, 상기 제1고리는 시클로펜탄 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹 및 트리아자실롤 그룹 중에서 선택되고, 상기 제2고리는 아다만탄(admantane) 그룹, 노르보르난(norbornane) 그룹, 노르보르넨 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헥센 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹 및 트리아진 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0061] 다른 구현예에 따르면, 상기 고리 CY₁ 내지 고리 CY₃ 및 고리 CY₅는, 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저물 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저물 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저물 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 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) 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0062] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,
- [0063] 고리 CY₁은 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹, 트리아자실롤 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 카바졸 그룹 또는 아자카바졸 그룹이고, 및/또는
- [0064] 고리 CY₂는 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 카바졸 그룹 또는 아자카바졸 그룹이고, 및/또는
- [0065] 고리 CY₃ 및 고리 CY₅는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹 또는 트리아진 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0066] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 고리 CY₄는 트리아졸 그룹 또는 테트라졸 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0067] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Y₄₃은 N일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0068] 상기 화학식 1 중, T₁은 단일 결합, 이중 결합, *-N(R₆)-*', *-B(R₆)-*', *-P(R₆)-*', *-C(R₆)(R₇)-*', *-Si(R₆)(R₇)-*', *-Ge(R₆)(R₇)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-S(=O)₂-*', *-C(R₆)=*', *=C(R₆)-*', *-C(R₆)=C(R₇)-*', *-C(=S)-*' 또는 *-C≡C-*'이고, T₂는 단일 결합, 이중 결합, *-N(R₈)-*', *-B(R₈)-*', *-P(R₈)-*', *-C(R₈)(R₉)-*', *-Si(R₈)(R₉)-*', *-Ge(R₈)(R₉)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-S(=O)₂-*', *-C(R₈)=*', *=C(R₈)-*', *-C(R₈)=C(R₉)-*', *-C(=S)-*' 또는 *-C≡C-*'일 수 있다. 상기 R₆ 내지 R₉에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다. 상기 R₆과 R₇은 선택적으로(optionally), 단일 결합, 이중 결합, *-N(R_{8c})-*', *-B(R_{8c})-*', *-P(R_{8c})-*', *-C(R_{8c})(R_{9c})-*', *-Si(R_{8c})(R_{9c})-*', *-S-*', *-Se-*' 또는 *-O-*'를 통하여 서로 결합하여 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, 상기 R₈과 R₉는 선택적으로(optionally), 단일 결합, 이중 결합, *-N(R_{8c})-*', *-B(R_{8c})-*', *-P(R_{8c})-*', *-C(R_{8c})(R_{9c})-*', *-Si(R_{8c})(R_{9c})-*', *-S-*', *-Se-*' 또는 *-O-*'를 통하여 서로 결합하여 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다. 상기 R_{8c} 및 R_{9c}에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₈ 및 R₉에 대한 설명을 참조하고, "C₅-C₃₀카보시클릭 그룹" 및 "C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹"에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 고리 CY₁에 대한 설명을 참조하고, R_{10a}에 대한 설명은 본 명세서 중 R₁에 대한 설명을 참조한다.
- [0069] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 T₂는 *-N(R₈)-*', *-B(R₈)-*', *-P(R₈)-*', *-C(R₈)(R₉)-*', *-Si(R₈)(R₉)-*', *-Ge(R₈)(R₉)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-S(=O)₂-*', *-C(R₈)=*', *=C(R₈)-*' 또는 *-C(=S)-*'이고, A₁ 내지 A₃는 화학 결합일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0070] 상기 R₁ 내지 R₉, R' 및 R"는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₇-C₆₀알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로 축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 및 -P(=O)(Q₈)(Q₉) 중에서 선택될 수 있다.
- [0071] 일 구현예에 따르면, 상기 R₁ 내지 R₉, R' 및 R"은 서로 독립적으로,
- [0072] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, -SF₅, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0073] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시

기;

[0074] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, C₁-C₂₀알킬페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0075] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, C₁-C₂₀알킬페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, C₁-C₂₀알킬페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0076] -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 및 -P(=O)(Q₈)(Q₉);

[0077] 중에서 선택되고,

[0078] Q₁ 내지 Q₉는 서로 독립적으로,

[0079] -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CH₂CH₃, -CH₂CD₃, -CH₂CD₂H, -CH₂CDH₂, -CHDCH₃, -CHDCD₂H, -CHDCDH₂, -CHDCD₃, -CD₂CD₃, -CD₂CD₂H 및 -CD₂CDH₂;

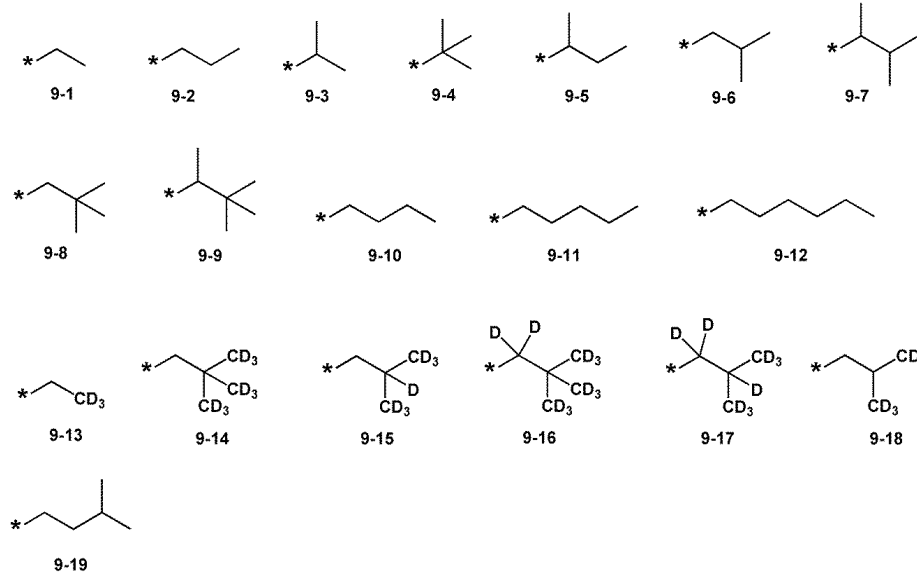
[0080] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

[0081] 중수소, C₁-C₁₀알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

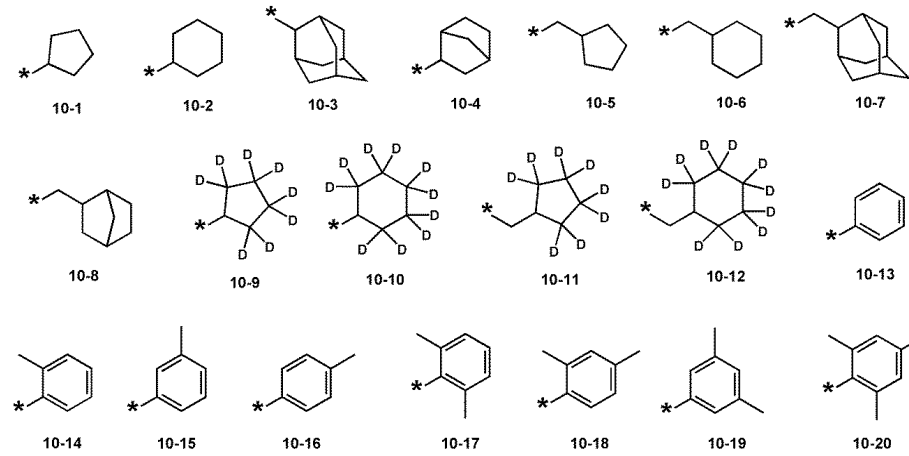
[0082] 중에서 선택될 수 있다.

[0083] 다른 구현예에 따르면, 상기 R₁ 내지 R₉, R' 및 R''은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF₅, -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 하기 화학식 9-1 내지 9-19로 표시되는 그룹 및 하기 화학

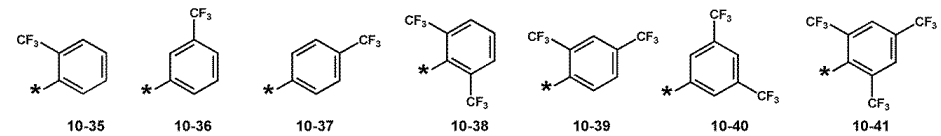
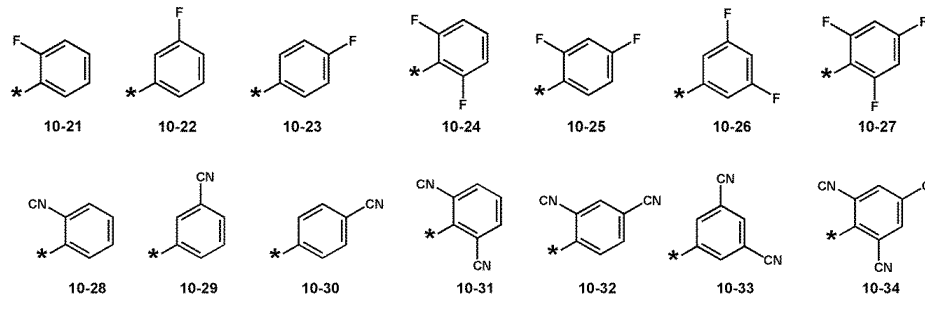
식 10-1 내지 10-227로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



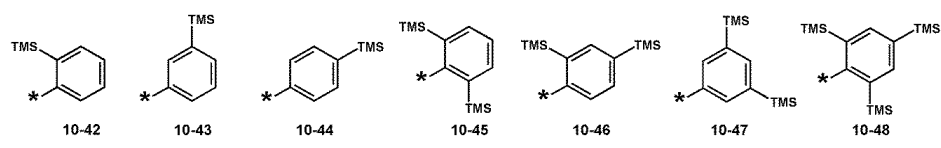
[0084]

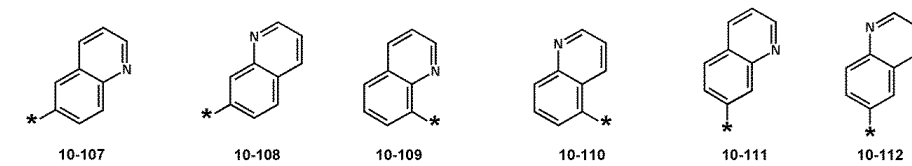
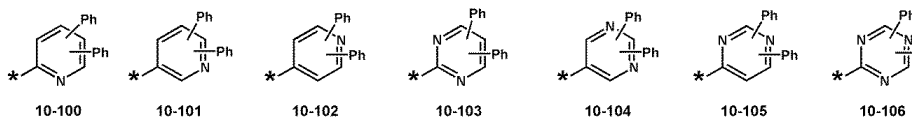
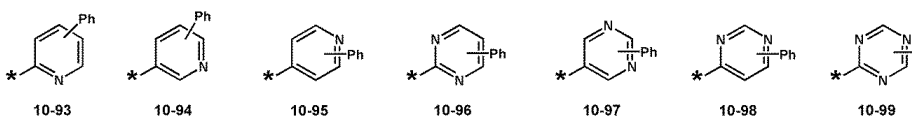
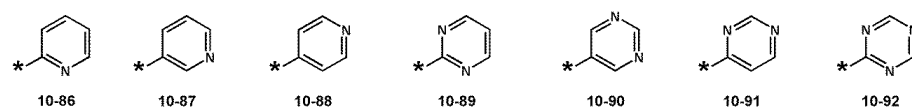
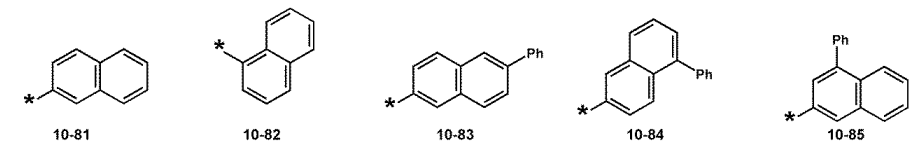
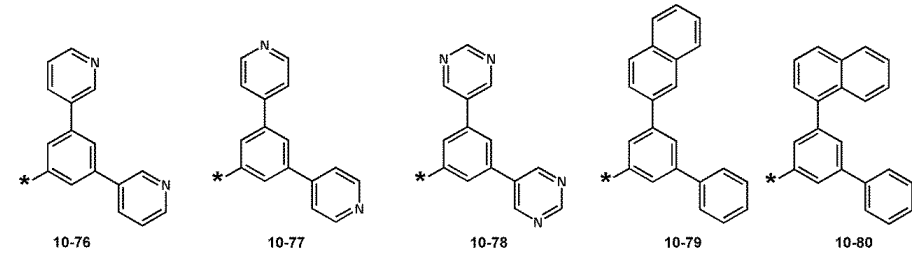
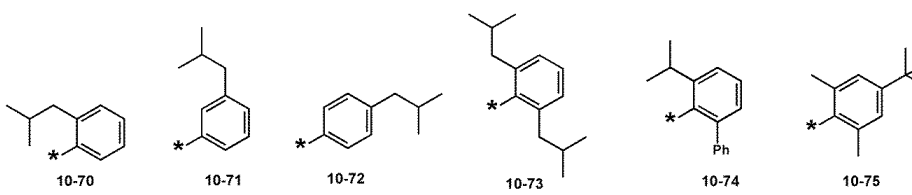
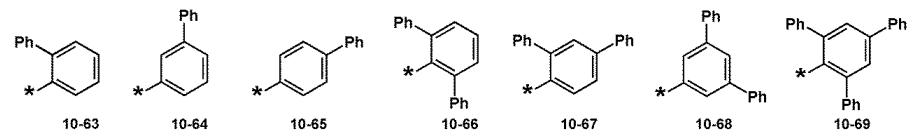
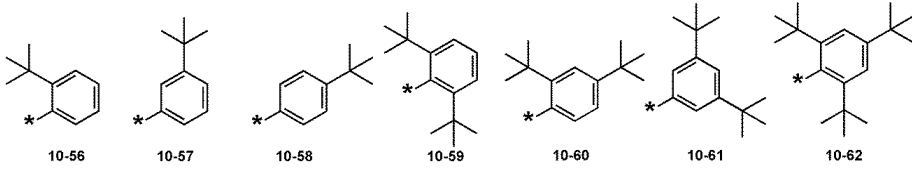
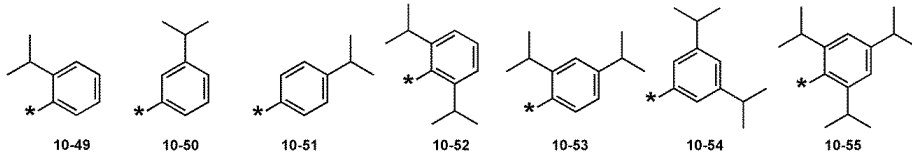


[0085]



[0086]

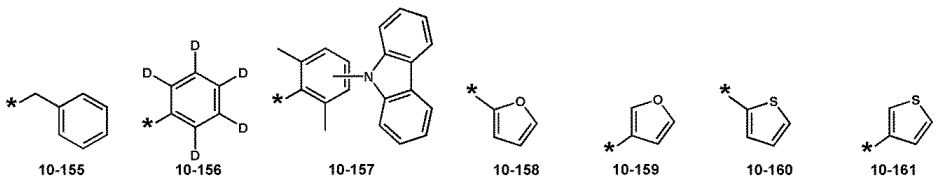
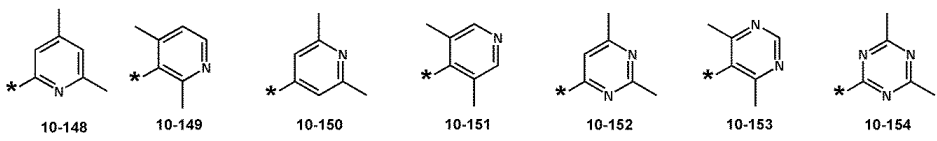
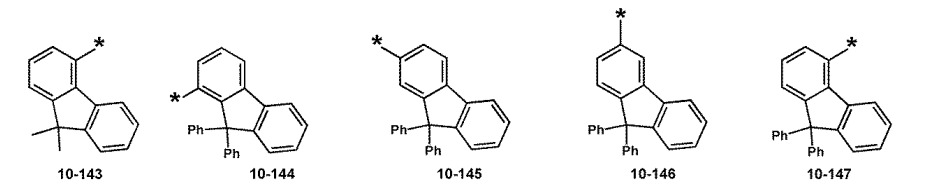
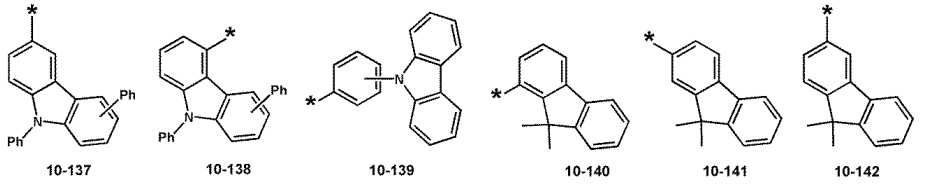
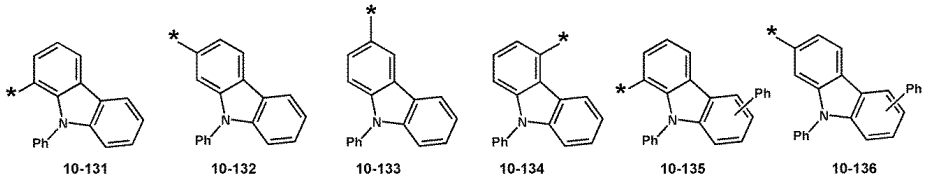
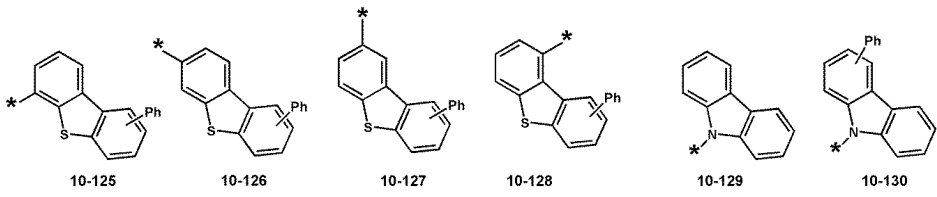
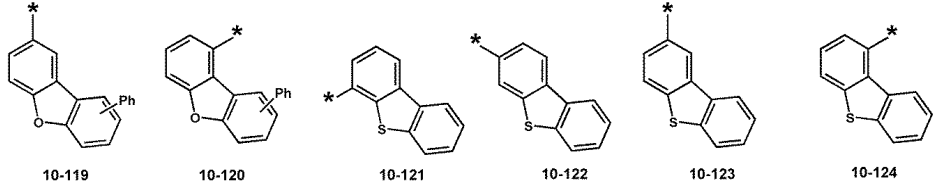
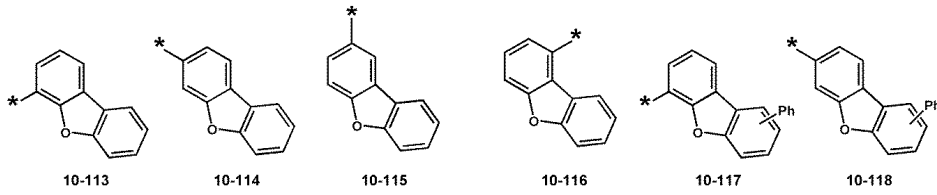




[0087]

[0088]

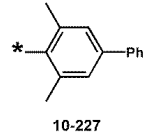
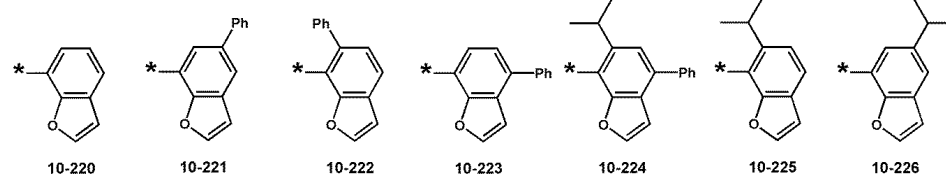
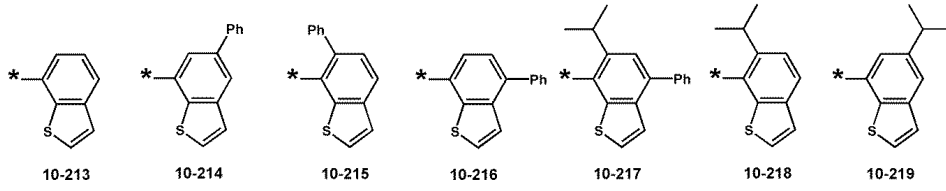
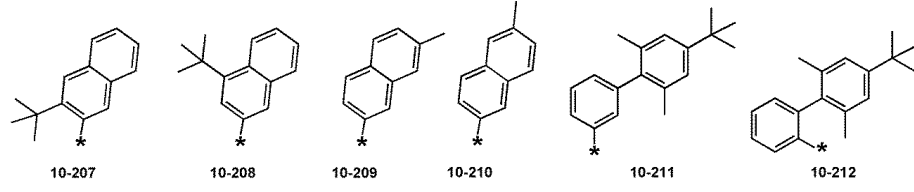
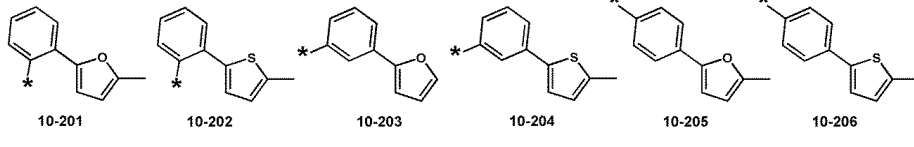
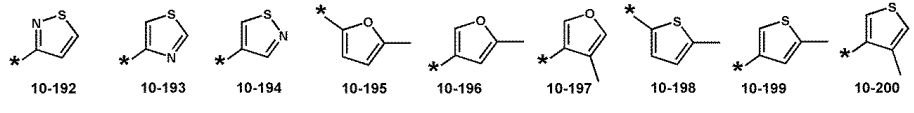
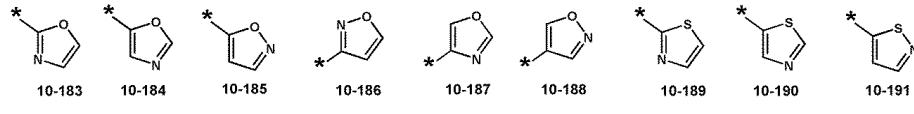
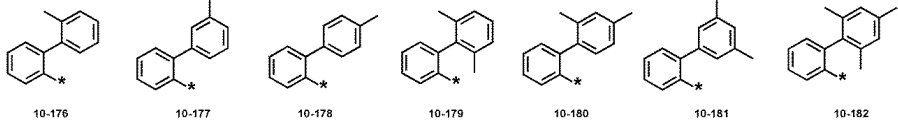
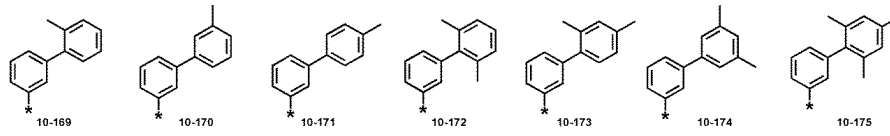
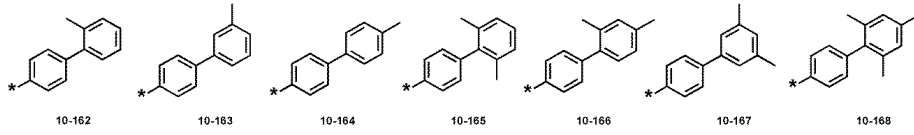
[0089]



[0090]

[0091]

[0092]



[0093]

[0094]

[0095]

[0096] 상기 화학식 9-1 내지 9-19 및 10-1 내지 10-227 중 *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고, Ph는 페닐기이고, TMS는 트리메틸실릴기이다.

[0097] 상기 화학식 1 중 a1 내지 a3 및 a5는 각각 R₁ 내지 R₃ 및 R₅의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수(예를 들면, 0 내지 7의 정수) 중에서 선택되고, a4는 R₄의 개수를 나타낸 것으로서, 0 내지 2의 정수 중에서 선택될 수 있다. 상기 a1이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁은 서로 동일하거나 상이하고, 상기 a2가 2

이상일 경우 2 이상의 R₂는 서로 동일하거나 상이하고, 상기 a₃가 2 이상일 경우 2 이상의 R₃는 서로 동일하거나 상이하고, 상기 a₄가 2 이상일 경우 2 이상의 R₄는 서로 동일하거나 상이하고, 상기 a₅가 2 이상일 경우 2 이상의 R₅는 서로 동일하거나 상이하다.

[0098] 상기 화학식 1 중, i) 서로 이웃한 복수의 R₁ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, ii) 서로 이웃한 복수의 R₂ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, iii) 서로 이웃한 복수의 R₃ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, iv) 서로 이웃한 복수의 R₄ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, v) 서로 이웃한 복수의 R₅ 중 2개는, 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, vi) R₁ 내지 R₉, R' 및 R" 중 2개는 선택적으로 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_{10a}로 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다. 여기서, "C₅-C₃₀카보시클릭 그룹" 및 "C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹"에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 고리 CY₁에 대한 설명을 참조하고, R_{10a}에 대한 설명은 본 명세서 중 R₁에 대한 설명을 참조한다.

[0099] 상기 * 및 *'은 각각 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0100] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은,

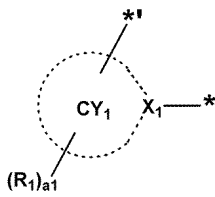
[0101] a) 하기 <조건 1>, <조건 2> 및 <조건 3> 중 하나를 만족하거나;

[0102] b) 하기 <조건 4> 및 <조건 5> 중 하나를 만족하거나; 또는

[0103] c) 하기 <조건 1>, <조건 2> 및 <조건 3> 중 하나를 만족하고, 하기 <조건 4> 및 <조건 5> 중 하나를 만족할 수 있다:

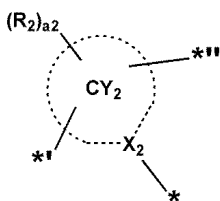
[0104] <조건 1>

[0105] A₁ 및 A₂는 화학 결합이고,



[0106] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A1-1로 표시되고,

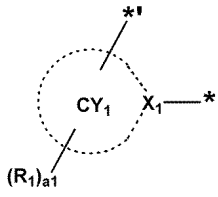
[0107] T₁은 *-N(R₆)-*', *-B(R₆)-*', *-P(R₆)-*', *-C(R₆)(R₇)-*', *-Si(R₆)(R₇)-*', *-Ge(R₆)(R₇)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-S(=O)₂-*', *-C(R₆)=*', *=C(R₆)-*', *-C(R₆)=C(R₇)-*', *-C(=S)-*' 또는 *-C≡C-*'이고,



[0108] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-1로 표시됨

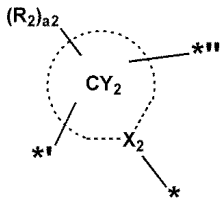
[0109] <조건 2>

[0110] A₁ 및 A₂는 화학 결합이고,



[0111] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A1-2로 표시되고,

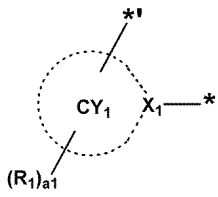
[0112] T₁은 단일 결합이고,



[0113] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-1로 표시됨

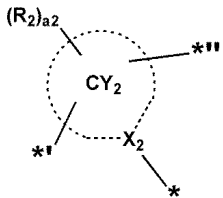
[0114] <조건 3>

[0115] A₁ 및 A₂는 화학 결합이고,



[0116] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A1-1로 표시되고,

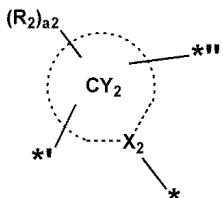
[0117] T₁은 단일 결합이고,



[0118] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-3으로 표시됨

[0119] <조건 4>

[0120] A₂ 및 A₃은 화학 결합이고,

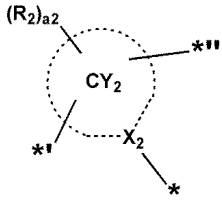


[0121] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-1로 표시되고,

[0122] T₂는 *-N(R₈)-*', *-B(R₈)-*', *-P(R₈)-*', *-C(R₈)(R₉)-*', *-Si(R₈)(R₉)-*', *-Ge(R₈)(R₉)-*', *-S-*', *-Se-*, *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-S(=O)₂-*', *-C(R₈)=*', *=C(R₈)-*', *-C(R₈)=C(R₉)-*', *-C(=S)-*' 또는 *-C≡C-*'임

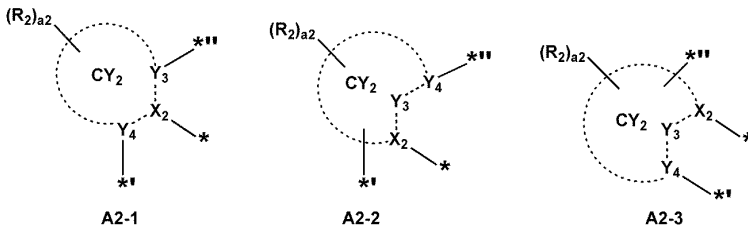
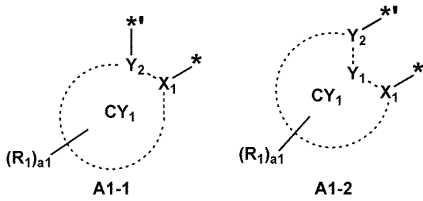
[0123] <조건 5>

[0124] A₂ 및 A₃은 화학 결합이고,



[0125] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-2로 표시되고,

[0126] T₂는 단일 결합임



[0127]

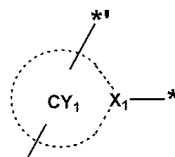
[0128] 상기 화학식 A1-1, A1-2, A2-1, A2-2 및 A2-3 중

[0129] X₁, X₂, 고리 CY₁, 고리 CY₂, R₁, R₂, a1 및 a2에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바를 참조하고, Y₁ 내지 Y₄는 서로 독립적으로, C 또는 N이고, X₁과 Y₂ 사이의 결합, Y₁과 Y₂ 사이의 결합, X₂와 Y₄ 사이의 결합, X₂와 Y₃ 사이의 결합 및 Y₃와 Y₄ 사이의 결합은 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 이중 결합이고,

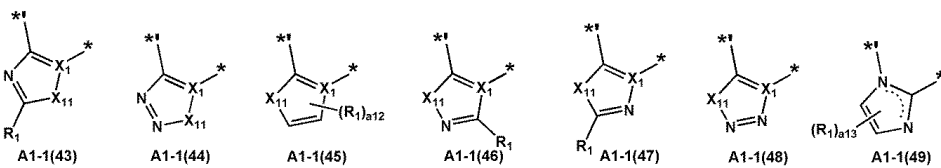
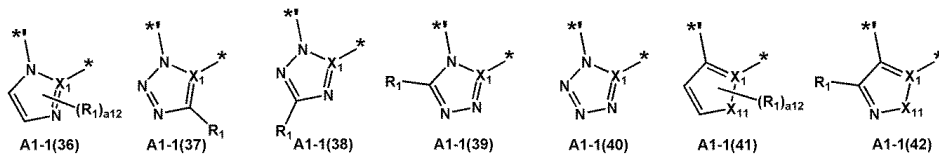
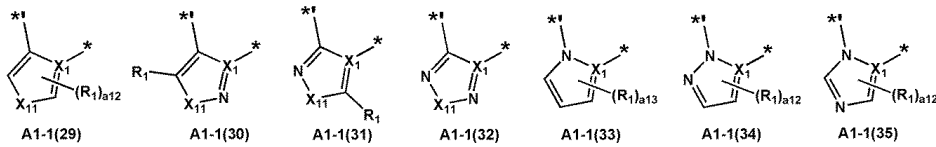
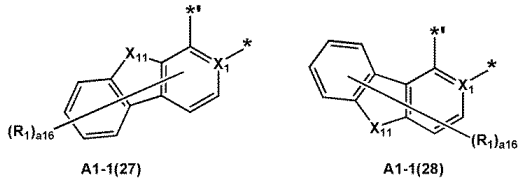
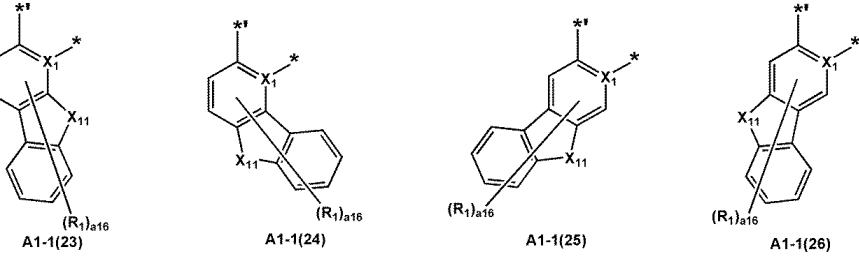
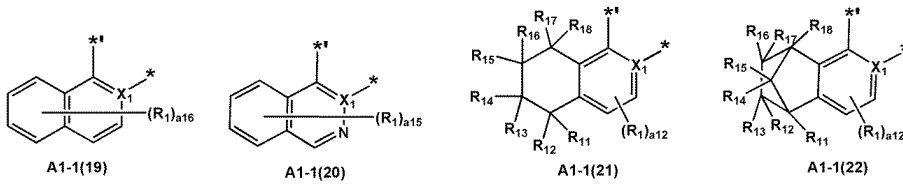
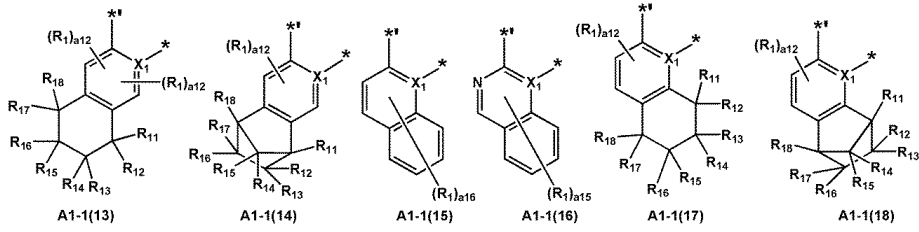
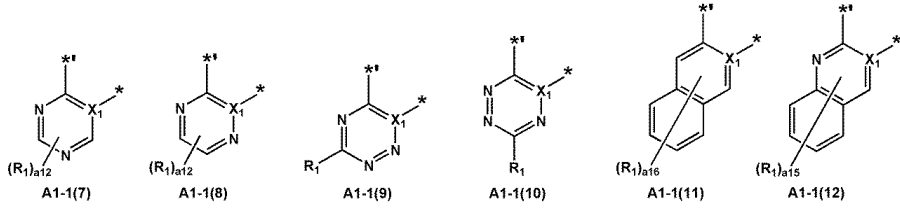
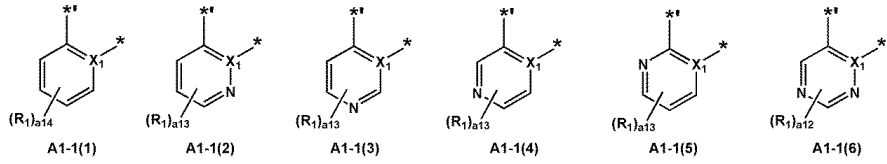
[0130] 상기 화학식 A1-1 및 A1-2 중 *는 화학식 1 중 A₁ 또는 M과의 결합 사이트이고 *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고,

[0131] 상기 화학식 A2-1, A2-2 및 A2-3 중 *는 화학식 1 중 A₂ 또는 M과의 결합 사이트이고 *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고, *''은 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이다.

[0132] 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물이, a) 상기 <조건 1>, <조건 2> 및 <조건 3> 중 하나를 만족하거나; b) 상기 <조건 4> 및 <조건 5> 중 하나를 만족하거나; 또는 c) 상기 <조건 1>, <조건 2> 및 <조건 3> 중 하나를 만족하고, 하기 <조건 4> 및 <조건 5> 중 하나를 만족함으로써, 화학식 1의 M, 고리 CY₁ 및 고리 CY₂가 이루는 시클로메탈화 고리(cyclometalated ring) 및/또는 화학식 1의 M, 고리 CY₂ 및 고리 CY₃이 이루는 시클로메탈화 고리가 6원환이 될 수 있다. 이로써, 상기 유기금속 화합물 중 X₁-M-X₂ 사이의 각 및/또는 X₂-M-X₃ 사이의 각이 입체 장애가 최소화되는 금소착제 구조를 형성하여 물질의 구조적 안정성이 유지된 평면 사배위 구조를 가질 수 있는 바, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 우수한 구조적 안정성을 가질 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 장수명을 가질 수 있다.



[0133] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 (R₁)_{a1} 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A1-1(1) 내지 A1-1(54) 및 A1-2(1) 내지 A1-2(74) 중 하나로 표시될 수 있다:

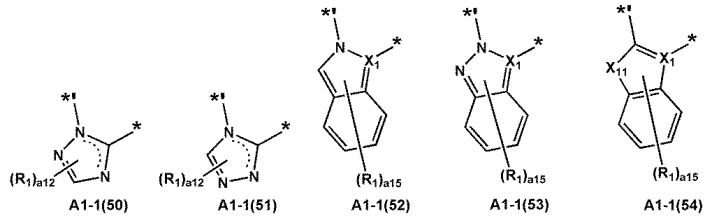


[0134]

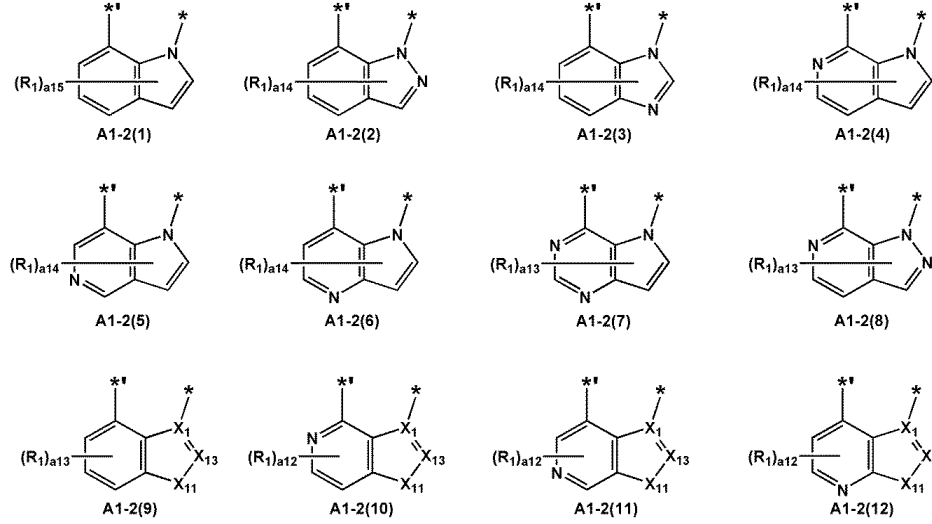
[0135]

[0136]

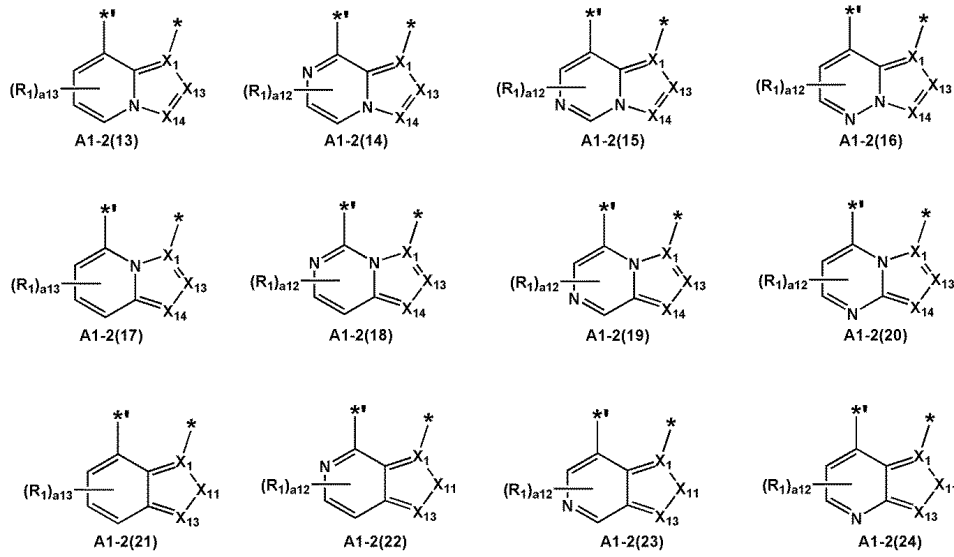
[0137]



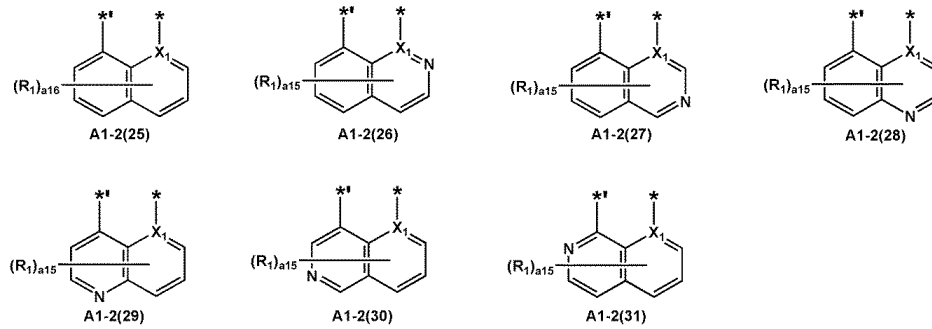
[0138]

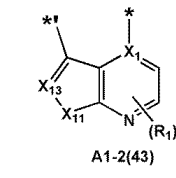
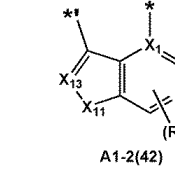
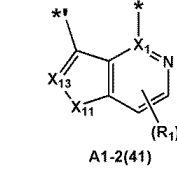
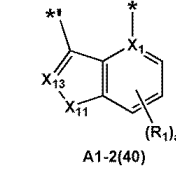
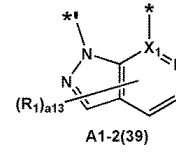
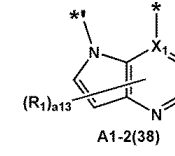
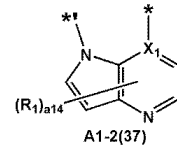
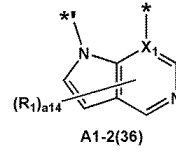
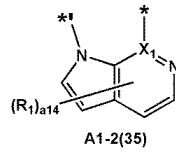
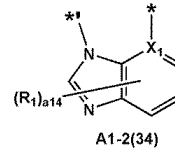
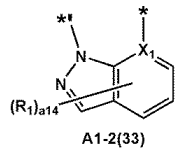
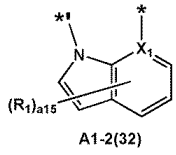


[0139]

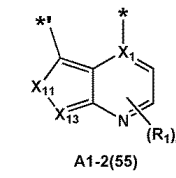
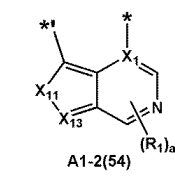
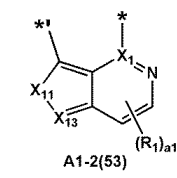
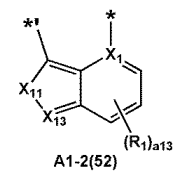
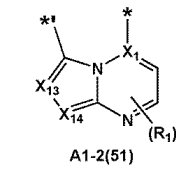
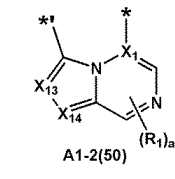
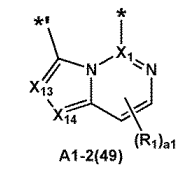
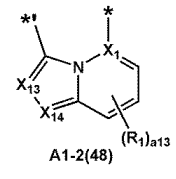
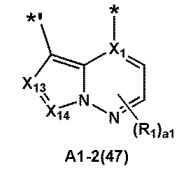
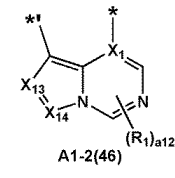
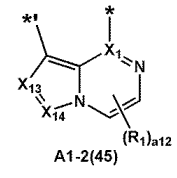
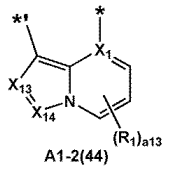


[0140]

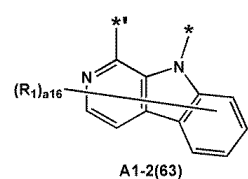
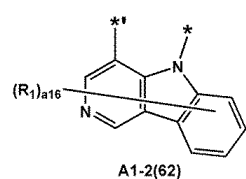
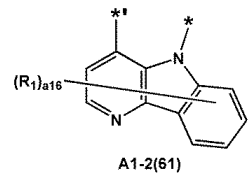
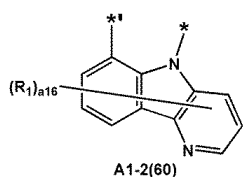
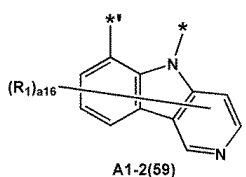
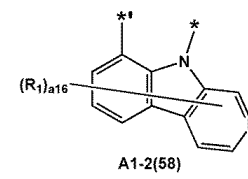
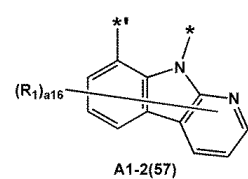
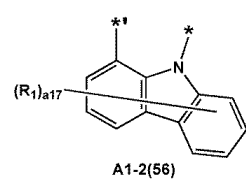




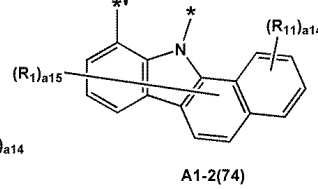
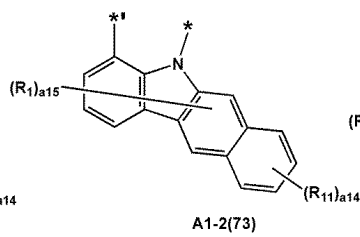
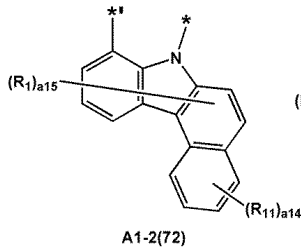
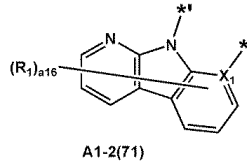
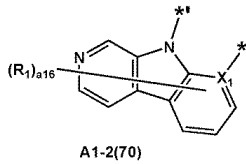
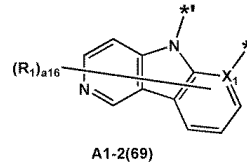
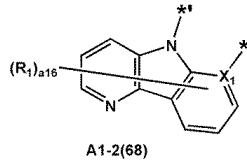
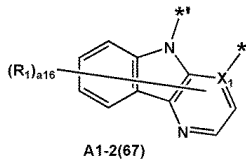
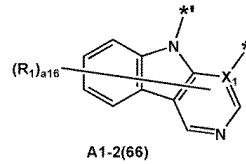
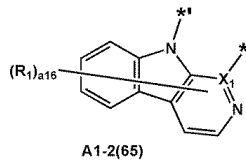
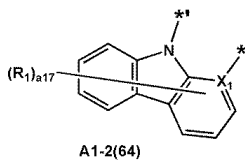
[0141]



[0142]



[0143]



[0144]

[0145]

[0146]

[0147]

[0148]

[0149]

[0150]

[0151]

[0152]

[0153]

[0154]

[0155]

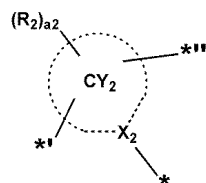
[0156]

[0157]

[0158]

[0159]

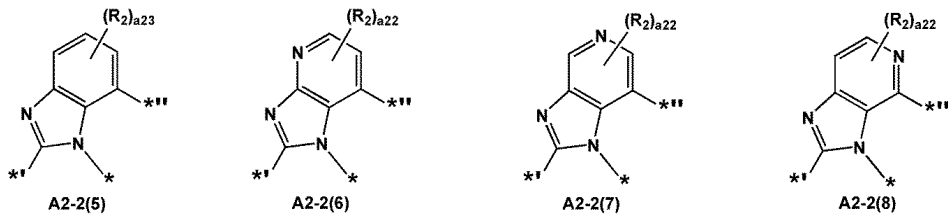
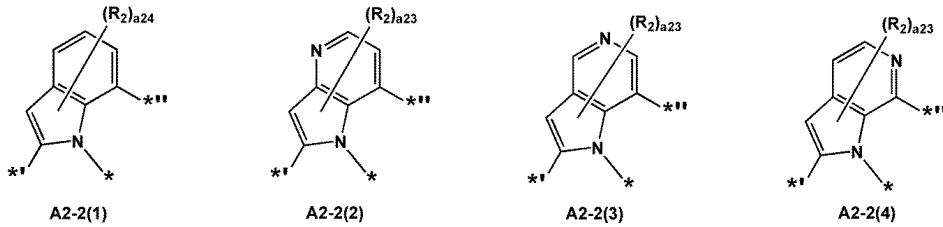
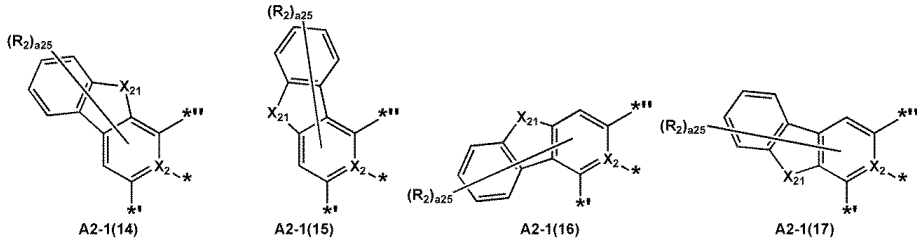
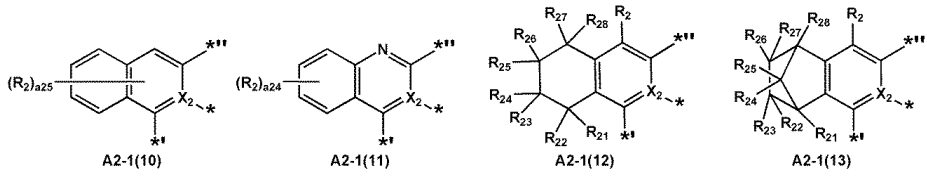
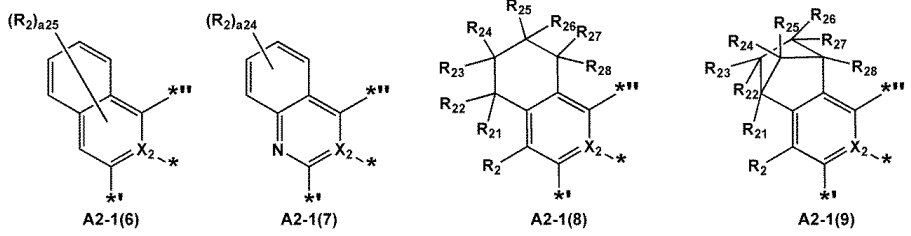
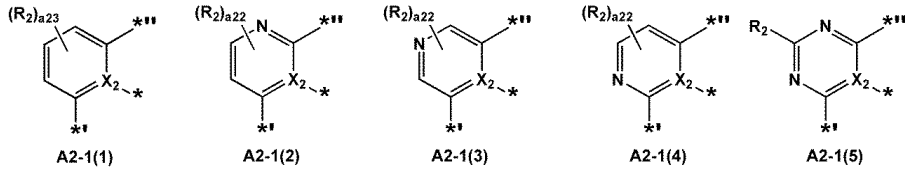
상기 화학식 A1-1(1) 내지 A1-1(54) 및 A1-2(1) 내지 A1-2(74) 중,
 X_1 및 R_1 에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,
 X_{11} 은 O, S, N(R_{11}), C(R_{11})(R_{12}) 또는 Si(R_{11})(R_{12})이고,
 X_{13} 은 N 또는 C(R_{13})이고,
 X_{14} 는 N 또는 C(R_{14})이고,
 R_{11} 내지 R_{18} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_1 에 대한 설명을 참조하고,
 a_{17} 은 0 내지 7의 정수 중에서 선택되고,
 a_{16} 은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,
 a_{15} 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
 a_{14} 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,
 a_{13} 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
 a_{12} 는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,
 $*$ 는 화학식 1 중 A_1 또는 M 과의 결합 사이트이고,
 $*'$ 은 화학식 1 중 T_1 과의 결합 사이트이다.



[0160]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-1(1) 내지

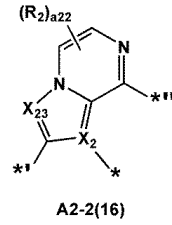
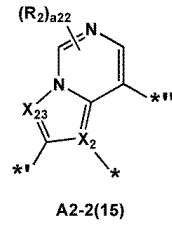
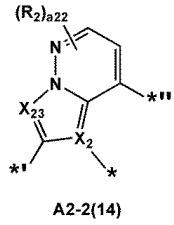
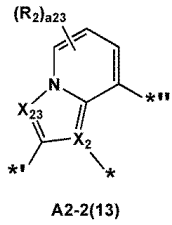
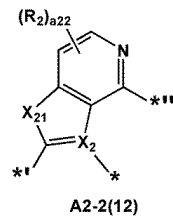
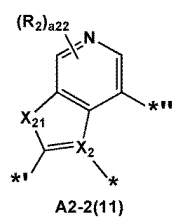
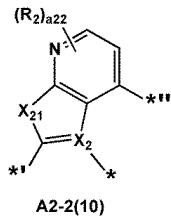
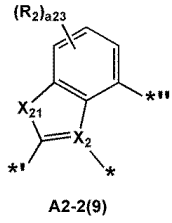
A2-1(17), A2-2(1) 내지 A2-2(58) 및 A2-3(1) 내지 A2-3(62) 중 하나로 표시될 수 있다:



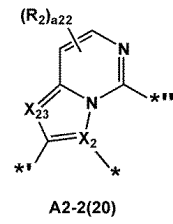
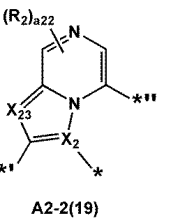
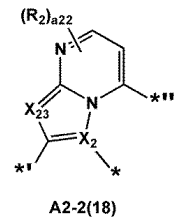
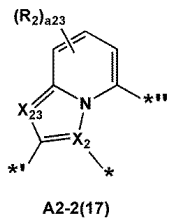
[0161]

[0162]

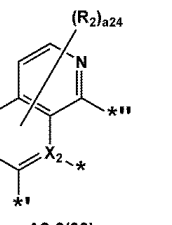
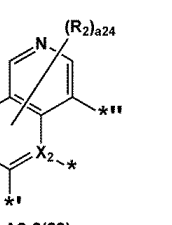
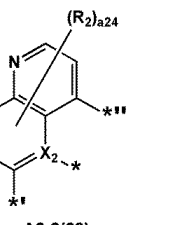
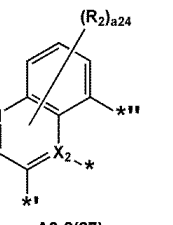
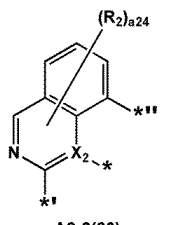
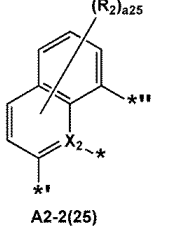
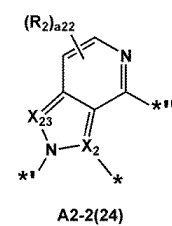
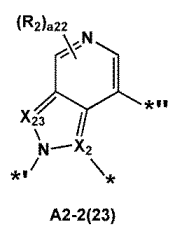
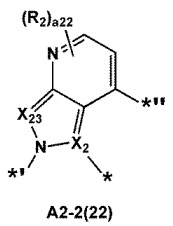
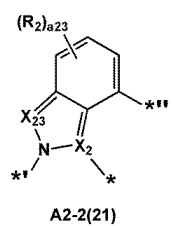
[0163]



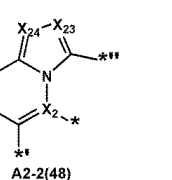
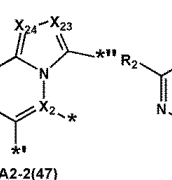
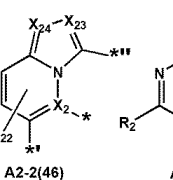
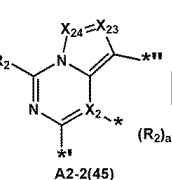
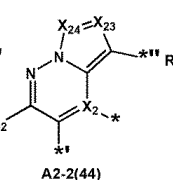
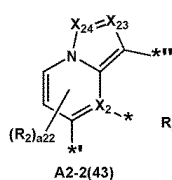
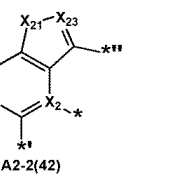
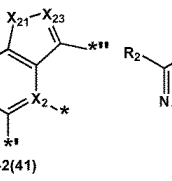
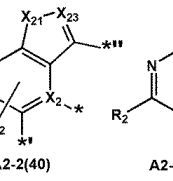
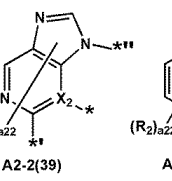
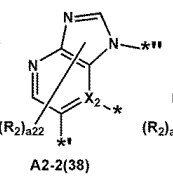
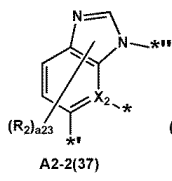
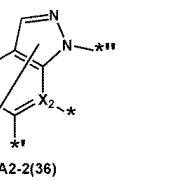
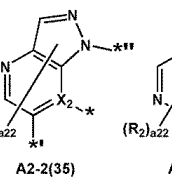
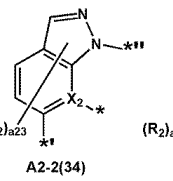
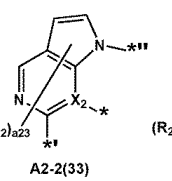
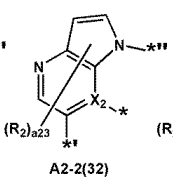
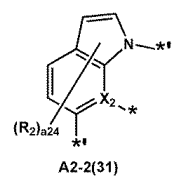
[0164]



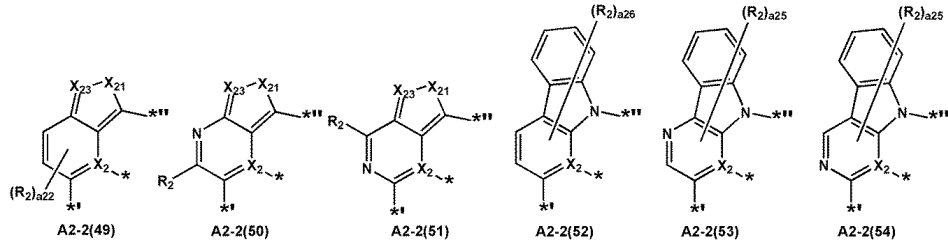
[0165]



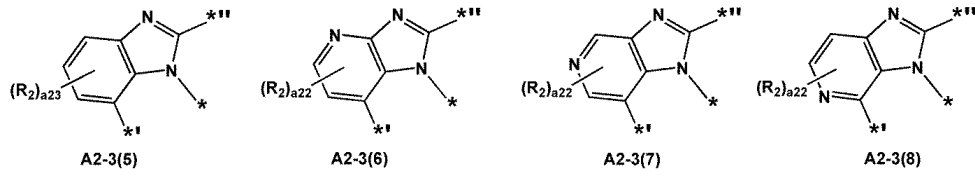
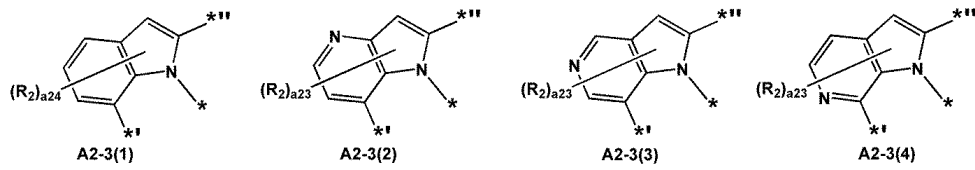
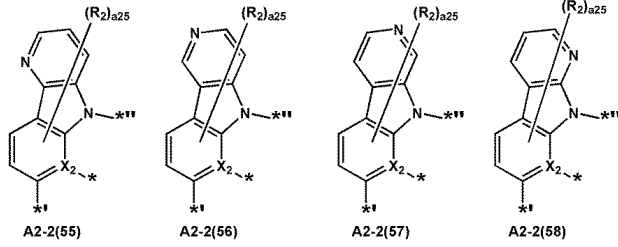
[0166]



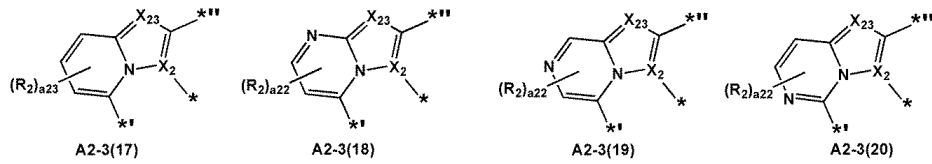
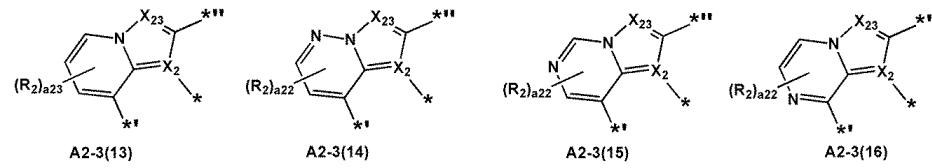
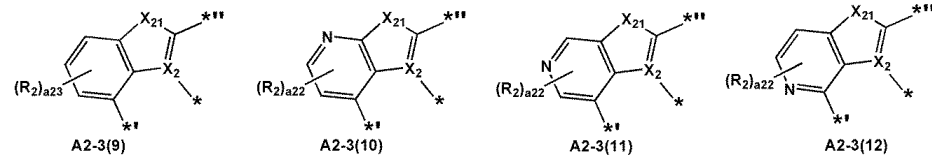
[0167]



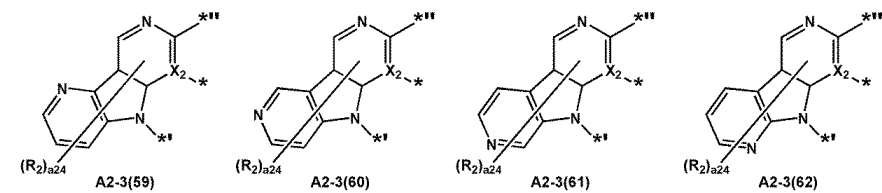
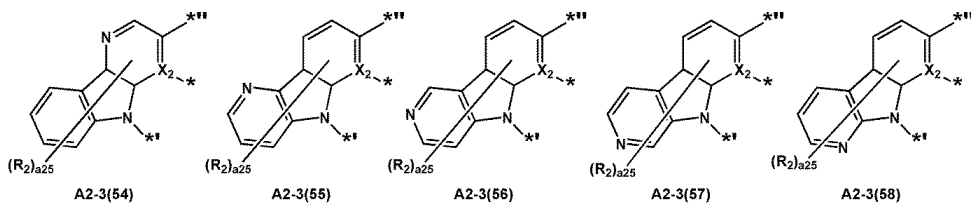
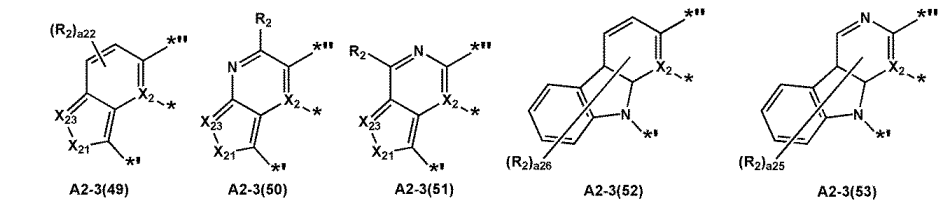
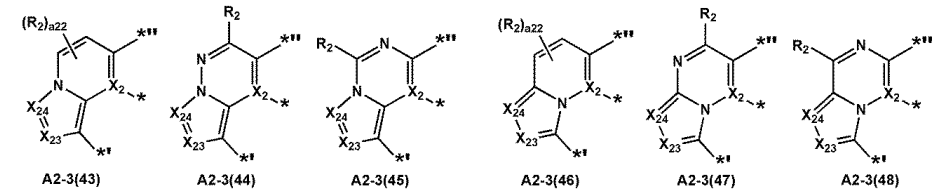
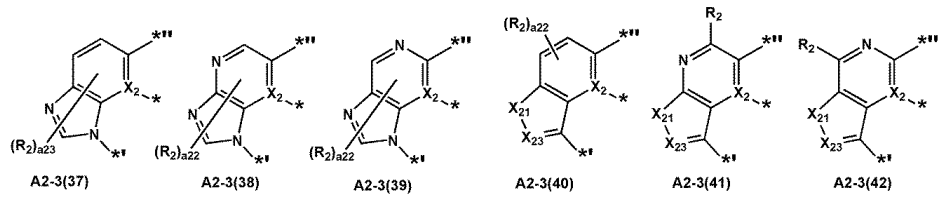
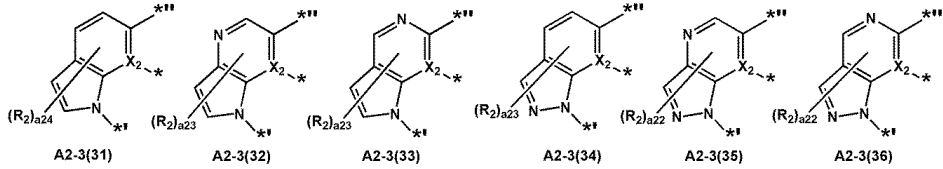
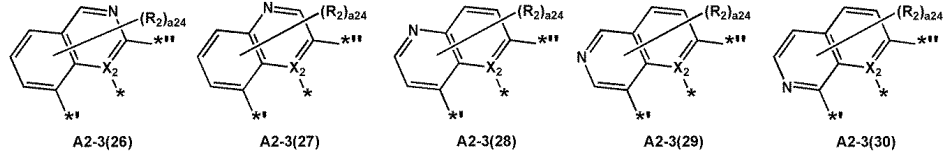
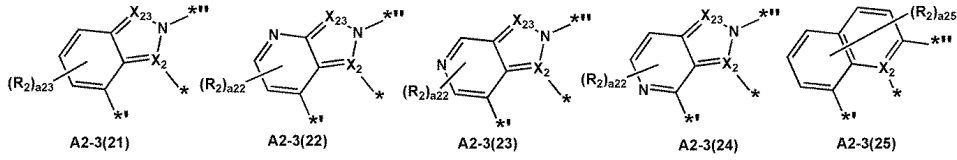
[0168]



[0169]



[0170]



[0171]

[0172]

[0173]

[0174] 상기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(17), A2-2(1) 내지 A2-2(58) 및 A2-3(1) 내지 A2-3(62) 중,

[0175] X₂ 및 R₂에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,

[0176] X₂₁은 O, S, N(R₂₁), C(R₂₁)(R₂₂) 또는 Si(R₂₁)(R₂₂)이고,

[0194] R₃₁ 내지 R₃₈에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₃에 대한 설명을 참조하고,

[0195] a₃₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0196] a₃₃은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

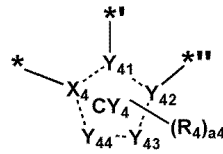
[0197] a₃₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

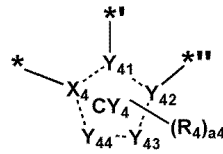
[0198] *는 화학식 1 중 A₃ 또는 M과의 결합 사이트이고,

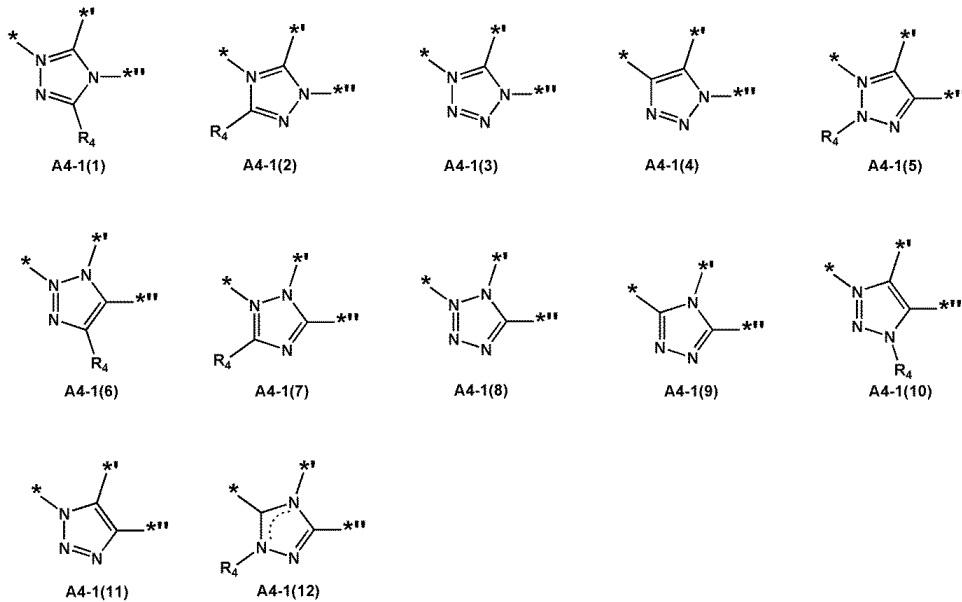
[0199] *'은 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이고,

[0200] *'은 화학식 1 중 Y₄₁과의 결합 사이트이고,

[0201] ~~~~ 화학식 1 중 고리 CY₅와의 결합 사이트이다.



[0202] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A4-1(1) 내지 A4-1(12) 중 하나로 표시될 수 있다:



[0203]

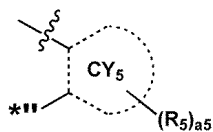
[0204] 상기 화학식 A4-1(1) 내지 A4-1(12) 중,

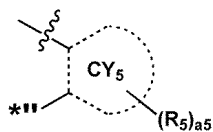
[0205] X₄ 및 R₄에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,

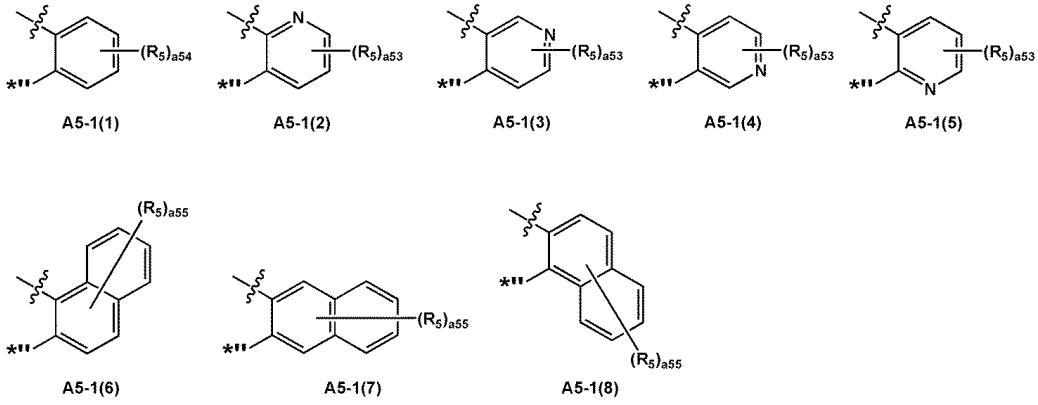
[0206] *는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

[0207] *'은 화학식 1 중 고리 CY₃와의 결합 사이트이고,

[0208] *'은 화학식 1 중 고리 CY₅와의 결합 사이트이다.



[0209] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A5-1(1) 내지 A5-1(8) 중에서 선택될 수 있다:



[0210]

[0211]

[0212]

[0213]

[0214]

[0215]

[0216]

[0217]

[0218]

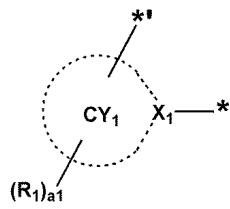
상기 화학식 A5-1(1) 내지 A5-1(8) 중,
 R₅에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,
 a₅₅는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
 a₅₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,
 a₅₃은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

~~~~~ 화학식 1 중 고리 CY<sub>3</sub>과의 결합 사이트이다.

\*"은 화학식 1 중 Y<sub>42</sub>와의 결합 사이트이다.

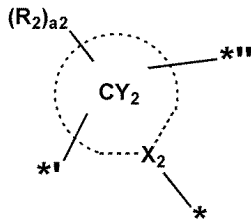
또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,

[0219]



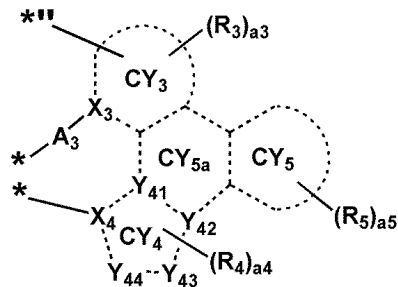
로 표시된 모이어티는 하기 화학식 CY1-1 내지 CY1-59 중 하나로 표시되고 (표시되거나),

[0220]

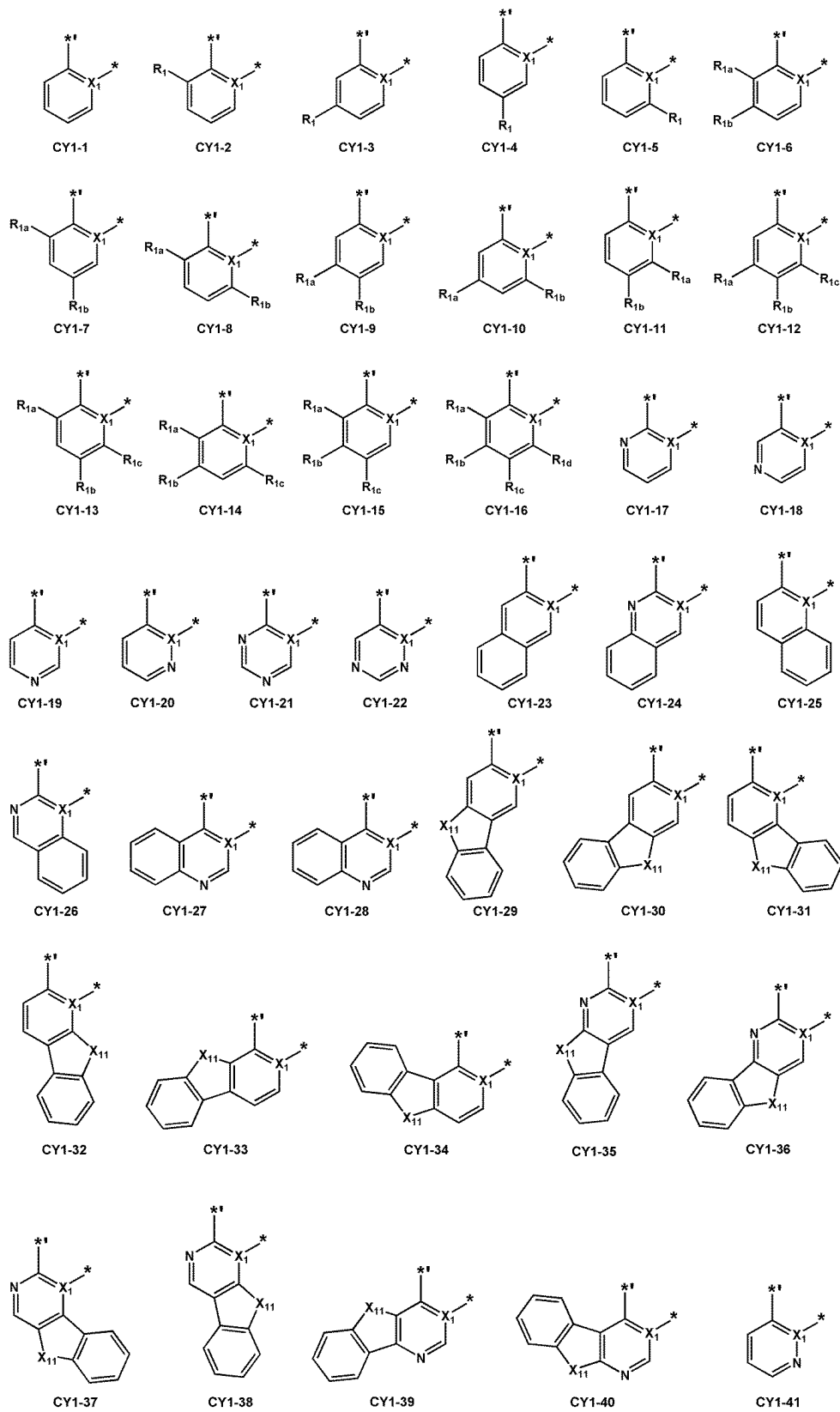


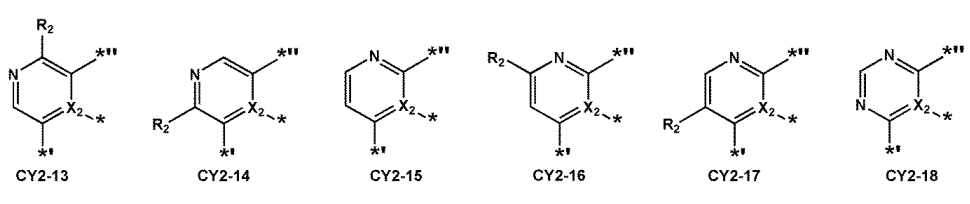
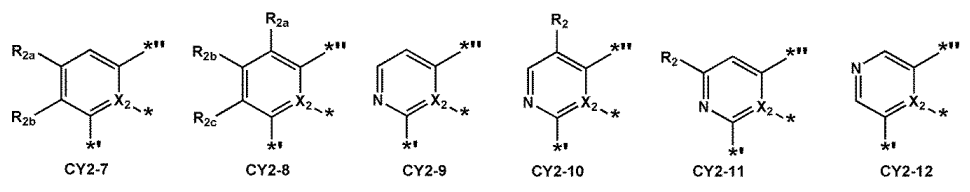
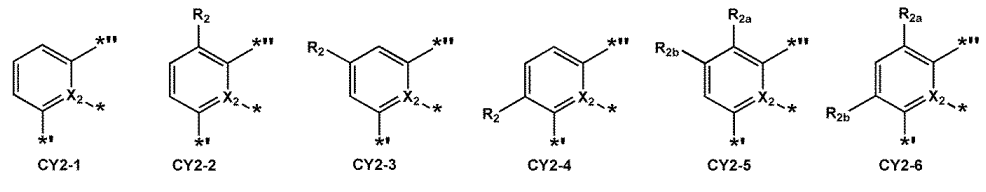
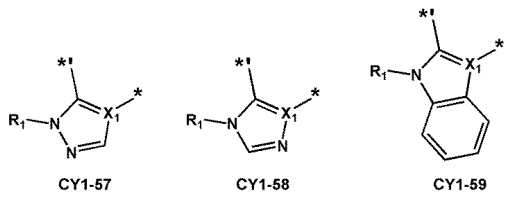
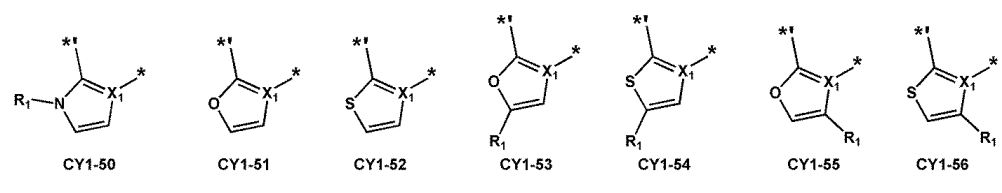
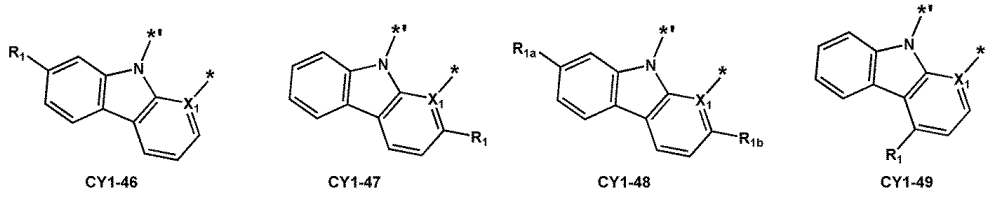
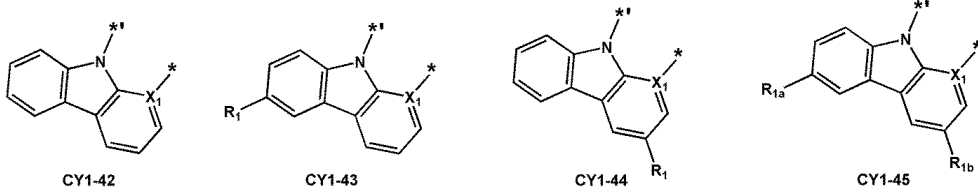
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY2-1 내지 CY2-34 중 하나로 표시되고 (표시되거나),

[0221]



로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY3-1 내지 CY3-6 중 하나로 표시될 수 있다.

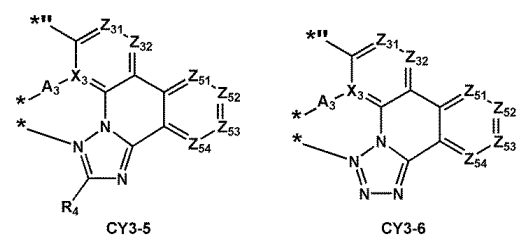
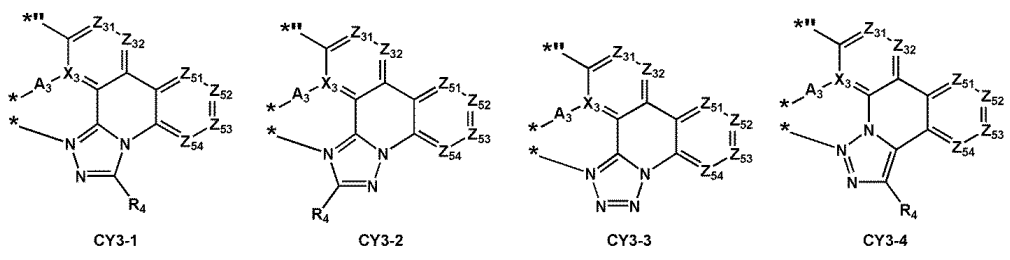
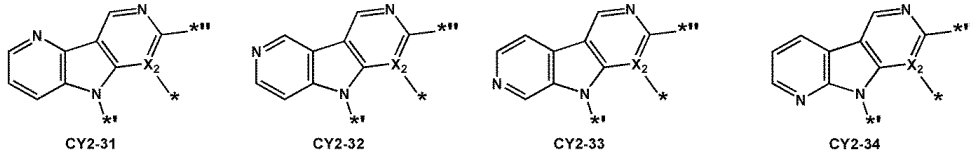
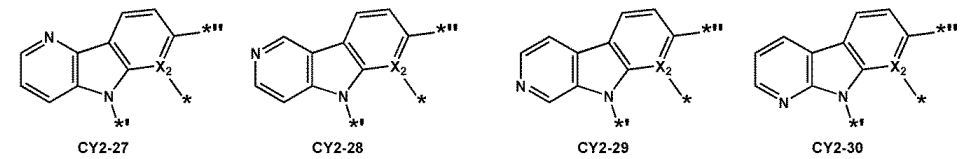
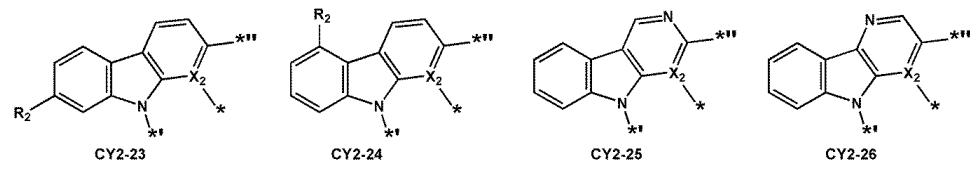
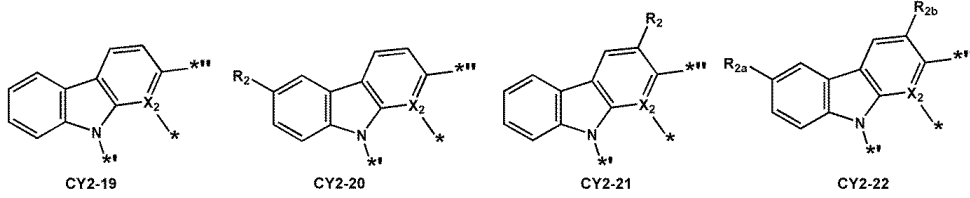




[0225]

[0226]

[0227]



[0228]

[0229]

[0230]

[0231]

[0232]

[0233]

[0234]

[0235]

[0236]

[0237]

[0238]

상기 화학식 CY1-1 내지 CY1-59, CY2-1 내지 CY2-34 및 CY3-1 내지 CY3-6 중,  
A<sub>3</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub> 및 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,  
X<sub>11</sub>은 O, S, N(R<sub>11</sub>), C(R<sub>11</sub>)(R<sub>12</sub>) 또는 Si(R<sub>11</sub>)(R<sub>12</sub>)이고,  
R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1d</sub>, R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>에 대한 설명은 각각 상기 R<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고,  
R<sub>2a</sub> 내지 R<sub>2c</sub>에 대한 설명은 각각 상기 R<sub>2</sub>에 대한 설명을 참조하고,  
Z<sub>31</sub>은 N 또는 C(R<sub>31</sub>)이고, Z<sub>32</sub>은 N 또는 C(R<sub>32</sub>)이고,  
R<sub>31</sub> 및 R<sub>32</sub>에 대한 설명은 각각 상기 R<sub>3</sub>에 대한 설명을 참조하고,  
Z<sub>51</sub>은 N 또는 C(R<sub>51</sub>)이고, Z<sub>52</sub>은 N 또는 C(R<sub>52</sub>)이고, Z<sub>53</sub>은 N 또는 C(R<sub>53</sub>)이고, Z<sub>54</sub>는 N 또는 C(R<sub>54</sub>)이고,

[0239] R<sub>51</sub> 내지 R<sub>54</sub>에 대한 설명은 각각 상기 R<sub>5</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0240] 단, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1d</sub> 및 R<sub>2a</sub> 내지 R<sub>2c</sub>는 수소가 아니고,

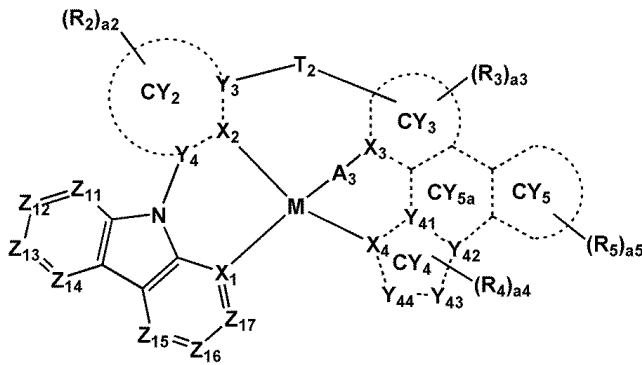
[0241] 상기 화학식 CY1-1 내지 CY1-59 중 \*는 화학식 1 중 A<sub>1</sub> 또는 M과의 결합 사이트이고, \*'는 화학식 1 중 T<sub>1</sub>과의 결합 사이트이고,

[0242] 상기 CY2-1 내지 CY2-34 중 \*는 화학식 1 중 A<sub>2</sub> 또는 M과의 결합 사이트이고, \*'은 화학식 1 중 T<sub>1</sub>과의 결합 사이트이고, \*''는 화학식 1 중 T<sub>2</sub>와의 결합 사이트이고,

[0243] 상기 CY3-1 내지 CY3-6 중 2개의 \*는 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고, \*''은 화학식 1 중 T<sub>2</sub>와의 결합 사이트이다.

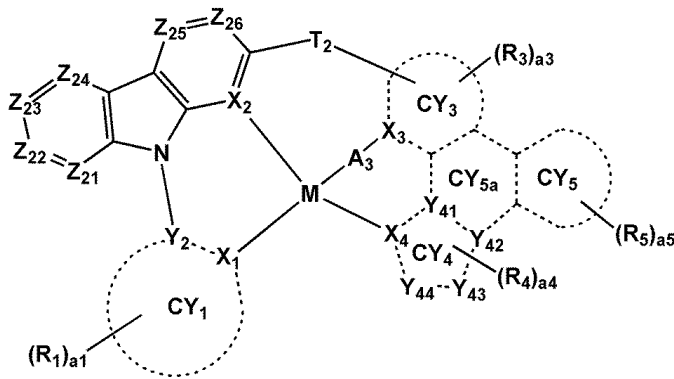
[0244] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시될 수 있다:

[0245] <화학식 1-1>



[0246]

[0247] <화학식 1-2>



[0248]

[0249] 상기 화학식 1-1 및 1-2 중,

[0250] M, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>, Y<sub>41</sub> 내지 Y<sub>44</sub>, A<sub>3</sub>, 고리 CY<sub>1</sub> 내지 CY<sub>5</sub>, 고리 CY<sub>5a</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub> 및 a<sub>1</sub> 내지 a<sub>5</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0251] T<sub>2</sub>는 \*-N(R<sub>8</sub>)-\*', \*-B(R<sub>8</sub>)-\*', \*-P(R<sub>8</sub>)-\*', \*-C(R<sub>8</sub>)(R<sub>9</sub>)-\*', \*-Si(R<sub>8</sub>)(R<sub>9</sub>)-\*', \*-Ge(R<sub>8</sub>)(R<sub>9</sub>)-\*', \*-S-\*', \*-Se-\*', \*-O-\*', \*-C(=O)-\*', \*-S(=O)-\*', \*-S(=O)<sub>2</sub>-\*', \*-C(R<sub>8</sub>)=\*', \*=C(R<sub>8</sub>)-\*' 또는 \*-C(=S)-\*'이고, 상기 R<sub>8</sub> 및 R<sub>9</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0252] Y<sub>2</sub> 내지 Y<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

[0253] X<sub>2</sub>와 Y<sub>3</sub> 사이의 결합, X<sub>2</sub>와 Y<sub>4</sub> 사이의 결합 및 X<sub>1</sub>과 Y<sub>2</sub> 사이의 결합은 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 이중 결합이고,

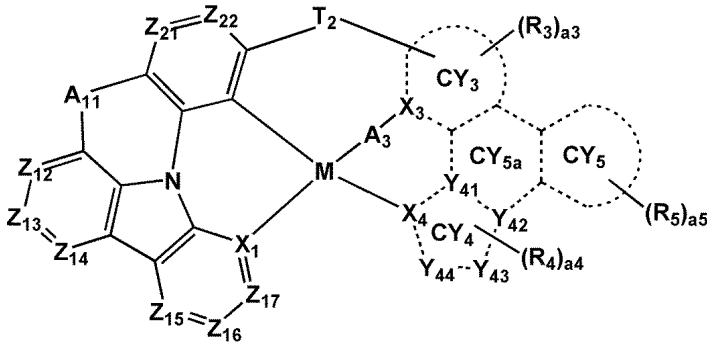
[0254] Z<sub>11</sub>은 N 또는 C(R<sub>11</sub>)이고, Z<sub>12</sub>는 N 또는 C(R<sub>12</sub>)이고, Z<sub>13</sub>은 N 또는 C(R<sub>13</sub>)이고, Z<sub>14</sub>는 N 또는 C(R<sub>14</sub>)이고, Z<sub>15</sub>는 N 또는 C(R<sub>15</sub>)이고, Z<sub>16</sub>은 N 또는 C(R<sub>16</sub>)이고, Z<sub>17</sub>은 N 또는 C(R<sub>17</sub>)이고, Z<sub>21</sub>은 N 또는 C(R<sub>21</sub>)이고, Z<sub>22</sub>는 N 또는 C(R<sub>22</sub>)이고, Z<sub>23</sub>은 N 또는 C(R<sub>23</sub>)이고, Z<sub>24</sub>는 N 또는 C(R<sub>24</sub>)이고, Z<sub>25</sub>는 N 또는 C(R<sub>25</sub>)이고, Z<sub>26</sub>은 N 또는 C(R<sub>26</sub>)이고,

[0255] R<sub>11</sub> 내지 R<sub>17</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0256] R<sub>21</sub> 내지 R<sub>26</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>2</sub>에 대한 설명을 참조한다.

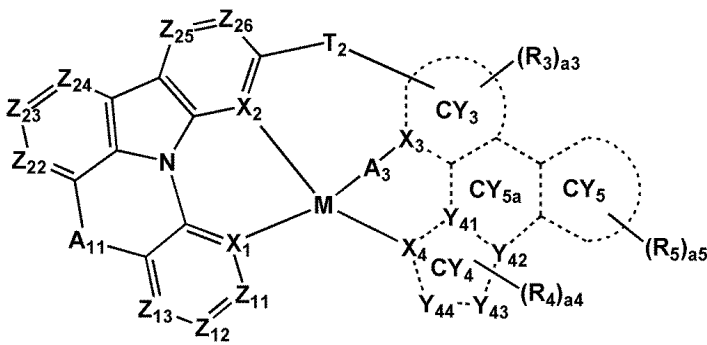
[0257] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1-1(1) 또는 1-2(1)로 표시될 수 있다:

[0258] <화학식 1-1(1)>



[0259]

[0260] <화학식 1-2(1)>



[0261]

[0262] 상기 화학식 1-1(1) 및 1-2(1) 중,

[0263] M, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>, Y<sub>41</sub> 내지 Y<sub>44</sub>, A<sub>3</sub>, 고리 CY<sub>3</sub> 내지 CY<sub>5</sub>, 고리 CY<sub>5a</sub>, R<sub>3</sub> 내지 R<sub>5</sub> 및 a<sub>3</sub> 내지 a<sub>5</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0264] T<sub>2</sub>는 \*-N(R<sub>8</sub>)-\*', \*-B(R<sub>8</sub>)-\*', \*-P(R<sub>8</sub>)-\*', \*-C(R<sub>8</sub>)(R<sub>9</sub>)-\*', \*-Si(R<sub>8</sub>)(R<sub>9</sub>)-\*', \*-Ge(R<sub>8</sub>)(R<sub>9</sub>)-\*', \*-S-\*', \*-Se-\*', \*-O-\*', \*-C(=O)-\*', \*-S(=O)-\*', \*-S(=O)<sub>2</sub>-\*', \*-C(R<sub>8</sub>)=\*', \*=C(R<sub>8</sub>)-\*' 또는 \*-C(=S)-\*'이고, 상기 R<sub>8</sub> 및 R<sub>9</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0265] Z<sub>11</sub>은 N 또는 C(R<sub>11</sub>)이고, Z<sub>12</sub>는 N 또는 C(R<sub>12</sub>)이고, Z<sub>13</sub>은 N 또는 C(R<sub>13</sub>)이고, Z<sub>14</sub>는 N 또는 C(R<sub>14</sub>)이고, Z<sub>15</sub>는 N 또는 C(R<sub>15</sub>)이고, Z<sub>16</sub>은 N 또는 C(R<sub>16</sub>)이고, Z<sub>17</sub>은 N 또는 C(R<sub>17</sub>)이고, Z<sub>21</sub>은 N 또는 C(R<sub>21</sub>)이고, Z<sub>22</sub>는 N 또는 C(R<sub>22</sub>)이고, Z<sub>23</sub>은 N 또는 C(R<sub>23</sub>)이고, Z<sub>24</sub>는 N 또는 C(R<sub>24</sub>)이고, Z<sub>25</sub>는 N 또는 C(R<sub>25</sub>)이고, Z<sub>26</sub>은 N 또는 C(R<sub>26</sub>)이고,

[0266] R<sub>11</sub> 내지 R<sub>17</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고,

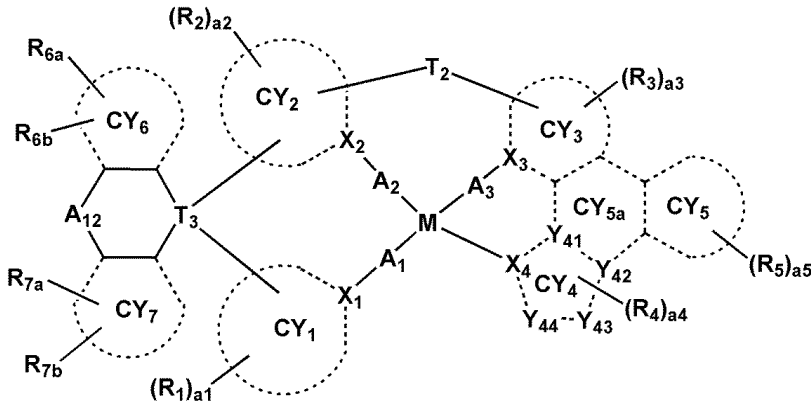
[0267] R<sub>21</sub> 내지 R<sub>26</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>2</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0268] A<sub>11</sub>은 \*-N(R<sub>8a</sub>)-\*', \*-B(R<sub>8a</sub>)-\*', \*-P(R<sub>8a</sub>)-\*', \*-C(R<sub>8a</sub>)(R<sub>9a</sub>)-\*', \*-Si(R<sub>8a</sub>)(R<sub>9a</sub>)-\*', \*-Ge(R<sub>8a</sub>)(R<sub>9a</sub>)-\*', \*-S-\*', \*-Se-\*', \*-O-\*', \*-C(=O)-\*', \*-S(=O)-\*', \*-S(=O)<sub>2</sub>-\*', \*-C(R<sub>8a</sub>)=\*', \*=C(R<sub>8a</sub>)-\*', \*-C(R<sub>8a</sub>)=C(R<sub>9a</sub>)-\*', \*-

C(=S)-\*' 또는 \*-C≡C-\*' 이고, 상기 R<sub>8a</sub> 및 R<sub>9a</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>8</sub> 및 R<sub>9</sub>에 기재된 바를 참조한다.

[0269] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1A로 표시될 수 있다:

[0270] <화학식 1A>



[0271]

상기 화학식 1A 중,

[0272]

M, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>, Y<sub>41</sub> 내지 Y<sub>44</sub>, A<sub>1</sub> 내지 A<sub>3</sub>, 고리 CY<sub>1</sub> 내지 CY<sub>5</sub>, 고리 CY<sub>5a</sub>, T<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub> 및 a1 내지 a5에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0273]

T<sub>3</sub>는 C, Si 또는 Ge이고,

[0274]

고리 CY<sub>6</sub> 및 CY<sub>7</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 고리 CY<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0275]

R<sub>6a</sub>, R<sub>6b</sub>, R<sub>7a</sub> 및 R<sub>7b</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0276]

A<sub>12</sub>는 단일 결합, \*-N(R<sub>8b</sub>)-\*', \*-B(R<sub>8b</sub>)-\*', \*-P(R<sub>8b</sub>)-\*', \*-C(R<sub>8b</sub>)(R<sub>9b</sub>)-\*', \*-Si(R<sub>8b</sub>)(R<sub>9b</sub>)-\*', \*-Ge(R<sub>8b</sub>)(R<sub>9b</sub>)-\*', \*-S-\*', \*-Se-\*', \*-O-\*', \*-C(=O)-\*', \*-S(=O)-\*', \*-S(=O)<sub>2</sub>-\*', \*-C(R<sub>8b</sub>)=\*', \*=C(R<sub>8b</sub>)-\*', \*-C(R<sub>8b</sub>)=C(R<sub>9b</sub>)-\*', \*-C(=S)-\*' 또는 \*-C≡C-\*' 이고, 상기 R<sub>8b</sub> 및 R<sub>9b</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>8</sub> 및 R<sub>9</sub>에 기재된 바를 참조한다.

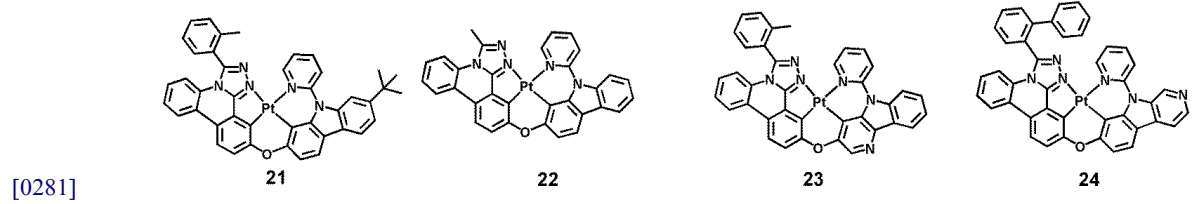
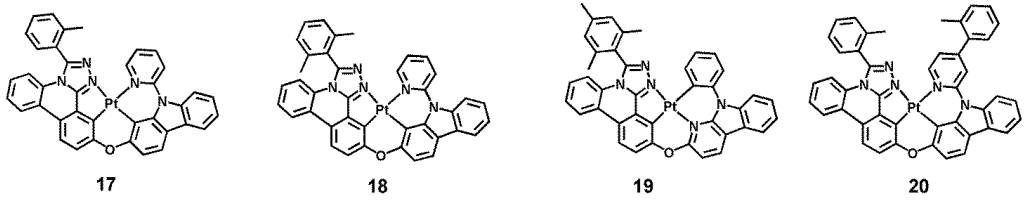
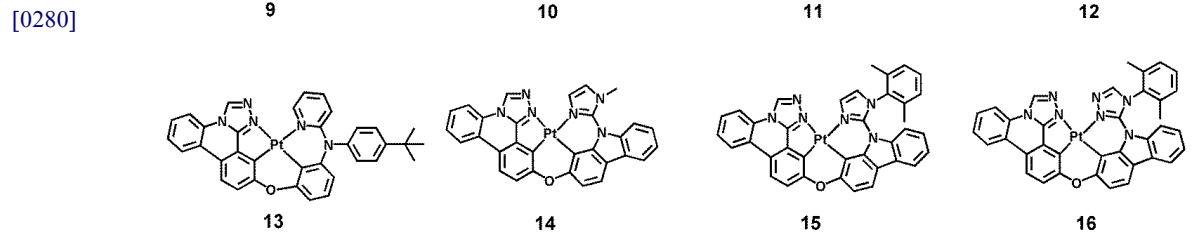
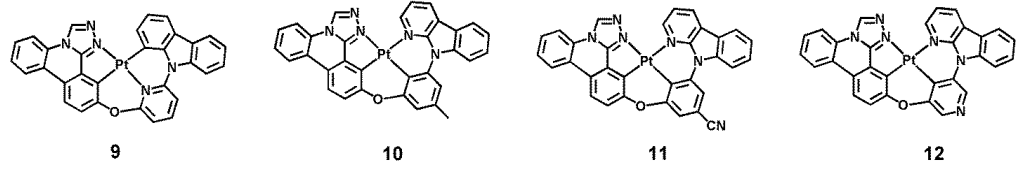
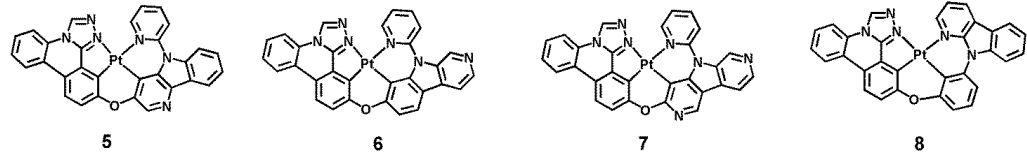
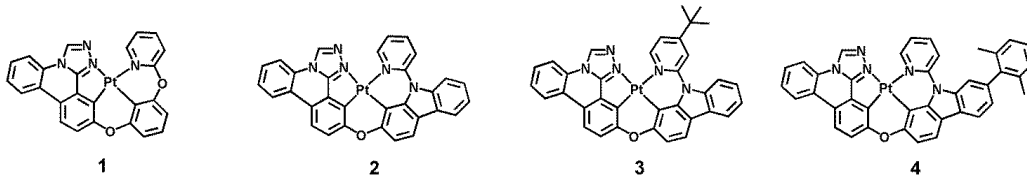
[0277]

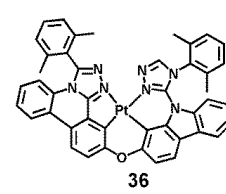
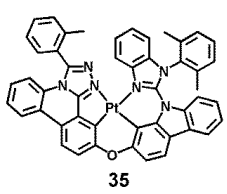
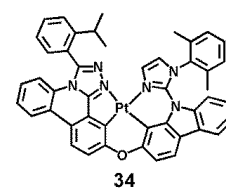
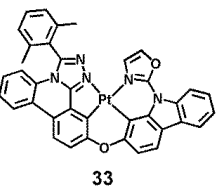
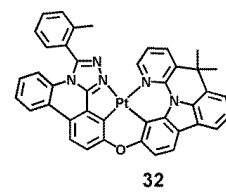
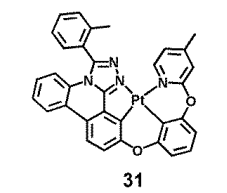
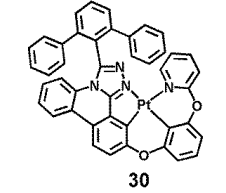
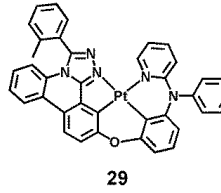
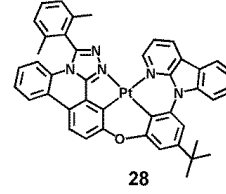
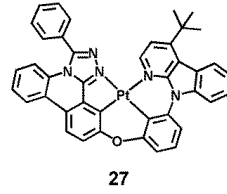
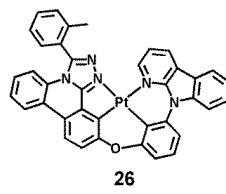
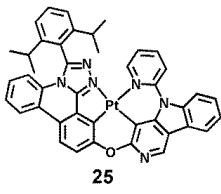
본 명세서 중 "아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저물 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저물 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹"은 각각, "인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저물 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹"과 동일한 백분을 갖되, 이들의 고리를 형성하는 탄소들 중 적어도 하나가 질소로 치환된, 헤테로환을 의미한다.

[0278]

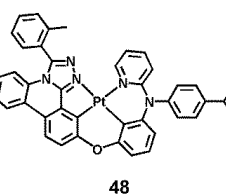
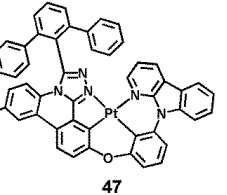
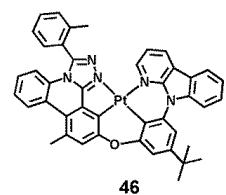
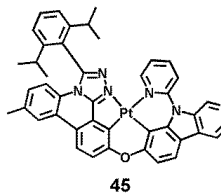
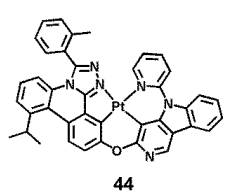
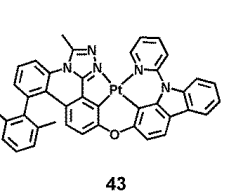
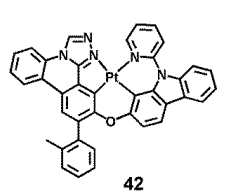
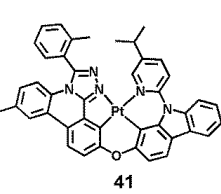
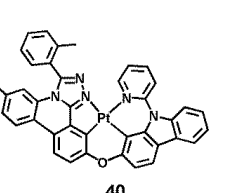
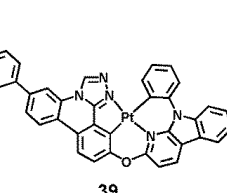
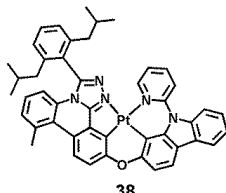
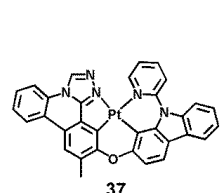


[0279] 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은, 하기 화합물 1 내지 196 중 하나일 수 있다:

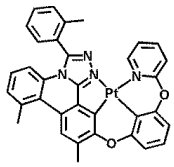




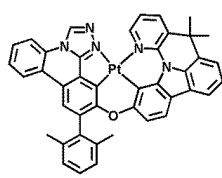
[0282]



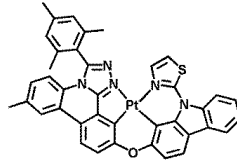
[0283]



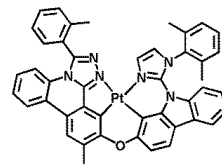
49



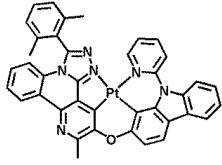
50



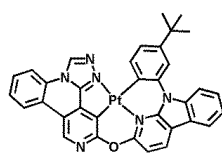
51



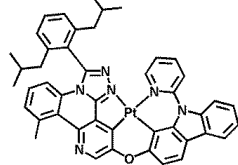
52



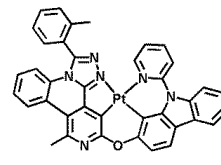
53



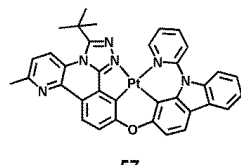
54



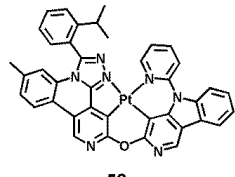
55



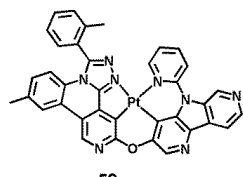
56



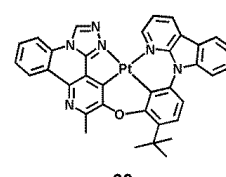
57



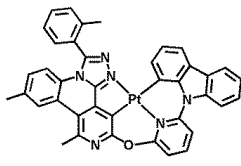
58



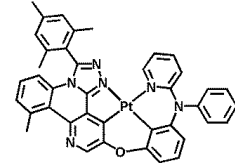
59



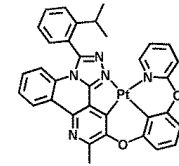
60



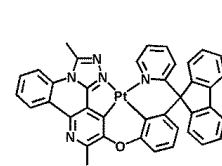
61



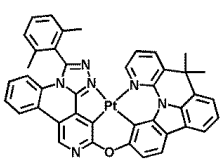
62



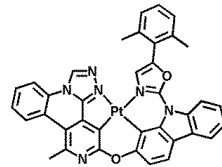
63



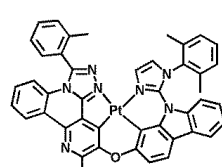
64



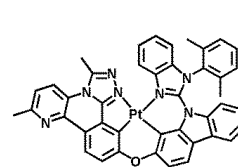
65



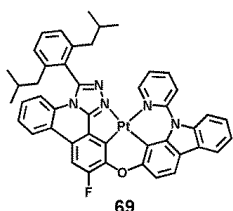
66



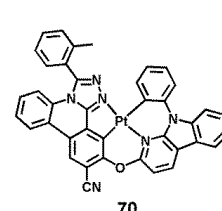
67



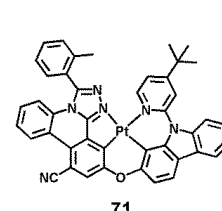
68



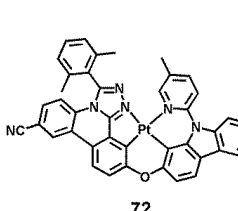
69



70



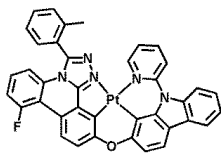
71



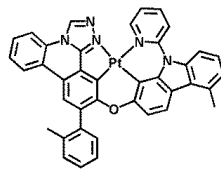
72

[0284]

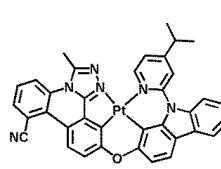
[0285]



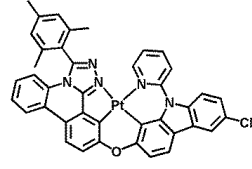
73



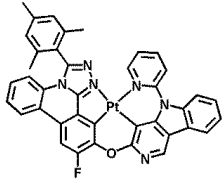
74



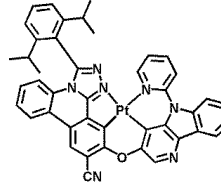
75



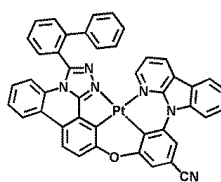
76



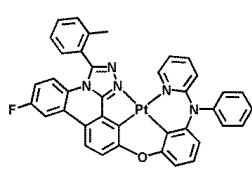
77



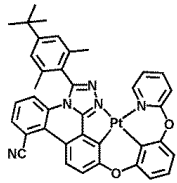
78



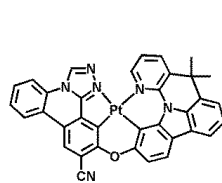
79



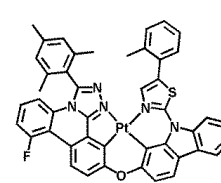
80



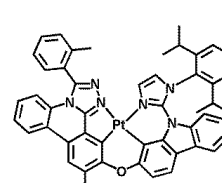
81



82

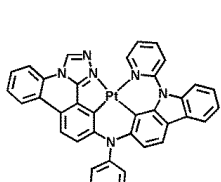


83

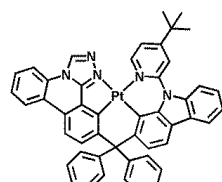


84

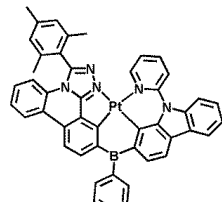
[0286]



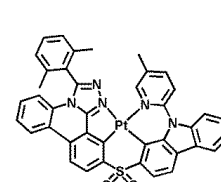
85



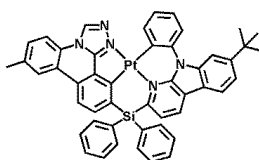
86



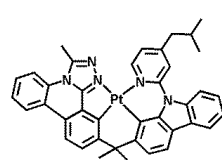
87



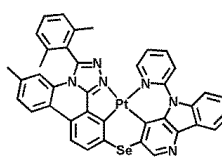
88



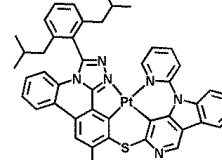
89



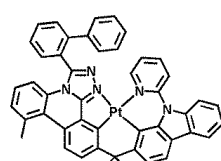
90



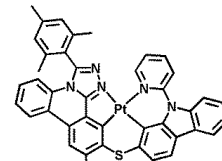
91



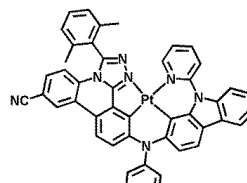
92



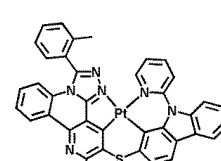
93



94

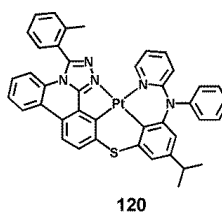
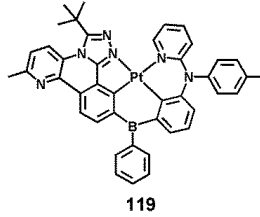
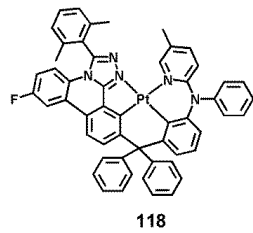
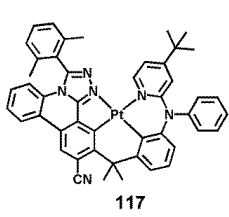
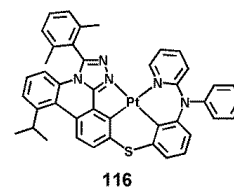
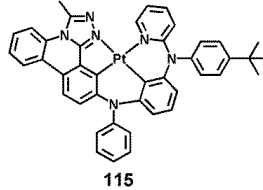
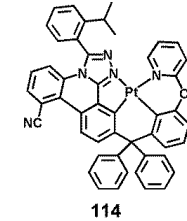
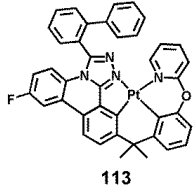
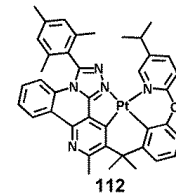
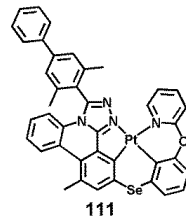
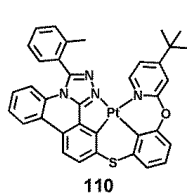
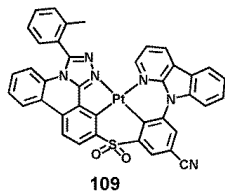
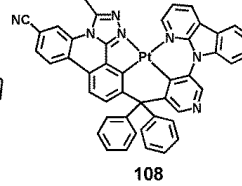
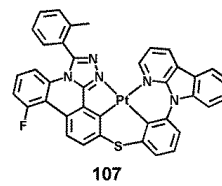
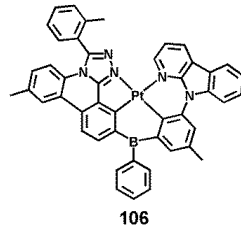
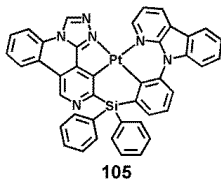
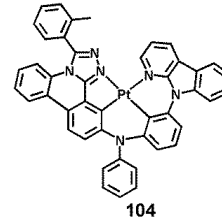
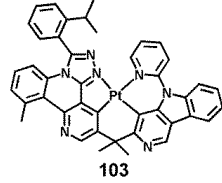
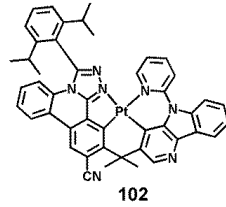
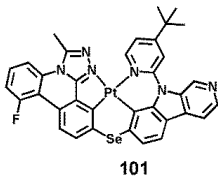
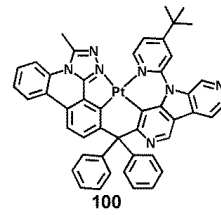
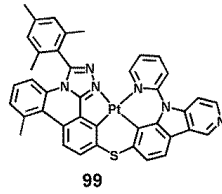
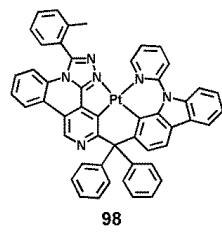
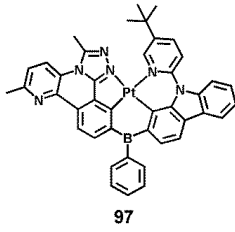


95



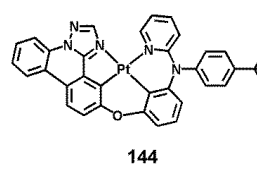
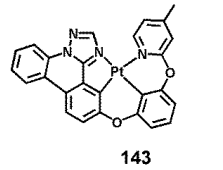
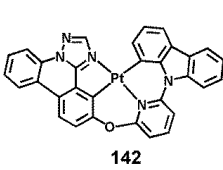
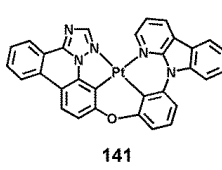
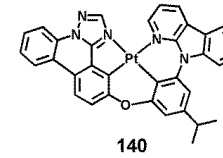
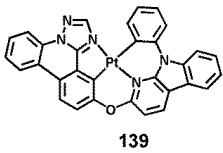
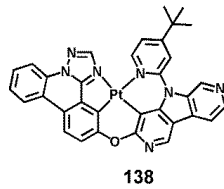
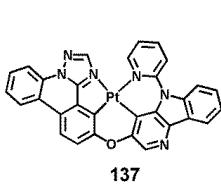
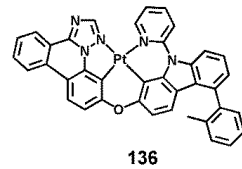
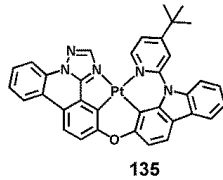
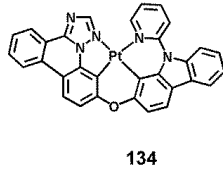
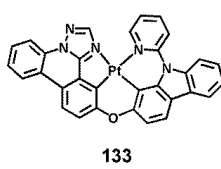
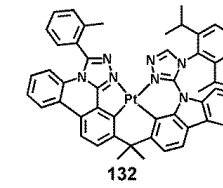
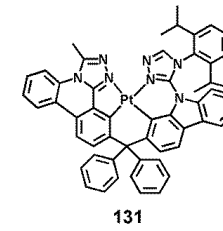
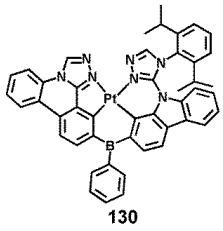
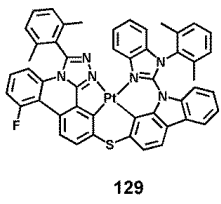
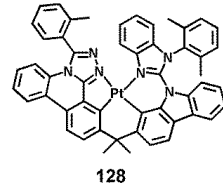
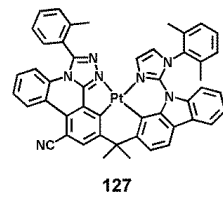
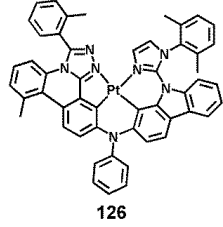
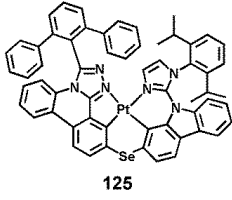
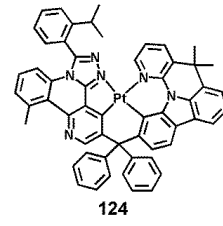
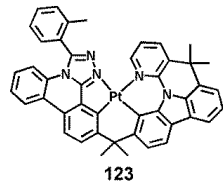
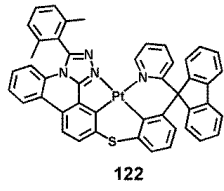
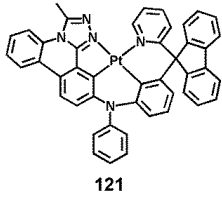
96

[0287]



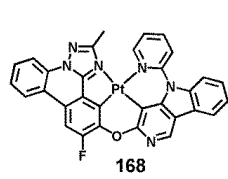
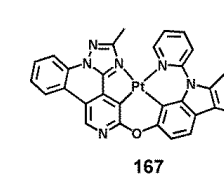
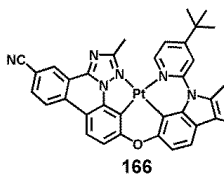
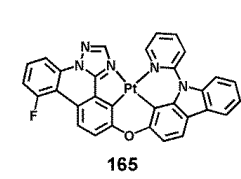
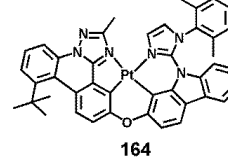
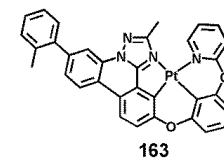
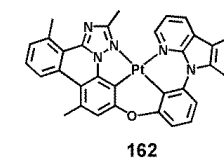
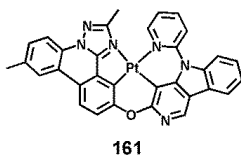
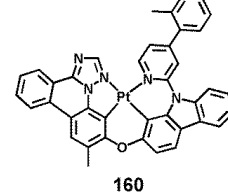
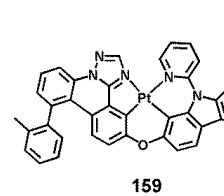
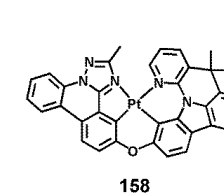
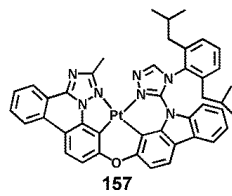
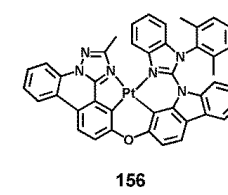
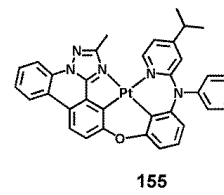
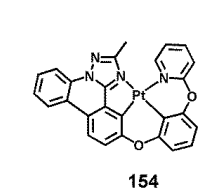
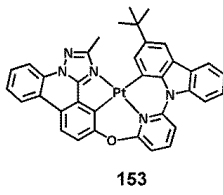
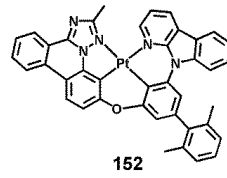
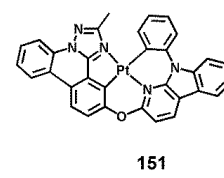
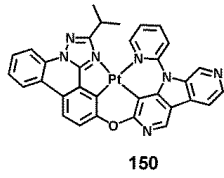
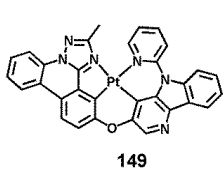
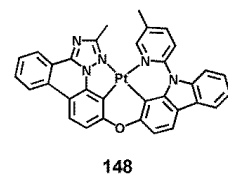
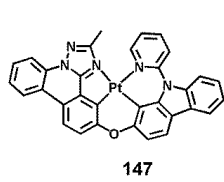
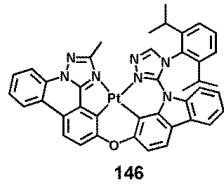
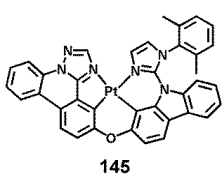
[0288]

[0289]



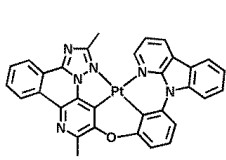
[0290]

[0291]

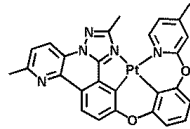


[0292]

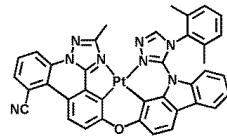
[0293]



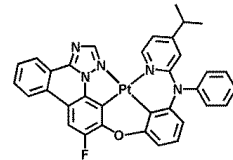
169



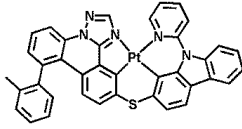
170



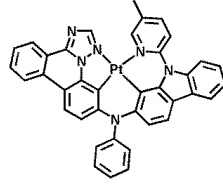
171



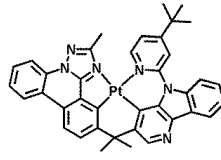
172



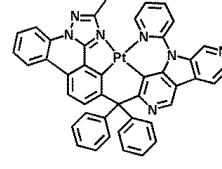
173



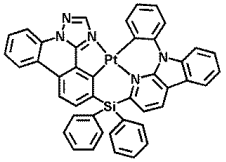
174



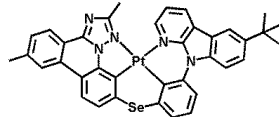
175



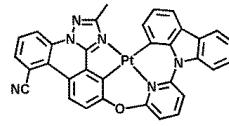
176



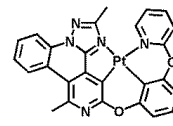
177



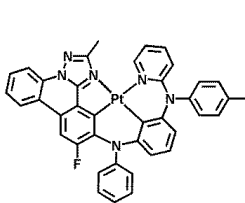
178



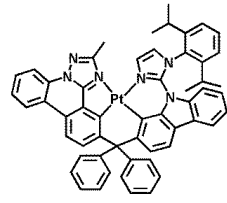
179



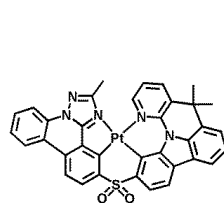
180



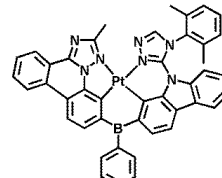
181



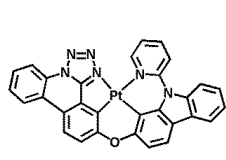
182



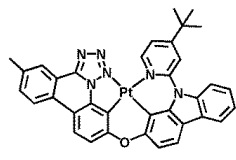
183



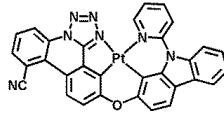
184



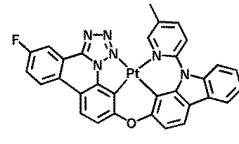
185



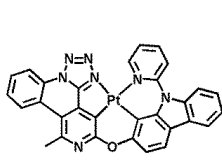
186



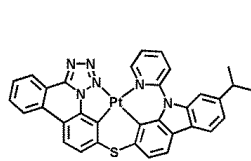
187



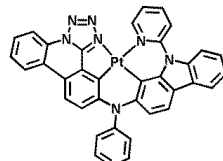
188



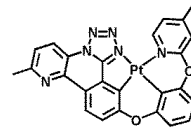
189



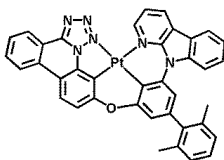
190



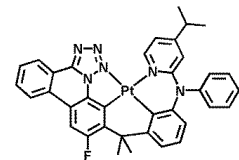
191



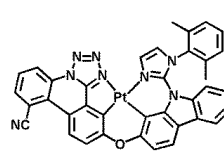
192



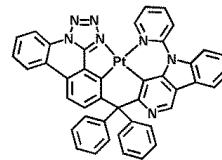
193



194



195



196

[0294]

[0295]

[0296]

[0297]

[0298]

상기 유기금속 화합물의 용액(예를 들면, 톨루엔) 중 발광 스펙트럼의 피크는 420nm 내지 500nm, 예를 들면, 440nm 내지 470nm 범위 (또 다른 예로서, 455nm 내지 465nm 범위)의 최대 발광 파장 및 30nm 내지 80nm, 예를 들면, 30nm 내지 60nm 범위 (또 다른 예로서, 30nm 내지 45nm 범위)의 반폭치비(FWHM)를 가질 수 있다. 이로써, 상기 유기금속 화합물은 우수한 색순도를 갖는 청색광을 방출할 수 있다.

상기 화학식 1 중 고리 CY<sub>4</sub>의 X<sub>4</sub>, Y<sub>41</sub>, Y<sub>42</sub>, Y<sub>43</sub> 및 Y<sub>44</sub> 중 "3개" 이상은 N이다. 예를 들어, 상기 고리 CY<sub>4</sub>는 트



리아졸 그룹 또는 테트라졸 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 들뜬 상태(excited state)에서의 분자 구조 뒤틀림이 최소화되어 상대적으로 좁은 반폭치비의 피크를 갖는 광을 방출할 수 있는 바, 비방사 감쇠(non-radiative decay)가 최소화되어 높은 발광 양자 효율(PLQY)을 가질 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 상대적으로 높은 T<sub>1</sub> 에너지 레벨(예를 들면, 2.69 eV 내지 2.80 eV 범위의 T<sub>1</sub> 에너지 레벨)을 가질 수 있다. 따라서, 이와 같은 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 고발광 효율 및 고색순도를 갖는 광(예를 들면, 진한 청색광(deep blue light))을 효과적으로 방출할 수 있다.

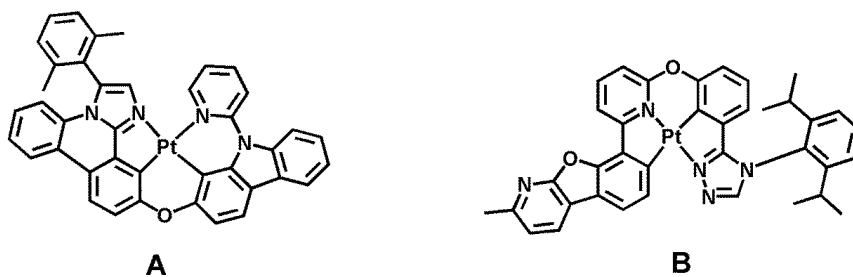
[0299] 한편, 상기 화학식 1은 본 명세서에 정의된 바와 같은 고리 CY<sub>5a</sub>를 갖는다. 상기 고리 CY<sub>5a</sub>는 고리 CY<sub>3</sub> 내지 CY<sub>5</sub>가 서로 연결되어 형성된 고리로서, 상기 고리 CY<sub>5a</sub>를 가짐으로써, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 각종 전하 및 열에 대하여 안정한 강건한 분자 구조를 가질 수 있다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 장수명을 가질 수 있다.

[0300] 나아가, 상기 화학식 1 중 M은 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 칼슘(Ca), 티타늄(Ti), 망간(Mn), 코발트(Co), 구리(Cu), 아연(Zn), 갈륨(Ga), 게르마늄(Ge), 지르코늄(Zr), 루테튬(Ru), 로듐(Rh), 팔라듐(Pd), 은(Ag), 레늄(Re), 백금(Pt) 또는 금(Au) (예를 들면, Pt, Pd 또는 Au)이고, 상기 화학식 1의 유기금속 화합물은 4자리 리간드(tetradentate ligand)를 갖는다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 사각-평면 코디네이션(square-planar coordination) 구조를 갖고, 높은 방사 감쇠율(radiative decay rate)을 가질 수 있는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 고발광 효율 및 고색순도를 갖는 청색광을 효과적으로 방출할 수 있다.

[0301] 예를 들어, 상기 화합물들 중 일부 화합물에 대한 HOMO, LUMO 및 T<sub>1</sub> 에너지 레벨을 Gaussian 프로그램의 DFT 방법을 이용하여 (B3LYP, 6-31G(d,p) 수준에서 구조 최적화함) 평가한 결과는 하기 표 1과 같다.

표 1

| 화합물 No. | HOMO (eV) | LUMO (eV) | T <sub>1</sub> (eV) |
|---------|-----------|-----------|---------------------|
| 2       | -4.88     | -1.35     | 2.67                |
| 3       | -4.82     | -1.30     | 2.64                |
| 4       | -4.89     | -1.37     | 2.67                |
| 17      | -4.82     | -1.28     | 2.67                |
| A       | -4.76     | -1.31     | 2.63                |
| B       | -4.99     | -1.59     | 2.31                |



[0303] 상기 표 1로부터, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은, 화합물 A 및 B에 비하여 높은 T<sub>1</sub> 에너지 레벨을 가짐을 확인할 수 있는 바, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 도펀트로 사용하기에 적합한 전기적 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

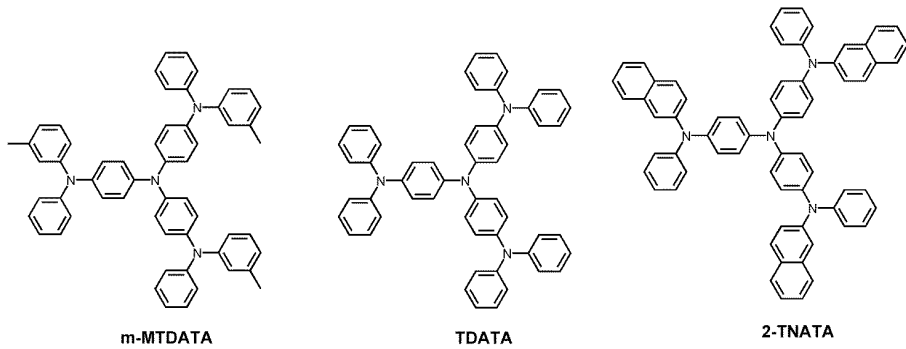
[0305] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 인식할 수 있다.

[0306] 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 유기층, 예를 들면, 상기 유기층 중 발광층의 도펀트로 사용하기 적합할 수 있는 바, 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 적어도 1종 이상

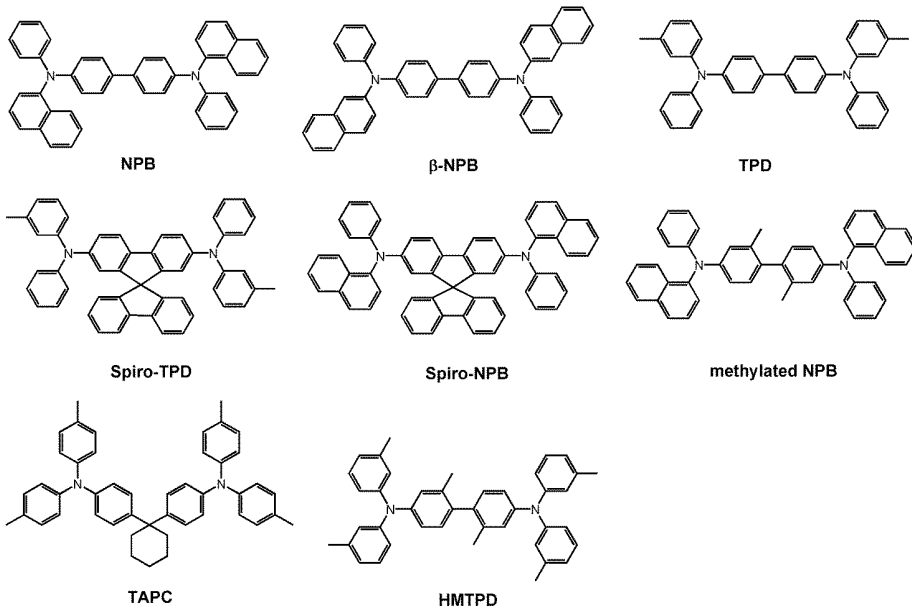
포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

- [0307] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한 유기층을 구비함으로써, 저구동 전압, 고효율, 고전력, 고양자 효율, 장수명 및/또는 낮은 물-오프비와 우수한 색순도를 가질 수 있다.
- [0308] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있다. 이 때, 상기 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 하고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함할 수 있다(즉, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 함량은 상기 호스트의 함량보다 작음).
- [0309] 일 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물을 발광층에 포함한 유기 발광 소자의 발광층으로부터 방출된 광은 청색광이고, 상기 청색광의 CIE y좌표는 0.10 내지 0.340, 예를 들면, 0.120 내지 0.280 범위일 수 있다. 이로써, 고품위의 청색광 방출 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.
- [0310] 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.
- [0311] 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)할 수 있다.
- [0312] 상기 제1전극은 정공 주입 전극인 애노드이고 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드이거나, 상기 제1전극은 전자 주입 전극인 캐소드이고 상기 제2전극은 정공 주입 전극인 애소드이다.
- [0313] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자 중 상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고, 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고, 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0314] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"은 유기 화합물뿐만 아니라, 금속을 포함한 유기금속 착체 등도 포함할 수 있다.
- [0315] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다. 유기 발광 소자(10)는 제1전극(11), 유기층(15) 및 제2전극(19)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.
- [0316] 상기 제1전극(11) 하부 또는 제2전극(19) 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0317] 상기 제1전극(11)은 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 애노드일 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등과 같은 금속을 이용할 수 있다.
- [0318] 상기 제1전극(11)은 단일층 또는 2 이상의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(11)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0319] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.
- [0320] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.

- [0321] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.
- [0322] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 버퍼층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0323] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층만을 포함하거나, 정공 수송층만을 포함할 수 있다. 또는, 상기 정공 수송 영역은, 제1전극(11)로부터 차례로 적층된, 정공 주입층/정공 수송층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 구조를 가질 수 있다.
- [0324] 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(11) 상부에 진공증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0325] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500°C, 진공도 약  $10^{-8}$  내지 약  $10^{-3}$  torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0326] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0327] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.
- [0328] 상기 정공 수송 영역은, 예를 들면, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, methylated-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캄퍼술포산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



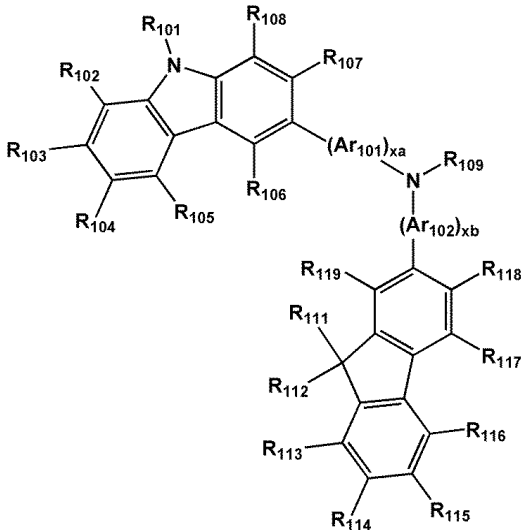
[0329]



[0330]

[0331]

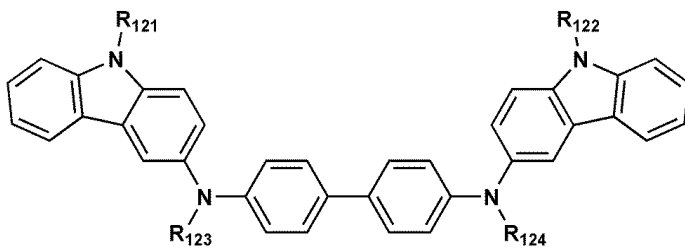
<화학식 201>



[0332]

[0333]

<화학식 202>



[0334]

[0335]

상기 화학식 201 중, Ar<sub>101</sub> 및 Ar<sub>102</sub>는 서로 독립적으로,

[0336]

페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 콰이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페털레닐렌기 및 펜타세닐렌기; 및

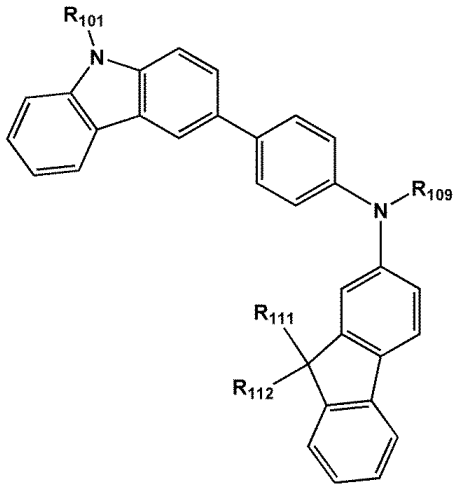
[0337]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알

케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기;

- [0338] 중에서 선택될 수 있다.
- [0339] 상기 화학식 201 중, 상기 xa 및 xb는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수, 또는 0, 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, 상기 xa는 1이고, xb는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0340] 상기 화학식 201 및 202 중, 상기 R<sub>101</sub> 내지 R<sub>108</sub>, R<sub>111</sub> 내지 R<sub>119</sub> 및 R<sub>121</sub> 내지 R<sub>124</sub>는 서로 독립적으로,
- [0341] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등) 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등);
- [0342] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 하나 이상으로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기;
- [0343] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 및
- [0344] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기;
- [0345] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0346] 상기 화학식 201 중, R<sub>109</sub>는,
- [0347] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기; 및
- [0348] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기;
- [0349] 중에서 선택될 수 있다.
- [0350] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

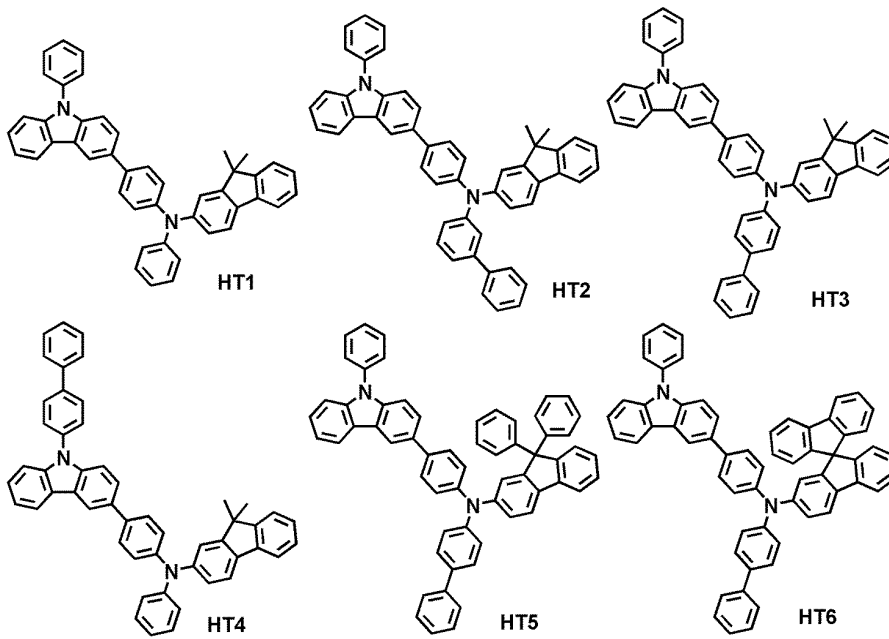
[0351] <화학식 201A>



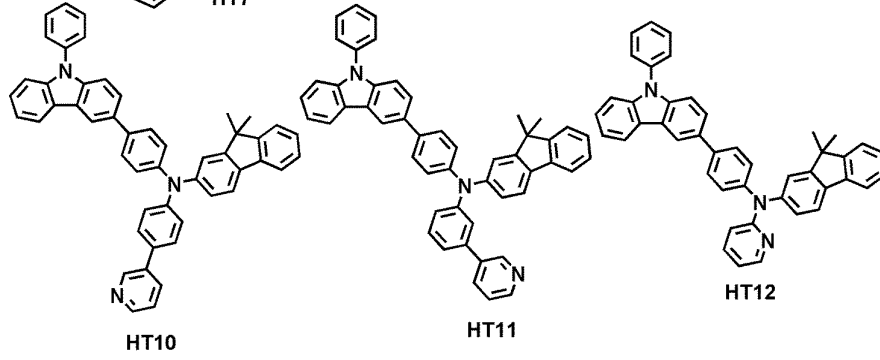
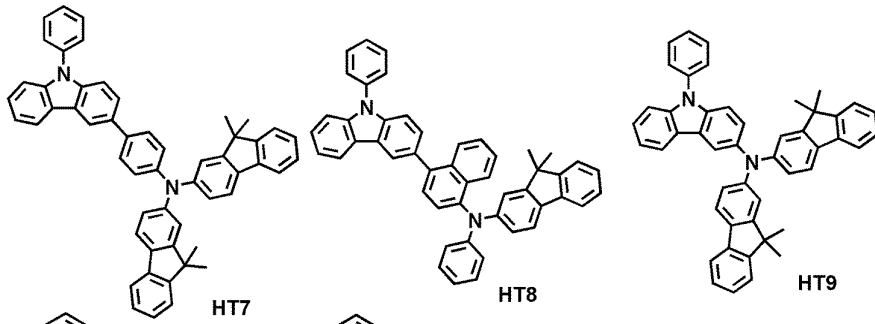
[0352]

[0353] 상기 화학식 201A 중, R<sub>101</sub>, R<sub>111</sub>, R<sub>112</sub> 및 R<sub>109</sub>에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

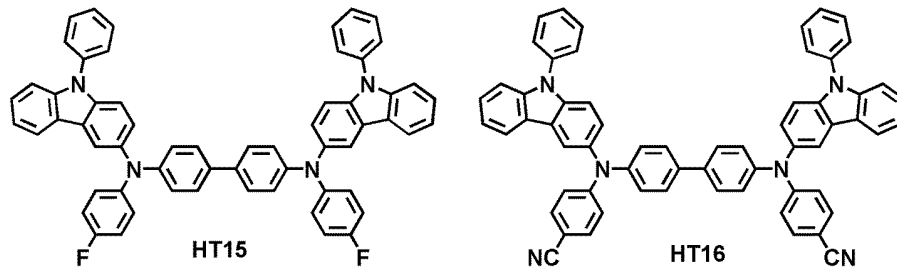
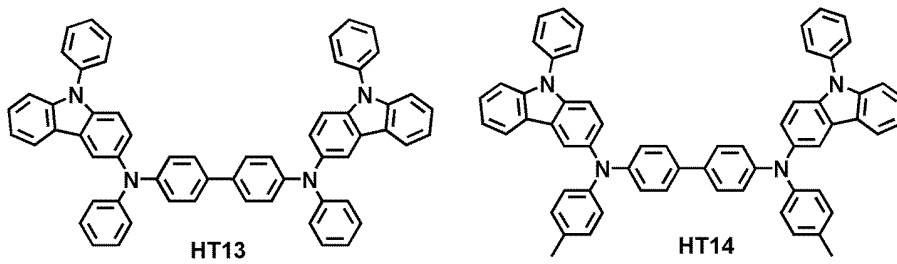
[0354] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



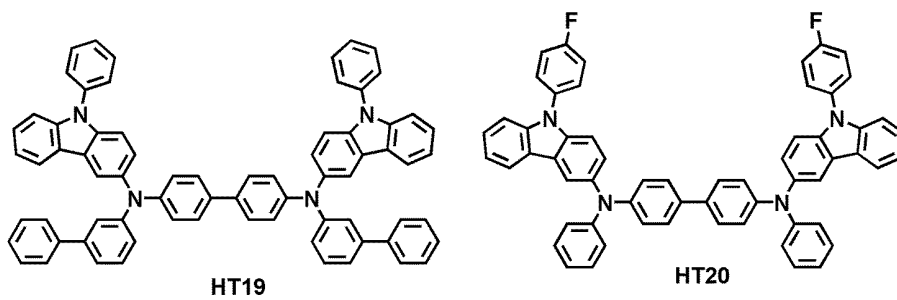
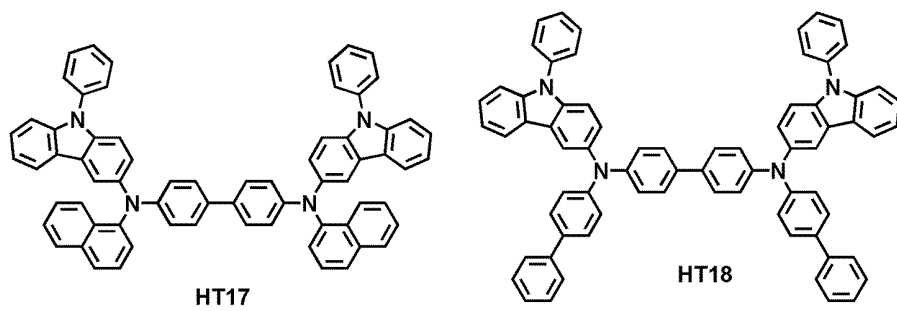
[0355]



[0356]



[0357]



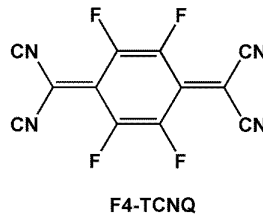
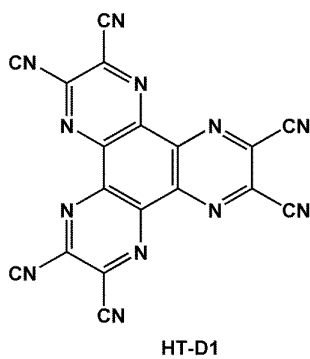
[0358]



[0359] 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 10000Å, 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.

[0360] 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.

[0361] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라시아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 HT-D1 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0362]

상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

[0363]

상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 수 있다.

[0364]

상기 정공 수송 영역 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0365]

한편, 상기 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 상기 전자 저지층 재료는, 상술한 바와 같은 정공 수송 영역에 사용될 수 있는 물질 및 후술하는 호스트 물질 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 전자 저지층 재료로서, 후술하는 mCP를 사용할 수 있다.

[0366]

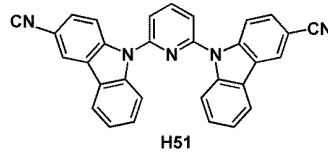
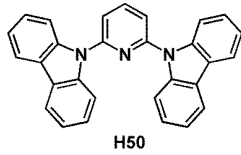
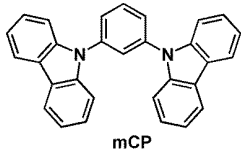
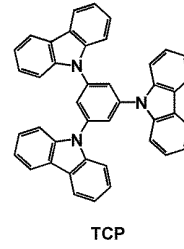
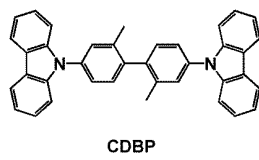
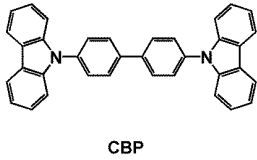
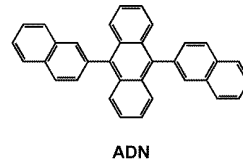
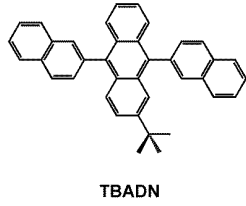
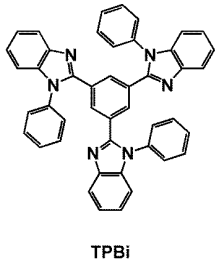
상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한다.

[0367]

상기 호스트는 하기 TPBi, TBADN, ADN("DNA"라고도 함), CBP, CDBP, TCP, Mcp, 화합물 H50 및 화합물 H51 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:

[0368]



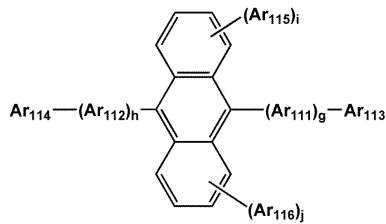


[0369]

[0370]

[0371] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 더 포함할 수 있다:

[0372] <화학식 301>



[0373]

[0374] 상기 화학식 301 중, Ar<sub>111</sub> 및 Ar<sub>112</sub>는 서로 독립적으로,

[0375] 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기; 및

[0376] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기;

[0377] 중에서 선택될 수 있다.

[0378] 상기 화학식 301 중 상기 Ar<sub>113</sub> 내지 Ar<sub>116</sub>은 서로 독립적으로,

[0379] C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기; 및

[0380] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기;

[0381] 중에서 선택될 수 있다.

[0382] 상기 화학식 301 중 g, h, i 및 j는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수, 예를 들면, 0, 1 또는 2일 수 있다.

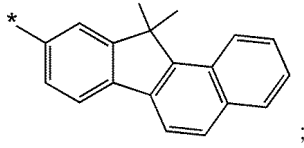
[0383] 상기 화학식 301 중, Ar<sub>113</sub> 내지 Ar<sub>116</sub>은 서로 독립적으로,

[0384] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기;

[0385] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기;

[0386] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기,

카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기; 및



[0387]

중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

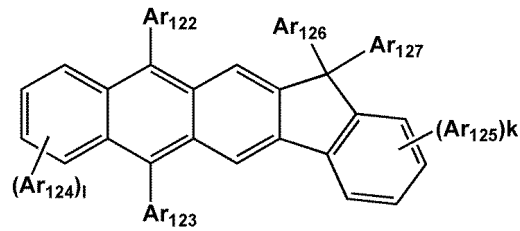
[0388]

또는, 상기 호스트는 하기 화학식 302로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

[0389]

<화학식 302>

[0390]



[0391]

상기 화학식 302 중 Ar<sub>122</sub> 내지 Ar<sub>125</sub>에 대한 상세한 설명은 상기 화학식 301의 Ar<sub>113</sub>에 대한 설명을 참조한다.

[0392]

상기 화학식 302 중 Ar<sub>126</sub> 및 Ar<sub>127</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기 또는 프로필기)일 수 있다.

[0393]

상기 화학식 302 중 k 및 l은 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 k 및 l은 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0394]

상기 유기 발광 소자가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및/또는 청색 발광층이 적층된 구조를 가짐으로써, 백색광을 방출할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0395]

상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0396]

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.

[0397]

다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.

[0398]

전자 수송 영역은 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0399]

예를 들어, 전자 수송 영역은 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층 또는 전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 전자 수송층은 단일층 또는 2 이상의 서로 다른 물질을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

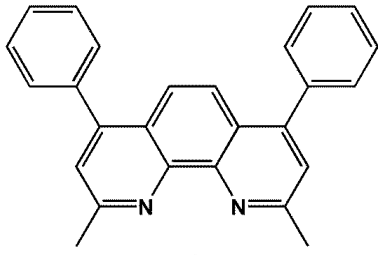
[0400]

상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참조한다.

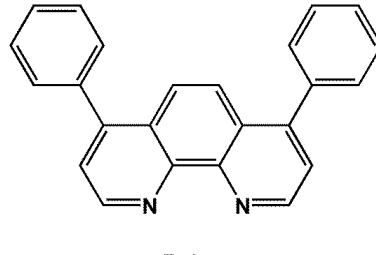
[0401]

상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP, Bphen 및 Balq 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0402]



**BCP**



**Bphen**

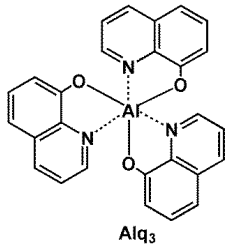
[0403]

[0404]

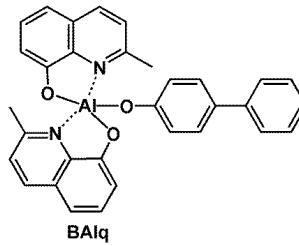
상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0405]

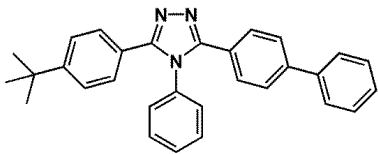
상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq<sub>3</sub>, BAiq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.



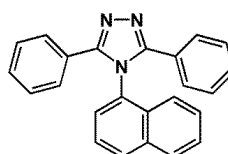
**Alq<sub>3</sub>**



**BAiq**



**TAZ**

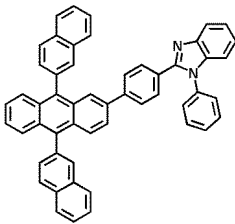


**NTAZ**

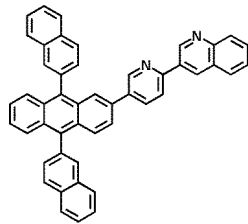
[0406]

[0407]

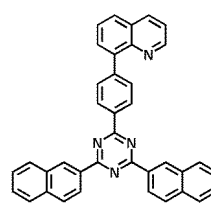
또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 내지 ET25 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



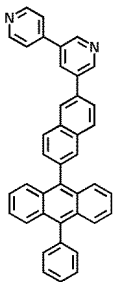
**ET1**



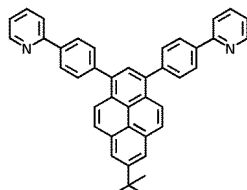
**ET2**



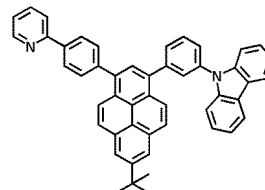
**ET3**



**ET4**

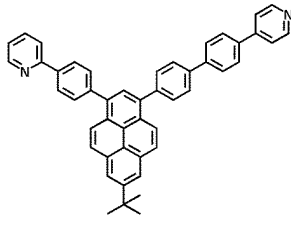


**ET5**

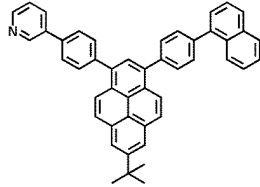


**ET6**

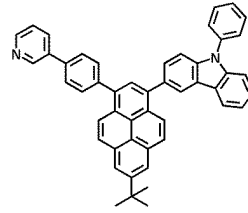
[0408]



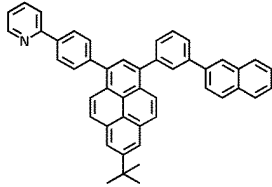
ET7



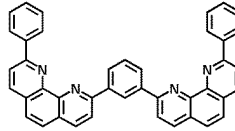
ET8



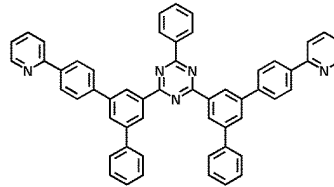
ET9



ET10

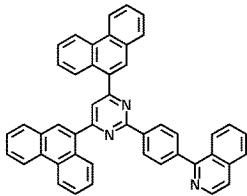


ET11

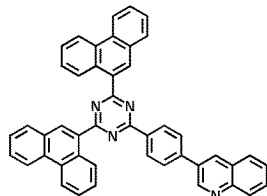


ET12

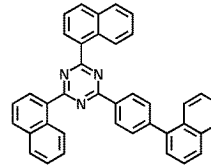
[0409]



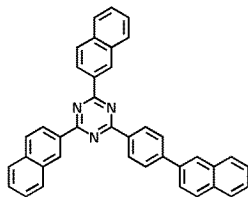
ET13



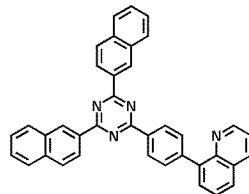
ET14



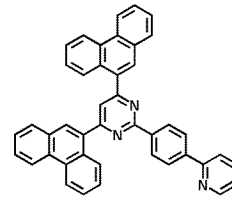
ET15



ET16

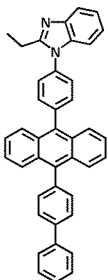


ET17

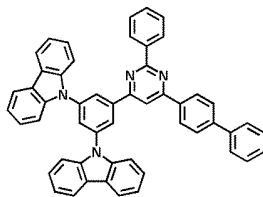


ET18

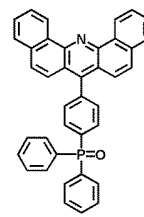
[0410]



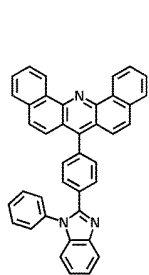
ET19



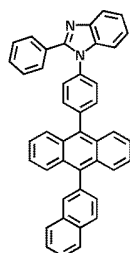
ET20



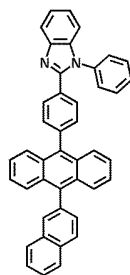
ET21



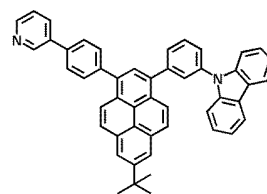
ET22



ET23



ET24



ET25

[0411]

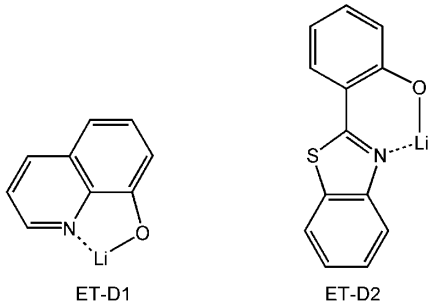
[0412]

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 전

자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0413] 상기 전자 수송층은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0414] 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.



[0415]

[0416] 또한 전자 수송 영역은, 제2전극(19)으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 전자 주입층(EIL)을 포함할 수 있다.

[0417] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O 및 BaO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0418] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 예를 들면, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0419] 상기 유기층(15) 상부로는 제2전극(19)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(19)은 캐소드일 수 있다. 상기 제2전극(19)용 물질로는 상대적으로 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 제2전극(19) 형성용 물질로 사용할 수 있다. 또는, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용하여 투과형 제2전극(19)을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0420] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0421] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

[0422] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 고발광 효율을 제공할 수 있으므로, 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물은 높은 진단 효율을 가질 수 있다.

[0423] 상기 진단용 조성물은, 각종 진단용 키트, 진단 시약, 바이오 센서, 바이오 마커 등에 다양하게 응용될 수 있다.

[0424] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기는 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 포화 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

[0425] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기는 -OA<sub>101</sub>(여기서, A<sub>101</sub>은 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.

[0426] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0427] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세

서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0428] 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기는 상기 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0429] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로푸라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0430] 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기는 상기 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0431] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기는 N, O, P, Si 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 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-디히드로푸라닐기, 2,3-디히드로티오펜일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0432] 본 명세서 중 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.
- [0433] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.
- [0434] 본 명세서 중 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기는 -OA<sub>102</sub>(여기서, A<sub>102</sub>는 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리키고, 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기(arylthio)는 -SA<sub>103</sub>(여기서, A<sub>103</sub>은 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리킨다.
- [0435] 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, 8 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예는 플루오레닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0436] 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, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 1 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은, 카바졸일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을

의미한다.

- [0437] 본 명세서 중 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 5 내지 30개의 탄소만을 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0438] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 1 내지 30개의 탄소 외에, N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 적어도 하나 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0439] 상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>7</sub>-C<sub>60</sub>알킬아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0440] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0441] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>), -B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0442] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0443] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>), -B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0444] -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>), -B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>);
- [0445] 중에서 선택되고,
- [0446] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>9</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>19</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>29</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>39</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-

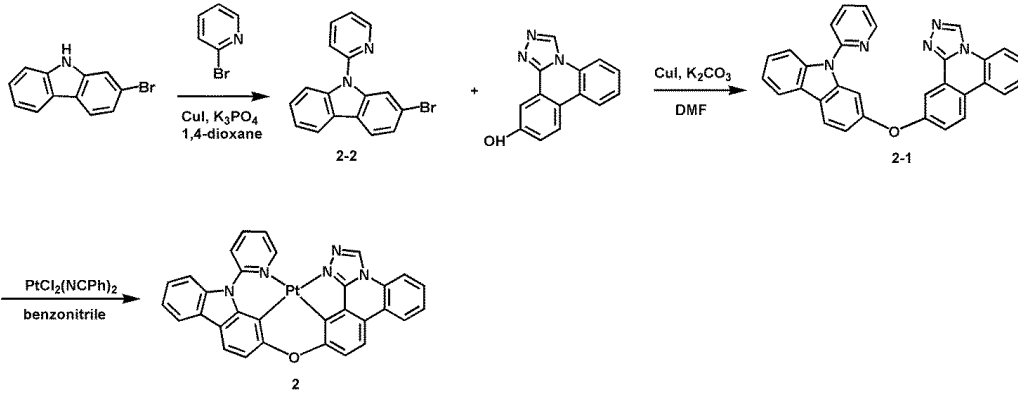


C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0447] 이하, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 하기 합성에 중 "'A' 대신 'B'를 사용하였다"란 표현 중 'B'의 사용량과 'A'의 사용량은 몰당량 기준으로 동일하다.

[0448] [실시예]

[0449] **합성예 1: 화합물 2의 합성**



[0450]

[0451] 중간체 2-2의 합성

[0452] 2-브로모-9H-카바졸 (2-bromo-9H-carbazole) 40.6mmol (10g), 2-브로모피리딘 (2-bromopyridine) 61.0mmol (9.6g), CuI 20.3mmol (3.9g), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 60.1mmol (12.9g) 및 1,2-다이아미노사이클로헥산 (1,2-diaminocyclohexane) 40.6mmol (4.6g)을 1,4-디옥산 (1,4-dioxane) 150ml과 혼합하고 120℃에서 12시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 반응물을 냉각시키고 에틸아세테이트와 물의 혼합물을 이용하여 추출한 유기층을 물로 3회 세정하고 마그네슘 설페이트로 건조시킨 다음, 감압 하에서 용매를 제거하여 수득한 조(crude) 생성물에 대하여 실리카겔컬럼 크로마토그래피(용리액: 다이클로로메탄 및 헥산)를 수행하여 중간체 2-2 (수율: 83%)를 수득하였다.

[0453] MALDI-TOF (m/z): 323.02 [M]<sup>+</sup>

[0454] 중간체 2-1의 합성

[0455] 중간체 2-2 21.7mmol (7g), [1,2,4]트리아졸로[1,5-F]페난트리딘-11-올([1,2,4]triazolo[1,5-f]phenanthridin-11-ol), CuI 4.4mmol (0.8g), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 43.4mmol (6.0g) 및 1-메틸 이미다졸 (1-methyl imidazole) 21.7mmol (1.8g)을 디메틸포름아마이드 (Dimethylformamide) 110ml에 넣고 130℃에서 48시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 반응물을 냉각시키고 에틸아세테이트와 물의 혼합물을 이용하여 추출한 유기층을 물로 3회 세정하고 마그네슘 설페이트로 건조시킨 다음, 실리카겔컬럼 크로마토그래피(용리액: 다이클로로메탄 및 헥산)를 수행하여 중간체 2-1 (수율: 29%)를 수득하였다.

[0456] MALDI-TOF (m/z): 478.16 [M]<sup>+</sup>

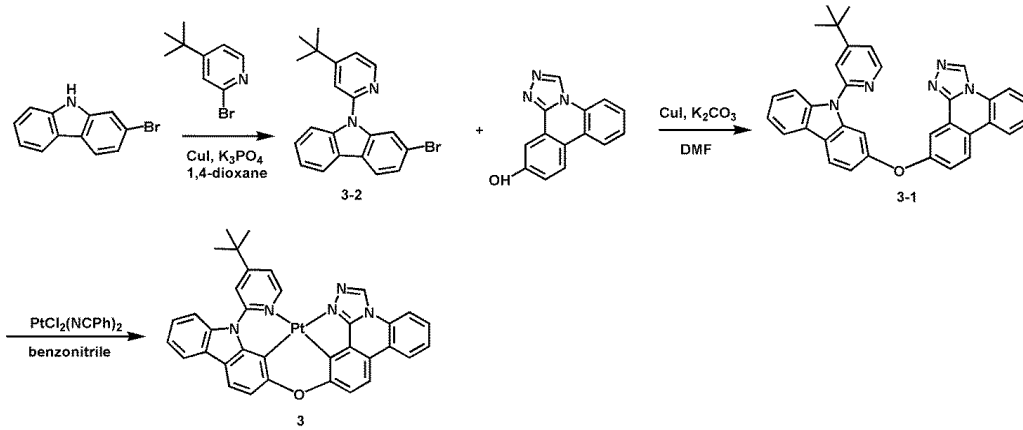
[0457] 화합물 2의 합성

[0458] PtCl<sub>2</sub>(NCPh)<sub>2</sub> 2.1mmol (1.0g) 및 중간체 2-1 2.1mmol (1.0g)을 벤조나이트릴(benzonitrile) (100 mL)과 혼합한 후, 질소 하에서 24 시간 동안 환류시켰다. 반응 종료 후 실온으로 냉각시킨 다음 용매를 모두 제거하여 수득한 고체를 건조시키고, 실리카겔컬럼 크로마토그래피(용리액: 다이클로로메탄 및 헥산)를 수행하여 화합물 2 (수율: 25%)을 수득하였다.

[0459] MALDI-TOF (m/z): 671.11 [M]<sup>+</sup>



[0460] 합성예 2: 화합물 3의 합성



[0461]

[0462] 중간체 3-2의 합성

[0463] 2-브로모-9H-카바졸 (2-bromo-9H-carbazole) 61.0mmol (15g), 2-브로모-4-(tert-butyl)피리딘 (2-bromo-4-(tert-butyl)pyridine) 91.4mmol (19.6g), CuI 30.5mmol (5.8g), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 91.4mmol (19.4g) 및 1,2-다이아미노사이클로헥산 (1,2-diaminocyclohexane) 61.0mmol (7.0g)을 1,4-디옥산 (1,4-dioxane) 225ml와 혼합하고 120℃에서 12시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 반응물을 냉각시키고 에틸아세테이트와 물의 혼합물을 이용하여 추출한 유기층을 물로 3회 세정하고 마그네슘 설페이트로 건조시킨 다음, 감압 하에서 용매를 제거하여 수득한 조 (crude) 생성물에 대하여 실리카겔컬럼 크로마토그래피(용리액: 다이클로로메탄 및 헥산)를 수행하여 중간체 3-2 (수율: 68%)를 수득하였다.

[0464] MALDI-TOF (m/z): 379.07 [M]<sup>+</sup>

[0465] 중간체 3-1의 합성

[0466] 중간체 2-2 대신 중간체 3-2를 사용하였다는 점을 제외하고는 합성예 1의 중간체 2-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 3-1 (수율 28%)를 합성하였다.

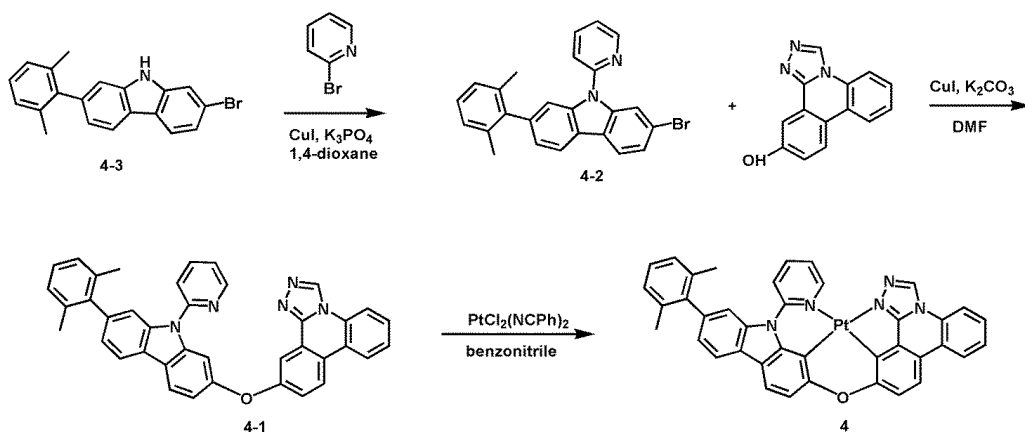
[0467] MALDI-TOF (m/z): 534.22 [M]<sup>+</sup>

[0468] 화합물 3의 합성

[0469] 중간체 2-1 대신 중간체 3-1을 사용하였다는 점을 제외하고는 합성예 1의 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 3 (수율 34%)를 합성하였다.

[0470] MALDI-TOF (m/z): 727.16[M]<sup>+</sup>

[0471] 합성예 3: 화합물 4의 합성



[0472]

[0473] 중간체 4-2의 합성

[0474] 2-브로모-9H-카바졸 (2-bromo-9H-carbazole) 대신 출발 물질 4-3을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 합성에 1의 중간체 2-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 4-2를 합성하였다.

[0475] 중간체 4-1의 합성

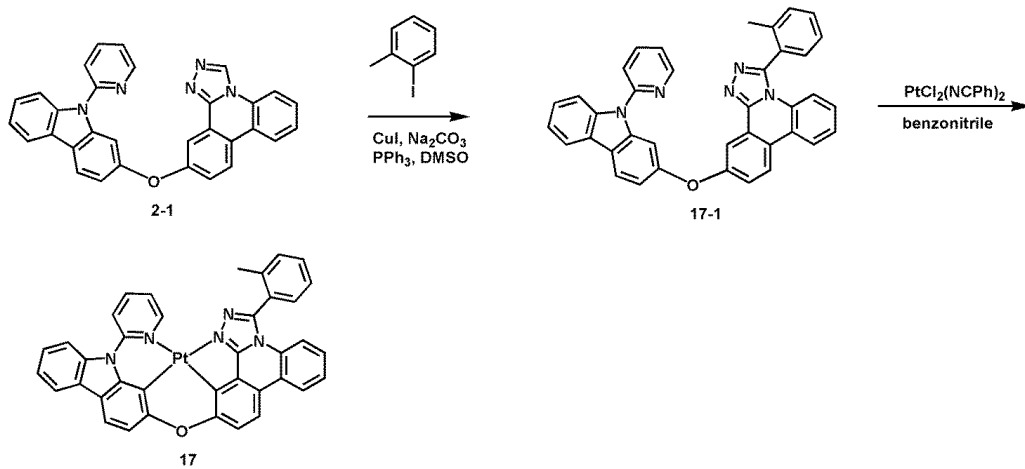
[0476] 중간체 2-2 대신 중간체 4-2을 사용하였다는 점을 제외하고는 합성에 1의 중간체 2-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 4-1을 합성하였다.

[0477] 화합물 4의 합성

[0478] 중간체 2-1 대신 중간체 4-1을 사용하였다는 점을 제외하고는 합성에 1의 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 4 (수율 34%)를 합성하였다.

[0479] MALDI-TOF (m/z): 775.17[M]<sup>+</sup>

[0480] 합성에 4: 화합물 17의 합성



[0481]

[0482] 중간체 17-1의 합성

[0483] 중간체 2-1 5.9mmol (2.8g), 1-요오드톨루엔 (1-iodotoluene) 6.4mmol (1.4g), CuI 5.9mmol (1.1g), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 11.7mmol (1.2g) 및 트리페닐포스핀(triphenylphosphine) 1.2mmol (0.3g)을 디메틸설폭시드(dimethyl sulfoxide) 30ml와 혼합하고 160℃에서 12시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 반응물을 냉각시키고 에틸아세테이트와 물의 혼합물을 이용하여 추출한 유기층을 물로 3회 세정하고 마그네슘 설페이트로 건조시킨 다음, 감압 하에 용매를 제거하여 수득한 조(crude) 생성물에 대하여 실리카겔컬럼 크로마토그래피(용리액: 에틸아세테이트 및 헥산)를 수행하여 중간체 17-1 (수율: 30%)를 수득하였다.

[0484] MALDI-TOF (m/z): 568.20 [M]<sup>+</sup>

[0485] 화합물 17의 합성

[0486] 중간체 2-1 대신 중간체 17-1을 사용하였다는 점을 제외하고는 합성에 1의 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 17 (수율 47%)을 합성하였다.

[0487] MALDI-TOF (m/z): 761.16 [M]<sup>+</sup>

[0488] 평가예 1 : T<sub>1</sub> 에너지 레벨 평가

[0489] 하기 표 2의 방법에 따라 각 화합물의 T<sub>1</sub> 에너지 레벨을 평가하여, 그 결과를 표 3에 정리하였다.

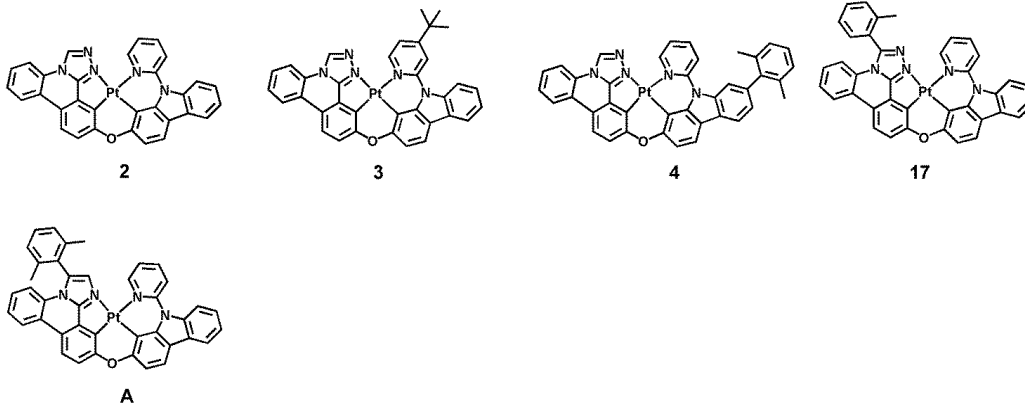
**표 2**

|                                    |                                                                                                                                                                                                                              |
|------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| [0490] T <sub>1</sub> 에너지 레벨 평가 방법 | 2-MeTHF와 각 화합물의 혼합물 (2-MeTHF 3 mL에 각 화합물의 농도가 10 mM가 되도록 녹임)을 석영 셀에 넣은 후 액체 질소 (77 K) 를 포함하는 cryostat (Oxford, DN) 에 넣고 발광 측정 기기 (PTI, Quanta Master 400)를 이용하여 인광 스펙트럼을 측정한 후, 상기 인광 스펙트럼의 피크 (peak) 파장으로부터 삼중항 에너지 레벨을 계산함 |
|------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

표 3

[0491]

| 화합물 No. | T <sub>1</sub> 에너지(eV) |
|---------|------------------------|
| 2       | 2.71                   |
| 3       | 2.71                   |
| 4       | 2.69                   |
| 17      | 2.70                   |
| A       | 2.68                   |



[0492]

[0493]

상기 표 3으로부터, 화합물 2, 3, 4 및 17은 화합물 A에 비하여 높거나 동등한 수준의 T<sub>1</sub> 에너지 레벨을 가짐을 확인할 수 있다.

[0494]

**평가예 2 : PL 스펙트럼 평가**

[0495]

화합물 2를 톨루엔에 10mM 농도로 희석시킨 후, 제논(Xenon) 램프가 장착되어 있는 ISC PC1 스펙트로플로로메터(Spectrofluorometer)를 이용하여, 상온에서 PL(Photoluminescence) 스펙트럼을 측정하고, 이를 화합물 3, 4 및 17에 대하여 반복하고, 그 결과를 표 4에 나타내었다. 화합물 3 및 17의 PL 스펙트럼은 도 2에 나타내었다.

표 4

[0496]

| 화합물 No. | 최대 발광 파장<br>(nm) | FWHM<br>(nm) |
|---------|------------------|--------------|
| 2       | 458              | 39           |
| 3       | 458              | 38           |
| 4       | 461              | 35           |
| 17      | 459              | 44           |

[0497]

상기 표 4로부터, 화합물 2, 3, 4 및 17은 작은 반폭치비를 갖는 진한 청색광을 방출할 수 있음을 확인할 수 있다.

[0498]

**평가예 3 : 발광 양자 효율(PLQY)의 평가**

[0499]

PMMA의 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 용액과 8wt%의 CBP와 화합물 3의 혼합물(화합물 3의 함량은 상기 혼합물 100중량부당 10중량부임)을 혼합한 후, 이로부터 수득한 결과물을 스핀 코터를 이용하여 석영 기판 상에 코팅한 다음, 80°C의 오븐에서 열처리한 후, 실온으로 냉각시켜 필름을 제조하였다.

[0500]

상기 필름의 양자 발광 효율(Luminescence quantum yields in film)을 제논 광원(xenon light source), 모노크로메터(monochromator), 포토닉 멀티채널 분석기(photonic multichannel analyzer), 및 적분구(integrating sphere)가 장착되어 있고, PLQY measurement software (Hamamatsu Photonics, Ltd., Shizuoka, Japan)를 채용한, Hamamatsu Photonics absolute PL quantum yield measurement system을 이용하여 평가하여 상기 화합물 3

의 PLQY in film을 확인하였다.

[0501] 상술한 바를 화합물 17에 대하여 반복하여, 화합물 3 및 17의 PLQY in film을 확인하고, 그 결과를 하기 표 5에 요약하였다.

표 5

[0502]

| 화합물 No. | PLQY in film |
|---------|--------------|
| 3       | 0.446        |
| 17      | 0.661        |

[0503] 상기 표 5로부터, 화합물 3 및 17은 높은 PLQY 값을 가짐을 확인할 수 있다.

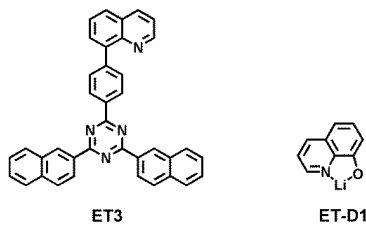
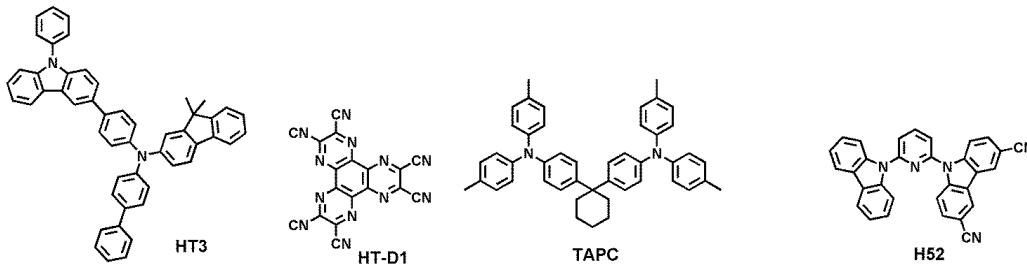
[0504] **실시예 1**

[0505] 1500Å 두께의 ITO (Indium tin oxide)전극(제1전극, 애노드)이 형성된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올을 차례로 사용하여 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 상기 기판을 이송하였다.

[0506] 상기 유리 기판의 ITO 전극 상에 화합물 HT3를 진공 증착하여 3500Å의 제1정공 주입층을 형성하고, 상기 제1정공 주입층 상에 화합물 HT-D1를 진공 증착하여 300Å 두께의 제2정공 주입층을 형성하고, 상기 제2정공 주입층 상에 TAPC를 진공 증착하여 100Å 두께의 전자 저지층을 형성하여, 정공 수송 영역을 형성하였다.

[0507] 상기 정공 수송 영역 상에 화합물 H52 및 화합물 17(도펀트, 10%)을 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0508] 상기 발광층 상에 화합물 ET3을 진공 증착하여 250Å 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 상기 전자 수송층 상에 ET-D1 (Liq)를 증착하여 5Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상에 1000Å 두께의 Al 제2전극(캐소드)를 형성함으로써, 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0509]

[0510] **비교예 A**

[0511] 발광층 형성시 도펀트로서 화합물 17 대신 화합물 A를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0512] **평가예 4: 유기 발광 소자의 특성 평가**

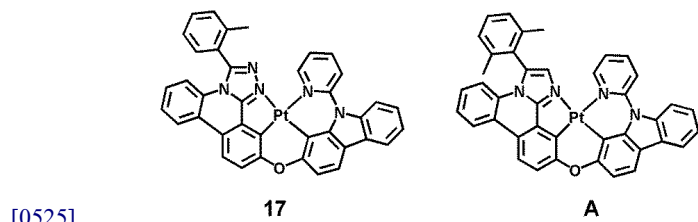
[0513] 상기 실시예 1 및 비교예 A에서 제작된 각각의 유기 발광 소자에 대하여 EL 스펙트럼, CIE 색좌표, 구동 전압, 외부 양자 발광 효율, 효율 및 환산 효율을 평가하였다. 구체적인 평가 방법은 하기와 같고, 그 결과는 하기 표 6과 같다. 실시예 1 및 비교예 A의 EL 스펙트럼은 도 3에 나타내었고, 실시예 1의 구동전압-전류밀도 그래

프는 도 4에 나타내었다.

- [0514] (1) EL 스펙트럼 측정
- [0515] 제조된 유기 발광 소자에 대해, 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 휘도가 500cd/m<sup>2</sup> 일 때의 EL 스펙트럼을 측정하여 결과를 얻은 후 최대 발광 파장 및 반폭치비를 평가하였다.
- [0516] (2) 전압에 따른 전류밀도 변화 측정
- [0517] 제조된 유기 발광 소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.
- [0518] (3) 전압에 따른 휘도 변화 측정
- [0519] 제조된 유기 발광 소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그 때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.
- [0520] (4) 환산 효율 측정
- [0521] 상기 (2) 및 (3)로부터 측정된 휘도와 전류 밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm<sup>2</sup>)의 전류 효율 (cd/A) 을 계산하였다. 그 다음, 상기 전류 효율을 (6)에서 측정된 CIE 색좌표의 y 값으로 나누어 환산 효율을 계산하였다.
- [0522] (5) 외부 양자 효율 측정
- [0523] 전류-전압계(Keithley 2400) 및 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 사용하여 평가하였다.

**표 6**

| [0524] | 도판트   | 최대 발광 파장 (nm) | 반폭치비 (nm) | CIE 색좌표 (x, y) | 구동 전압 (V)   | 최대 외부 양자 발광 효율 EQEmax (%) | 환산 효율 (효율/CIEy) |    |
|--------|-------|---------------|-----------|----------------|-------------|---------------------------|-----------------|----|
|        | 실시에 1 | 17            | 464       | 38             | 0.189,0.266 | 3.99                      | 12.9            | 67 |
|        | 비교예 A | A             | 462       | 86             | 0.228,0.356 | 7.1                       | 7.8             | 52 |



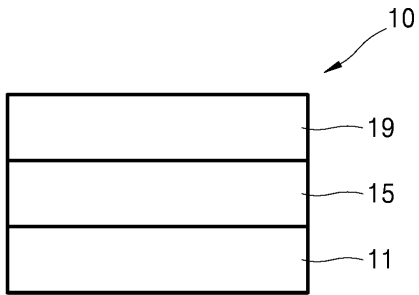
- [0525]
- [0526] 상기 표 6, 도 3 및 도 4로부터, 실시예 1의 유기 발광 소자는 비교예 A에 비하여, 좁은 반폭치폭 및 우수한 색 순도를 갖는 진한 청색광을 방출하면서, 동시에 낮은 구동 전압, 높은 외부 양자 발광 효율 및 높은 환산 발광 효율을 가짐을 확인할 수 있다.

**부호의 설명**

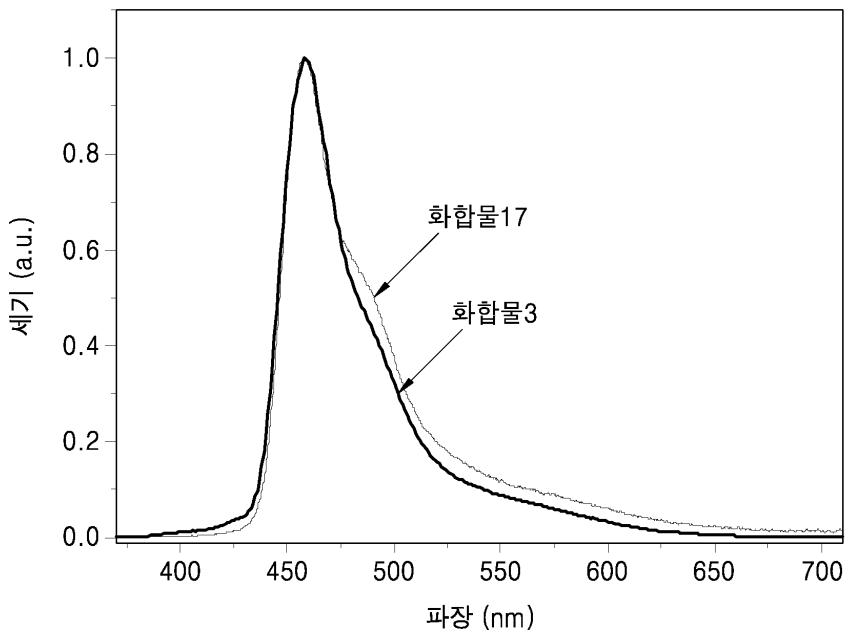
- [0527] 10: 유기 발광 소자
- 11: 제1전극
- 15: 유기층
- 19: 제2전극

도면

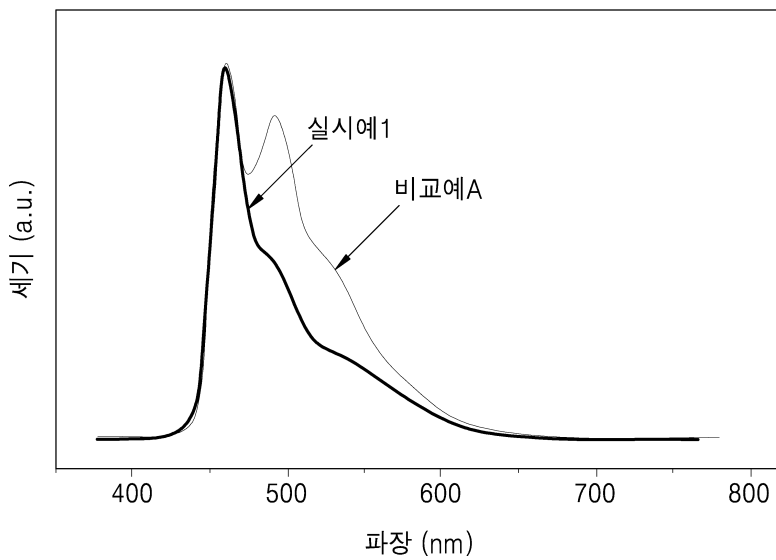
도면1



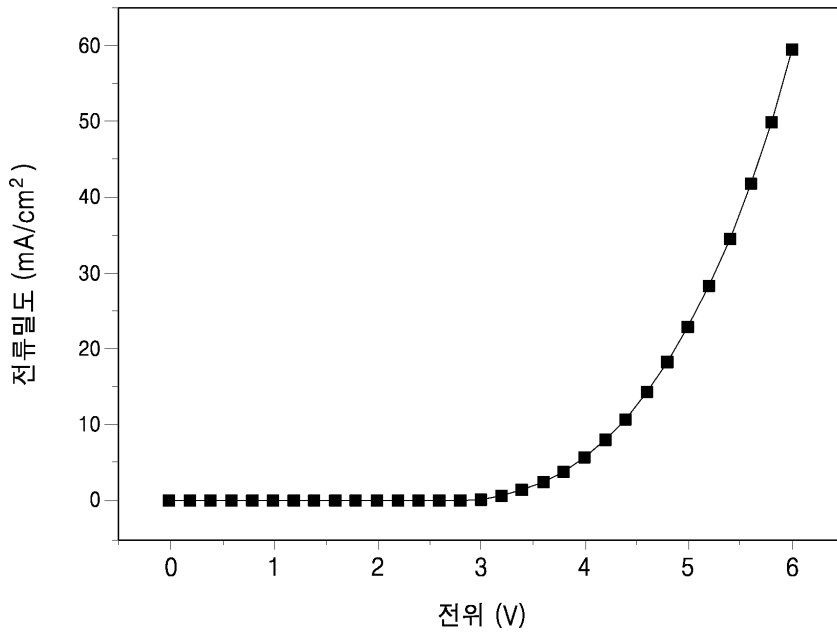
도면2



도면3



도면4



【심사관 직권보정사항】

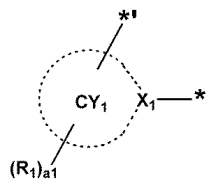
【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

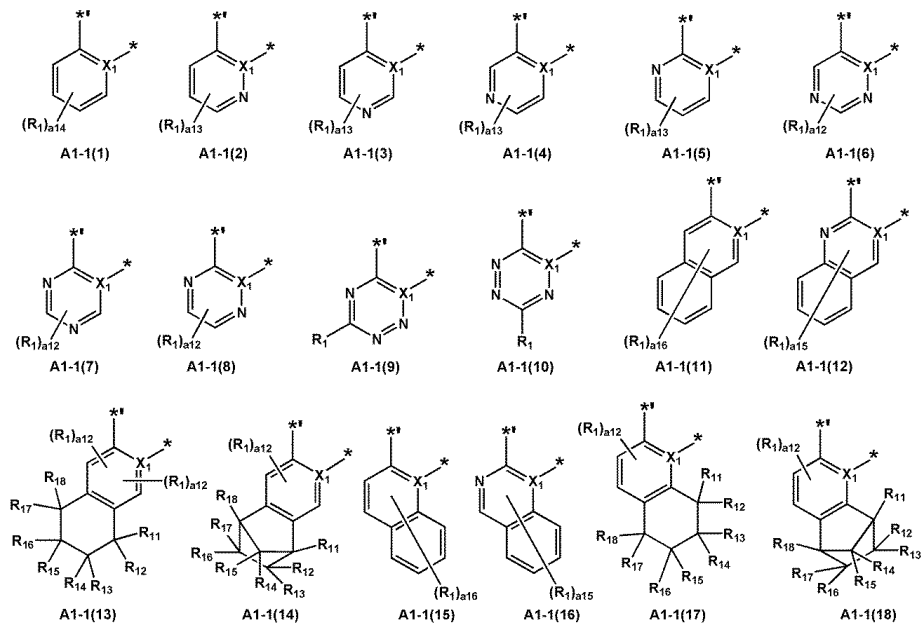
【보정세부항목】 청구항 6

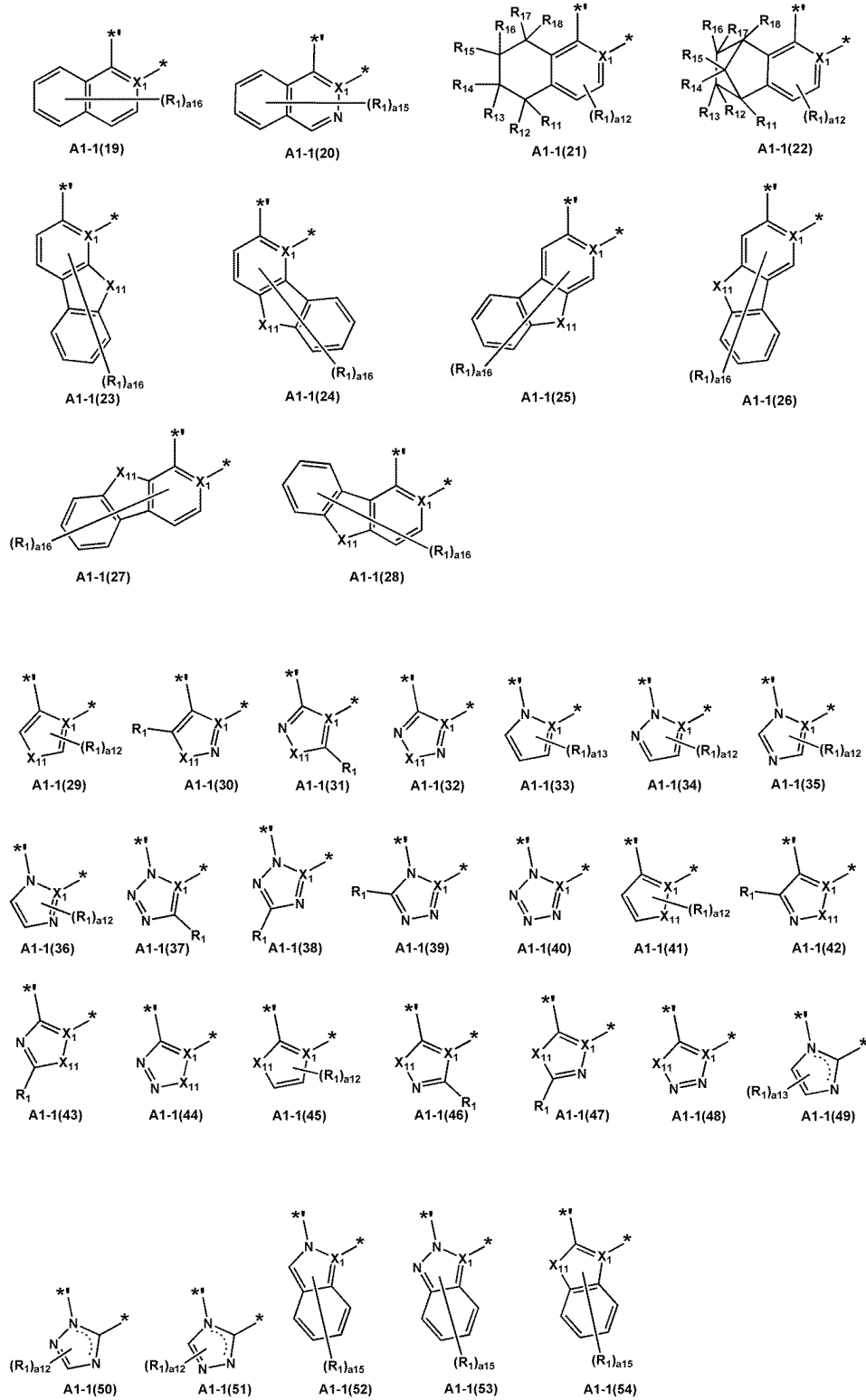
【변경전】

제1항에 있어서,

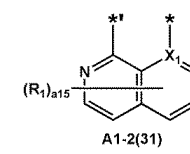
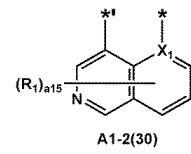
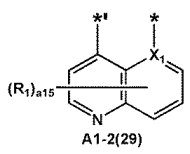
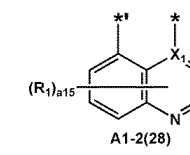
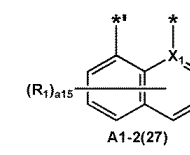
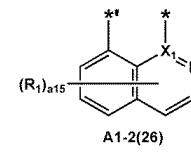
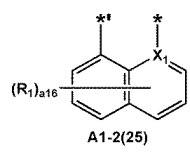
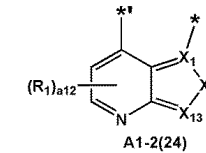
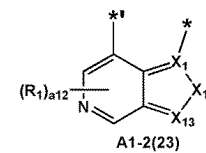
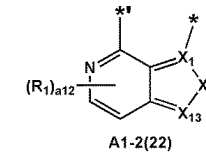
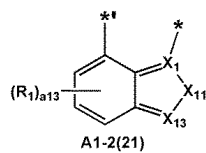
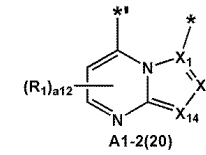
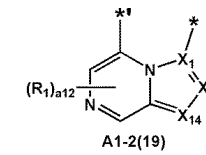
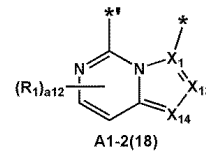
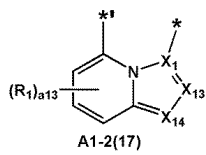
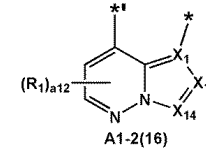
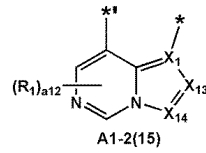
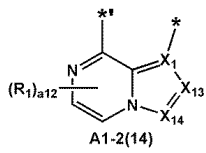
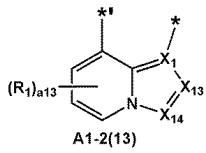
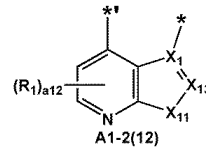
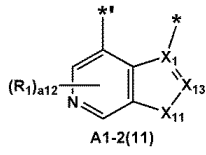
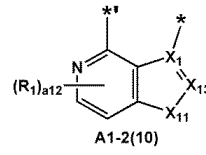
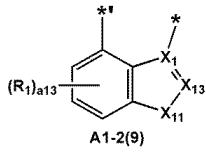
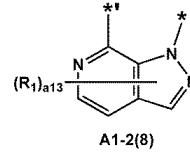
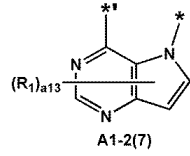
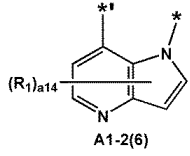
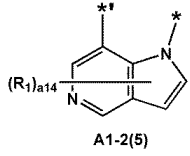
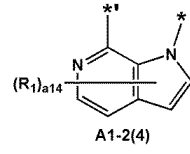
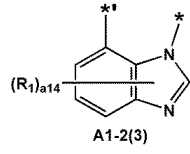
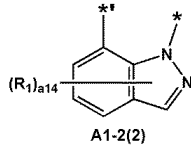
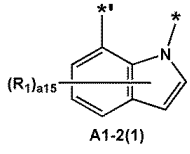


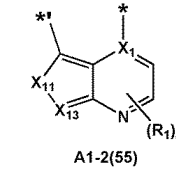
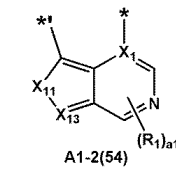
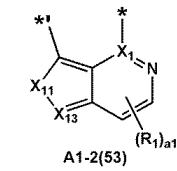
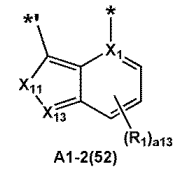
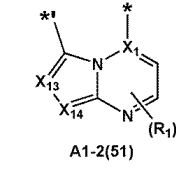
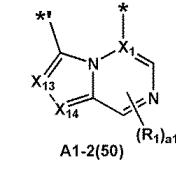
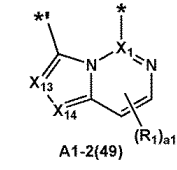
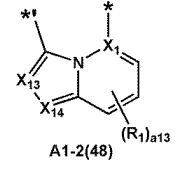
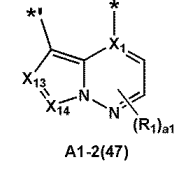
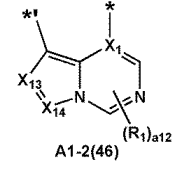
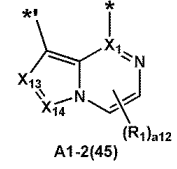
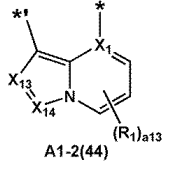
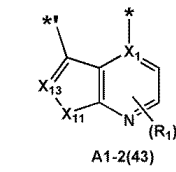
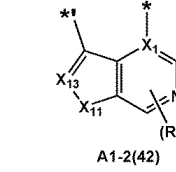
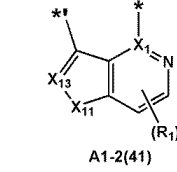
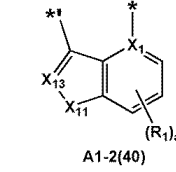
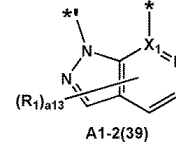
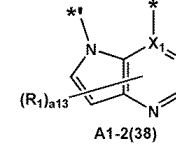
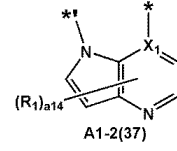
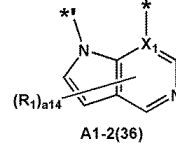
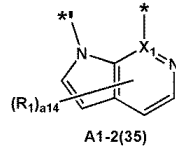
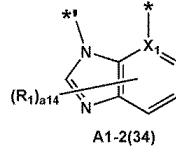
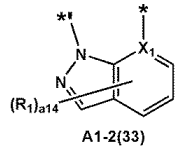
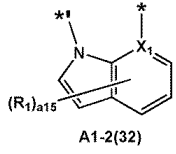
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A1-1(1) 내지 A1-1(54) 및 A1-2(1) 내지 A1-2(74) 중 하나로 표시된, 유기 금속 화합물:

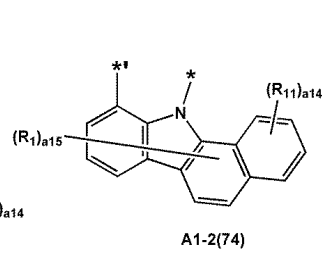
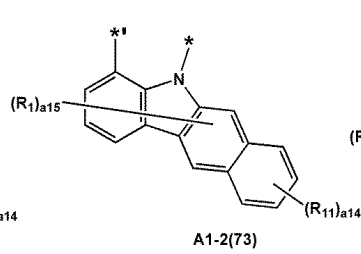
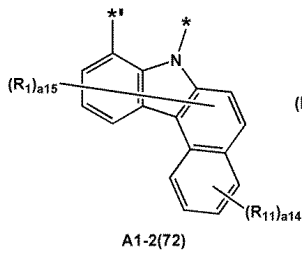
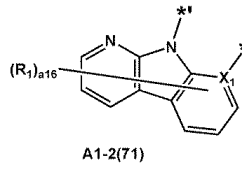
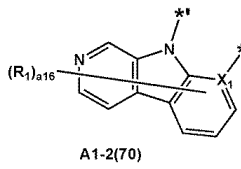
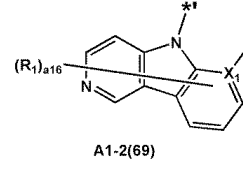
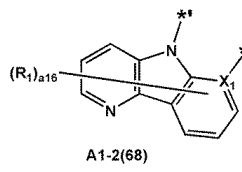
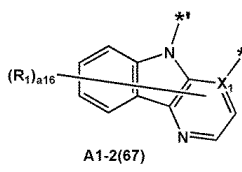
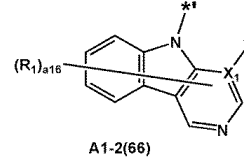
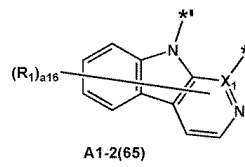
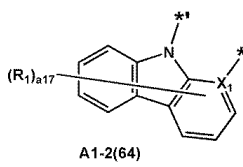
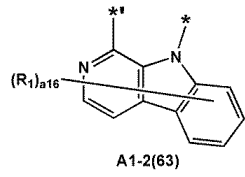
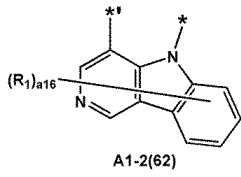
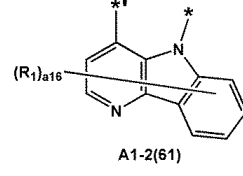
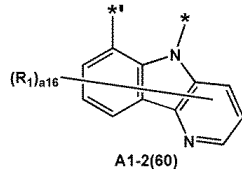
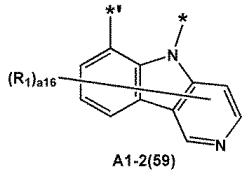
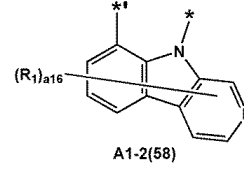
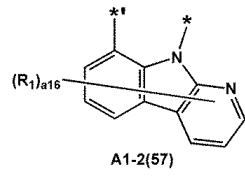
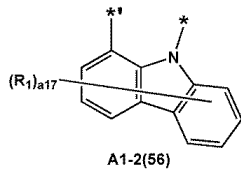












상기 화학식 A1-1(1) 내지 A1-1(54) 및 A1-2(1) 내지 A1-2(74) 중,  
 $X_1$  및  $R_1$ 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,  
 $X_{11}$ 은 O, S, N( $R_{11}$ ), C( $R_{11}$ )( $R_{12}$ ) 또는 Si( $R_{11}$ )( $R_{12}$ )이고,

X<sub>13</sub>은 N 또는 C(R<sub>13</sub>)이고,

X<sub>14</sub>는 N 또는 C(R<sub>14</sub>)이고,

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>18</sub>에 대한 설명은 각각 제1항 중 R<sub>1</sub>에 대한 설명과 동일하고,

a<sub>17</sub>은 0 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>16</sub>은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>15</sub>는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되되, 상기 화학식 A1-1(53) 중 a<sub>15</sub>는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>14</sub>는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>13</sub>은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

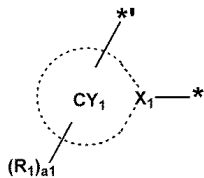
a<sub>12</sub>는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되되, 상기 화학식 A1-1(13) 중 a<sub>12</sub>는 0 또는 1이고,

\*는 화학식 1 중 A<sub>1</sub> 또는 M과의 결합 사이트이고,

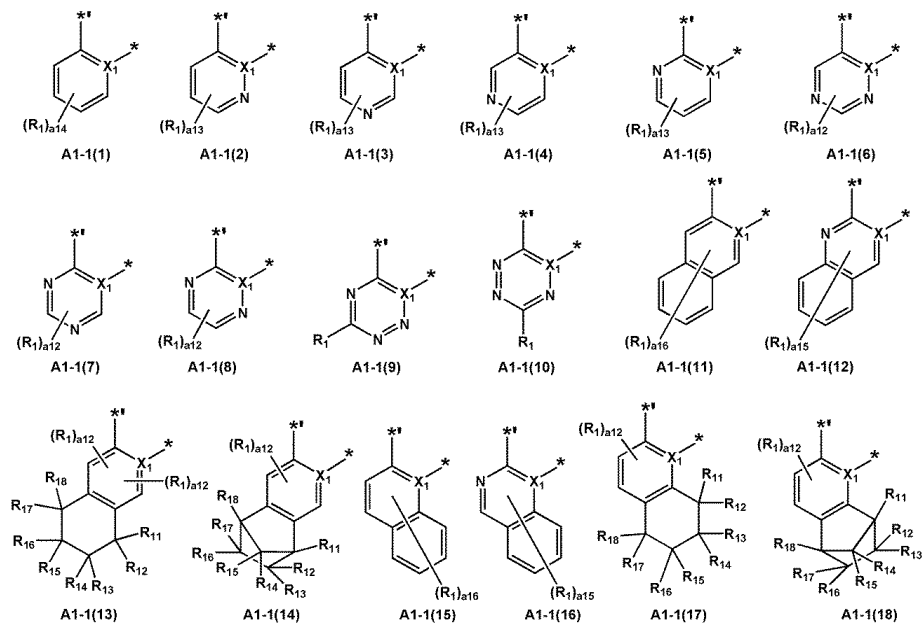
\*'은 화학식 1 중 T<sub>1</sub>과의 결합 사이트이다.

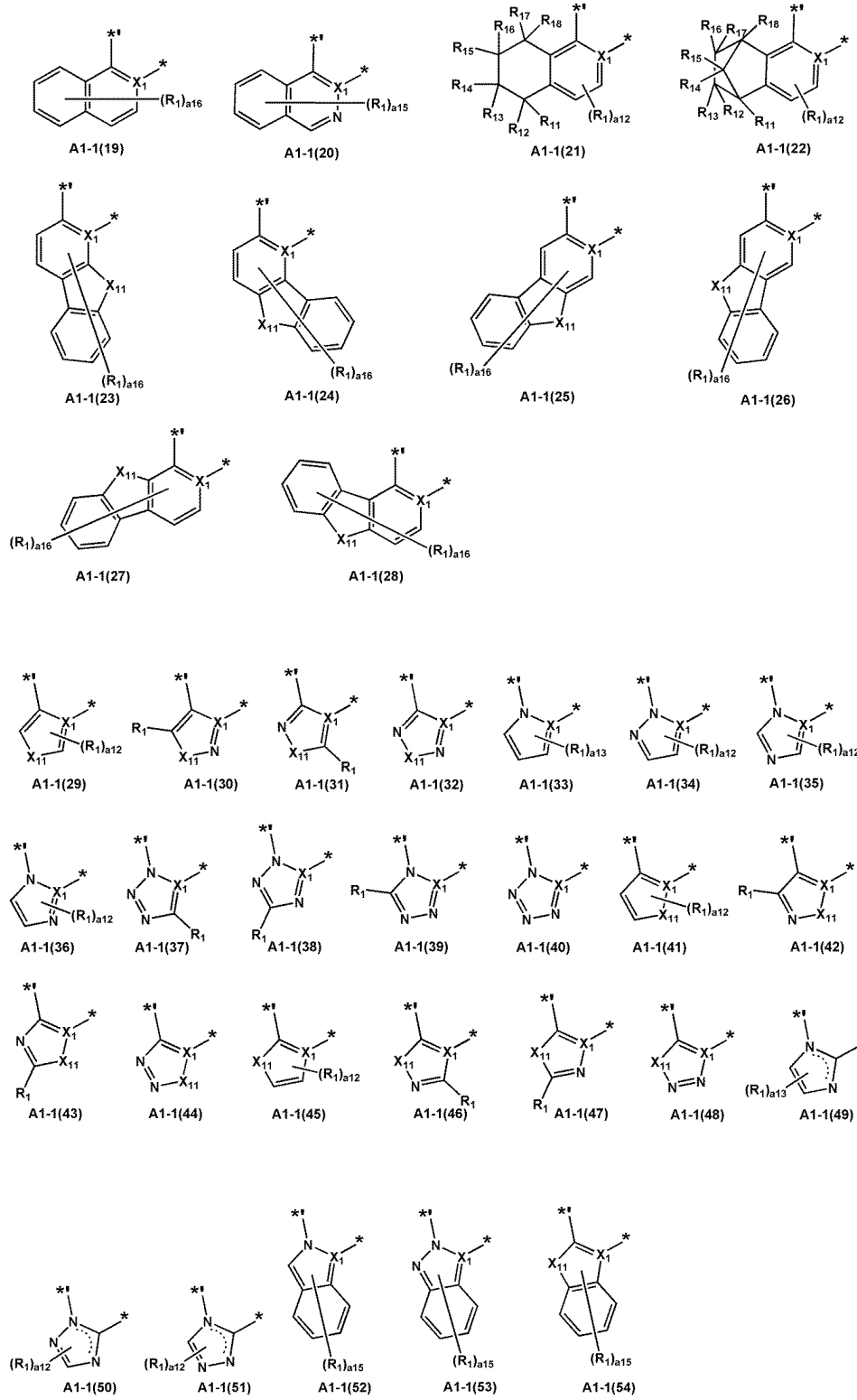
**【변경후】**

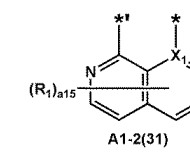
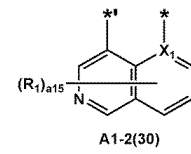
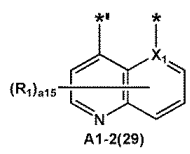
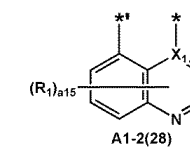
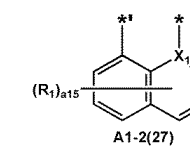
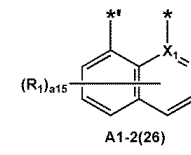
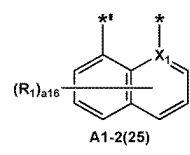
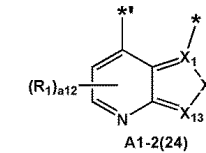
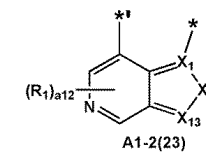
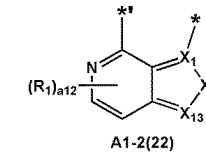
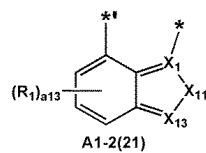
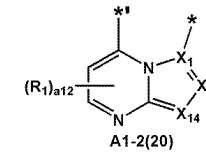
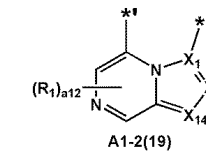
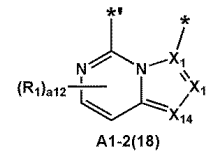
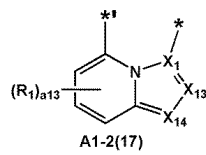
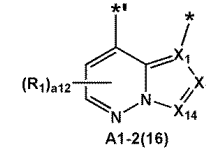
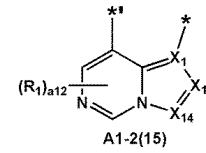
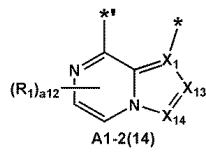
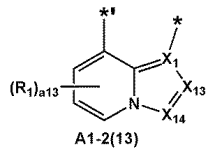
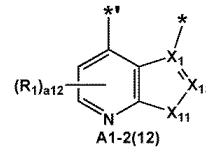
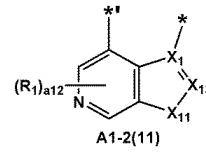
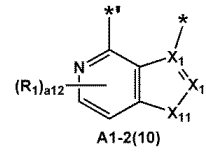
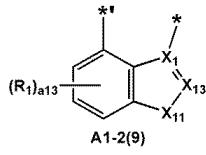
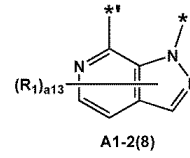
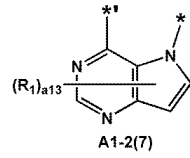
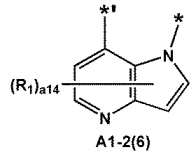
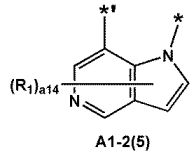
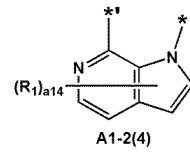
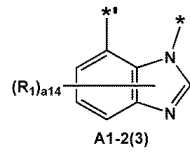
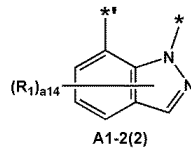
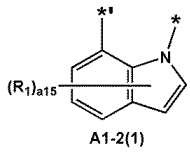
제1항에 있어서,

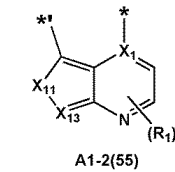
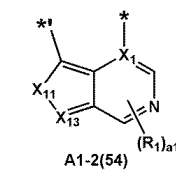
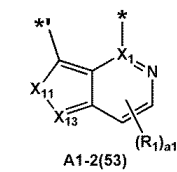
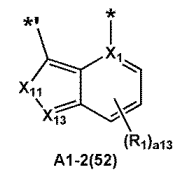
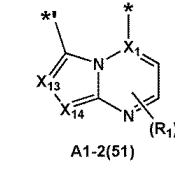
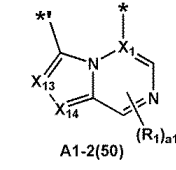
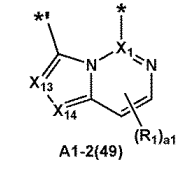
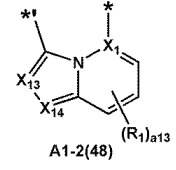
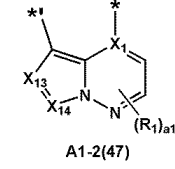
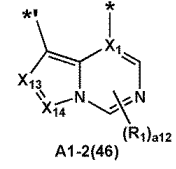
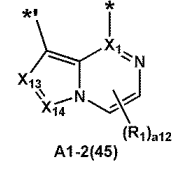
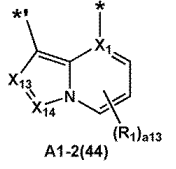
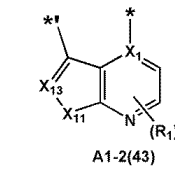
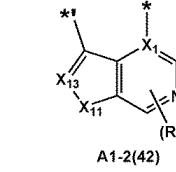
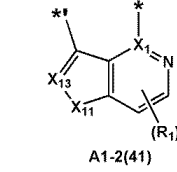
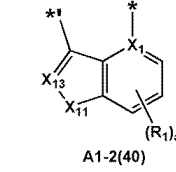
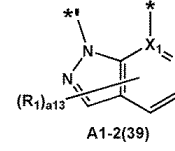
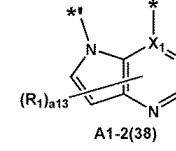
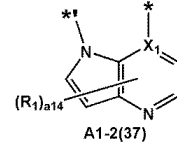
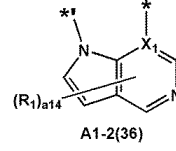
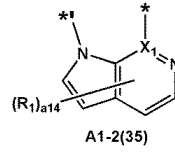
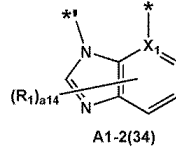
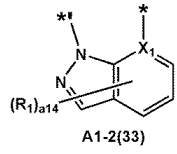
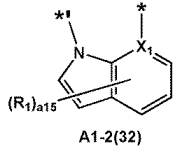


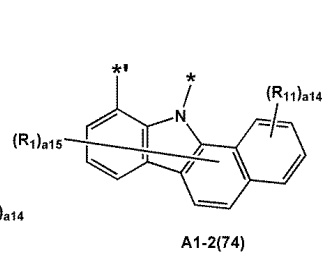
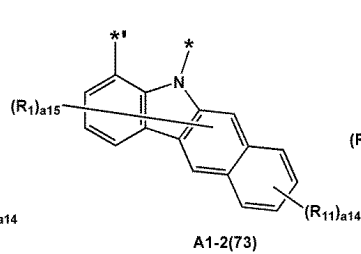
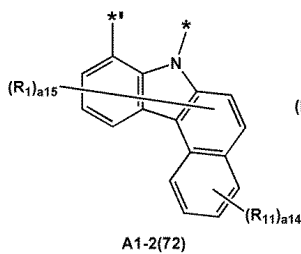
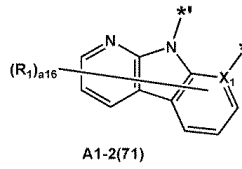
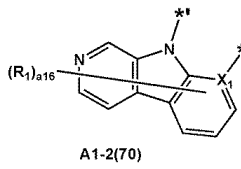
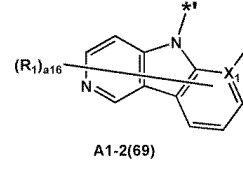
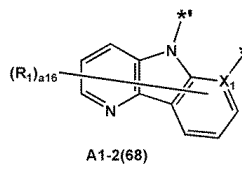
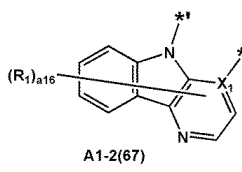
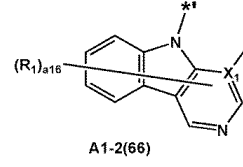
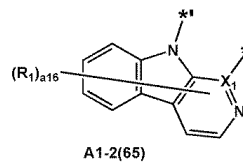
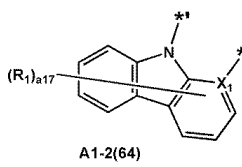
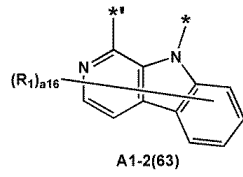
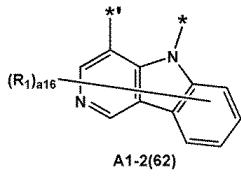
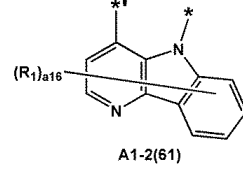
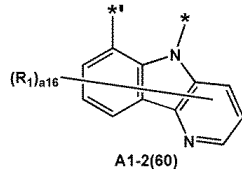
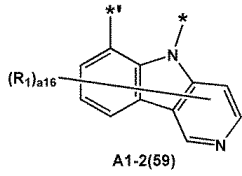
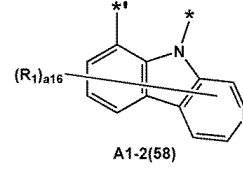
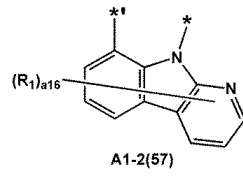
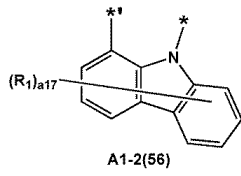
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A1-1(1) 내지 A1-1(54) 및 A1-2(1) 내지 A1-2(74) 중 하나로 표시된, 유기 금속 화합물:











상기 화학식 A1-1(1) 내지 A1-1(54) 및 A1-2(1) 내지 A1-2(74) 중,  
 $X_1$  및  $R_1$ 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,  
 $X_{11}$ 은 O, S, N( $R_{11}$ ), C( $R_{11}$ )( $R_{12}$ ) 또는 Si( $R_{11}$ )( $R_{12}$ )이고,



R<sub>11</sub> 내지 R<sub>18</sub>에 대한 설명은 각각 제1항 중 R<sub>1</sub>에 대한 설명과 동일하고,

a<sub>17</sub>은 0 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>16</sub>은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>15</sub>은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되되, 상기 화학식 A1-1(53) 중 a<sub>15</sub>는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>14</sub>는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>13</sub>은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>12</sub>는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되되, 상기 화학식 A1-1(13) 중 a<sub>12</sub>는 0 또는 1이고,

\*는 화학식 1 중 A<sub>1</sub> 또는 M과의 결합 사이트이고,

\*'은 화학식 1 중 T<sub>1</sub>과의 결합 사이트이다.

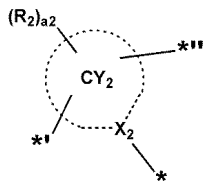
**【직권보정 2】**

**【보정항목】** 청구범위

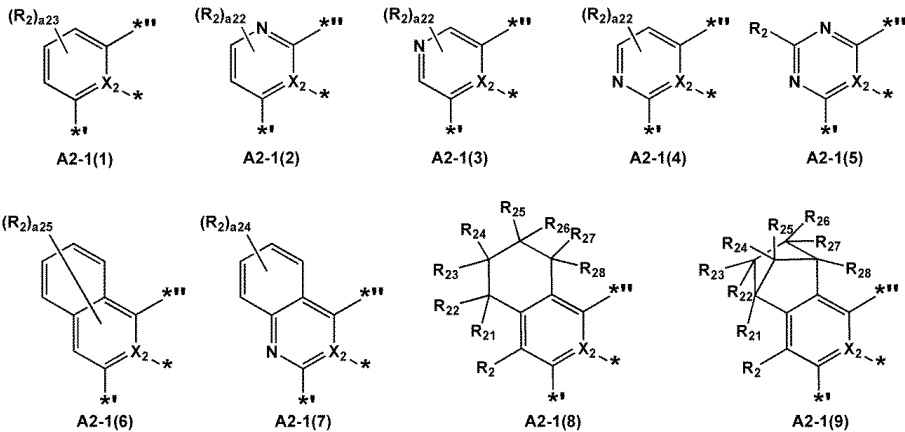
**【보정세부항목】** 청구항 7

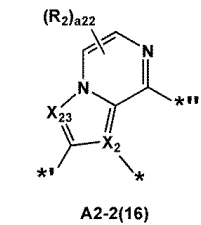
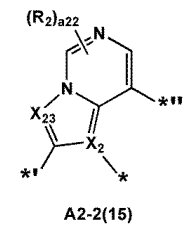
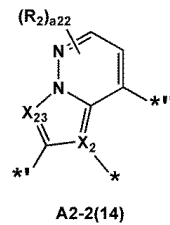
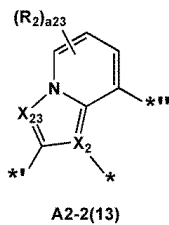
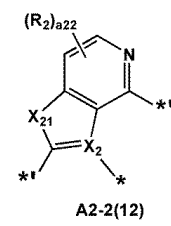
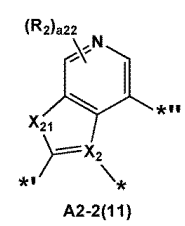
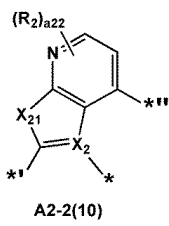
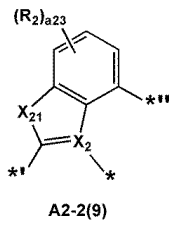
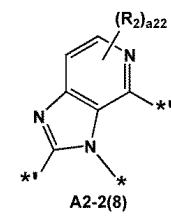
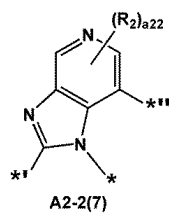
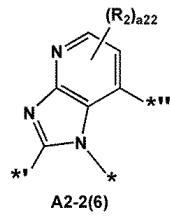
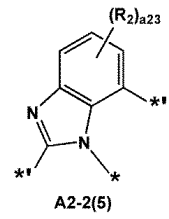
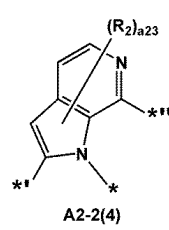
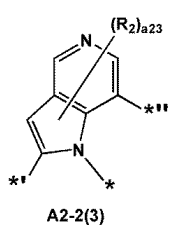
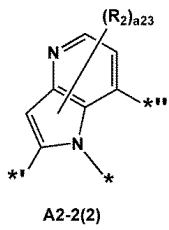
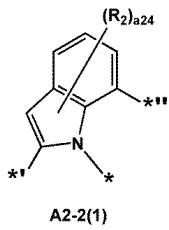
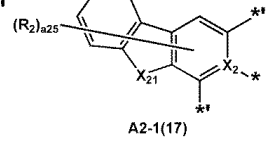
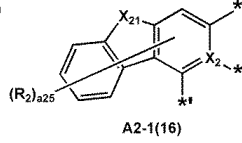
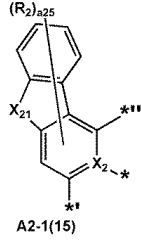
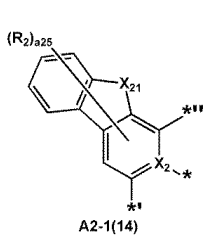
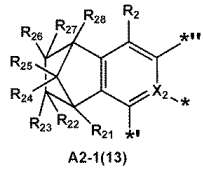
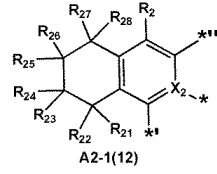
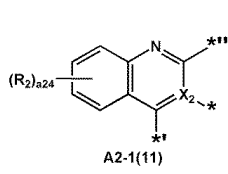
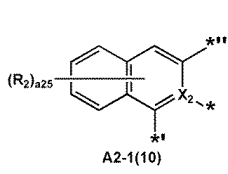
**【변경전】**

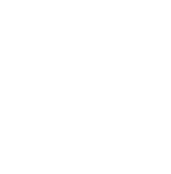
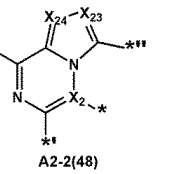
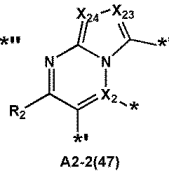
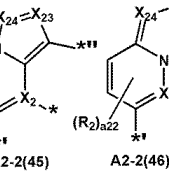
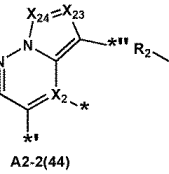
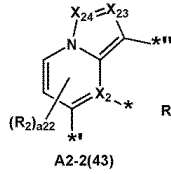
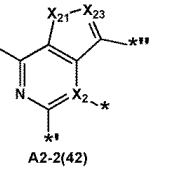
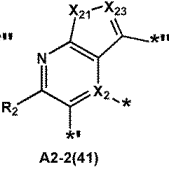
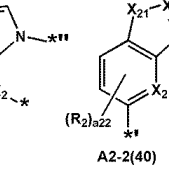
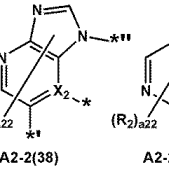
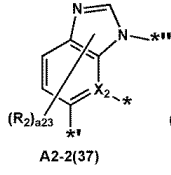
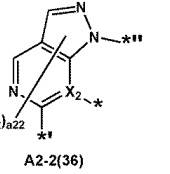
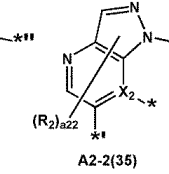
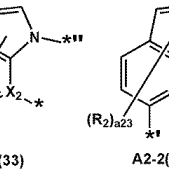
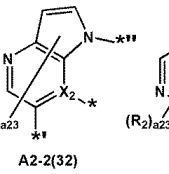
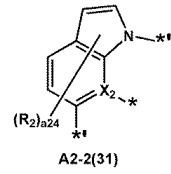
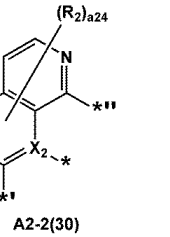
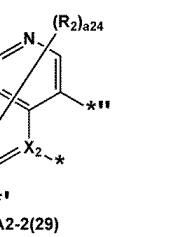
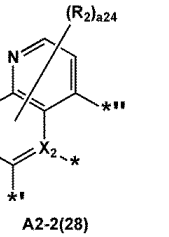
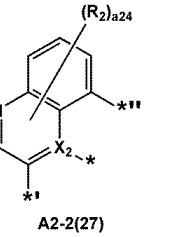
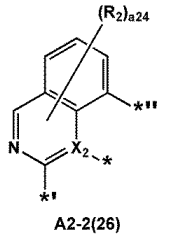
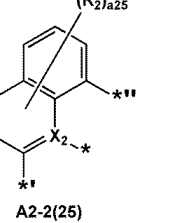
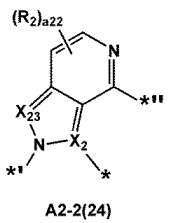
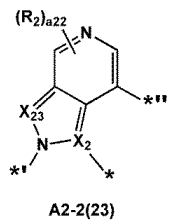
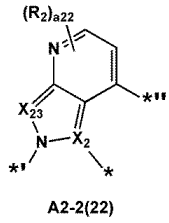
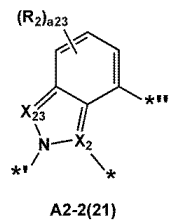
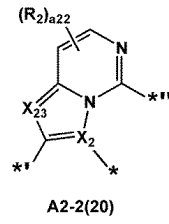
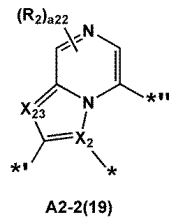
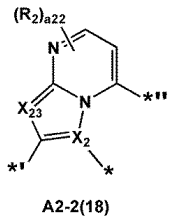
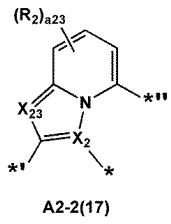
제1항에 있어서,

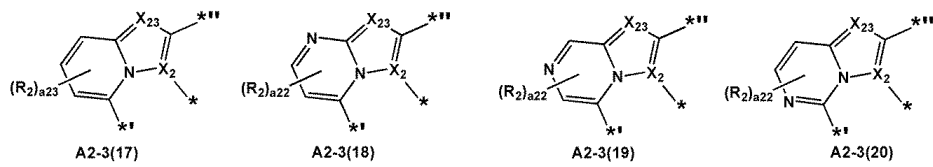
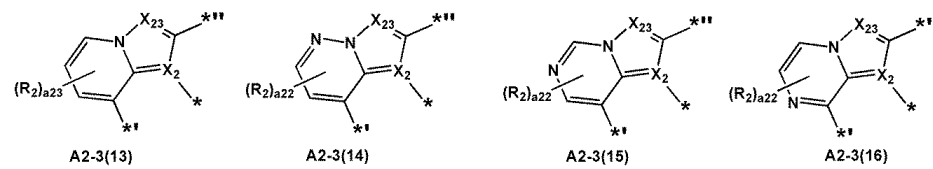
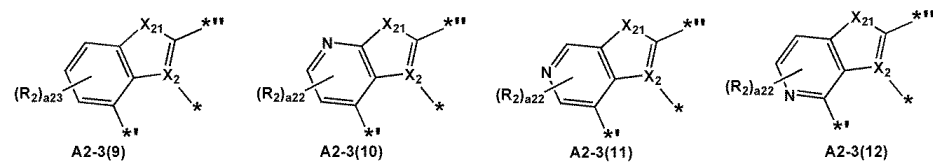
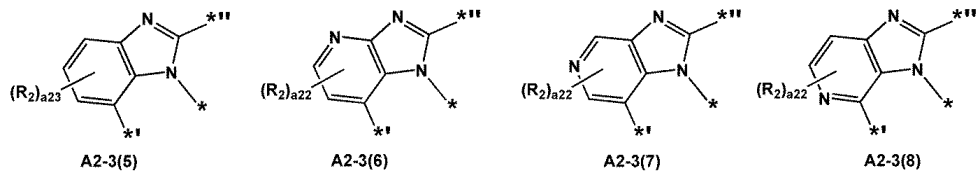
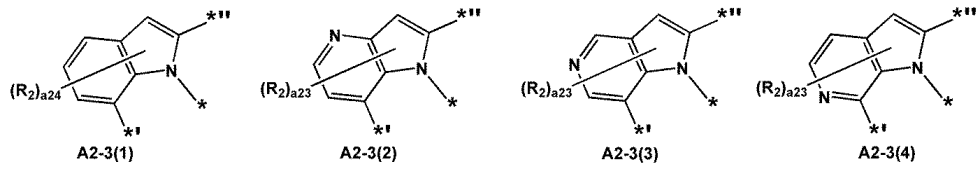
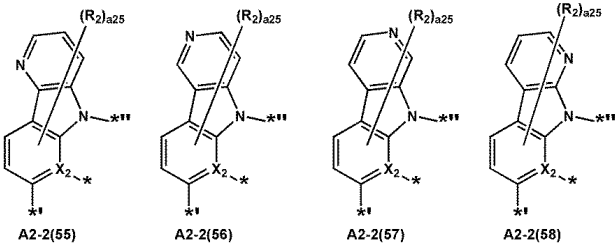
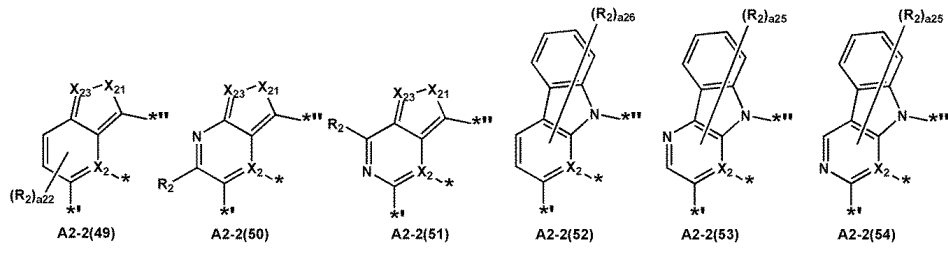


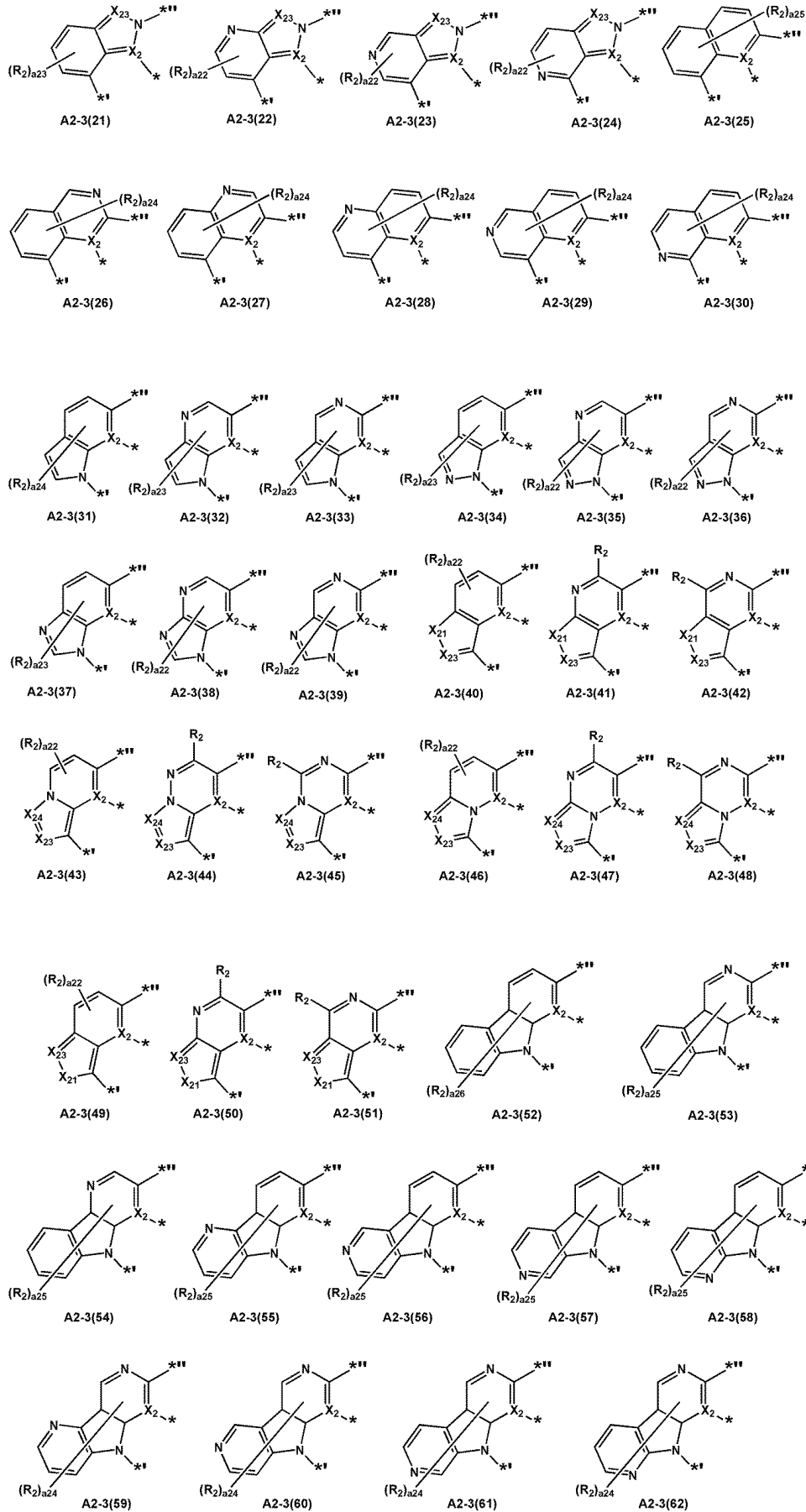
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(17), A2-2(1) 내지 A2-2(58) 및 A2-3(1) 내지 A2-3(62) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물:











상기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(17), A2-2(1) 내지 A2-2(58) 및 A2-3(1) 내지 A2-3(62) 중,

X<sub>2</sub> 및 R<sub>2</sub>에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

X<sub>21</sub>은 O, S, N(R<sub>21</sub>), C(R<sub>21</sub>)(R<sub>22</sub>) 또는 Si(R<sub>21</sub>)(R<sub>22</sub>)이고,

X<sub>23</sub>은 N 또는 C(R<sub>23</sub>)이고,

X<sub>24</sub>는 N 또는 C(R<sub>24</sub>)이고,

R<sub>21</sub> 내지 R<sub>28</sub>에 대한 설명은 각각 제1항 중 R<sub>2</sub>에 대한 설명과 동일하고,

a<sub>26</sub>은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>25</sub>는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>24</sub>는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>23</sub>은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>22</sub>는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

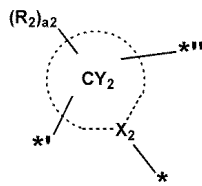
\*는 화학식 1 중 A<sub>2</sub> 또는 M과의 결합 사이트이고,

\*'은 화학식 1 중 T<sub>1</sub>과의 결합 사이트이고,

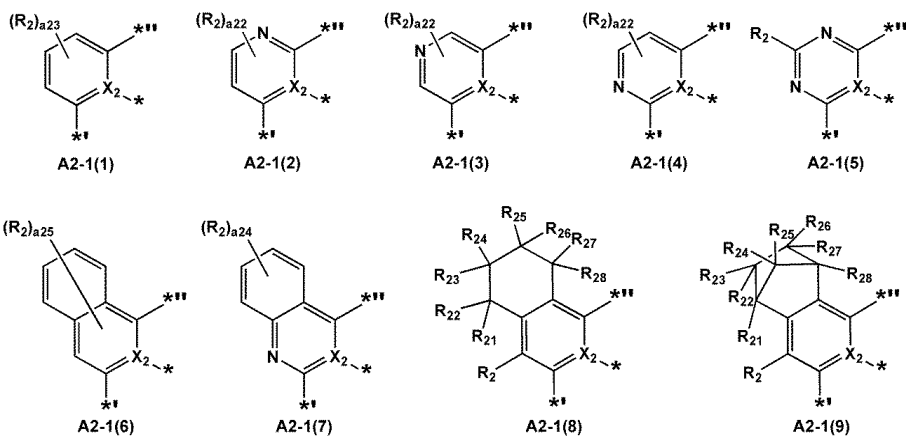
\*"은 화학식 1 중 T<sub>2</sub>와의 결합 사이트이다.

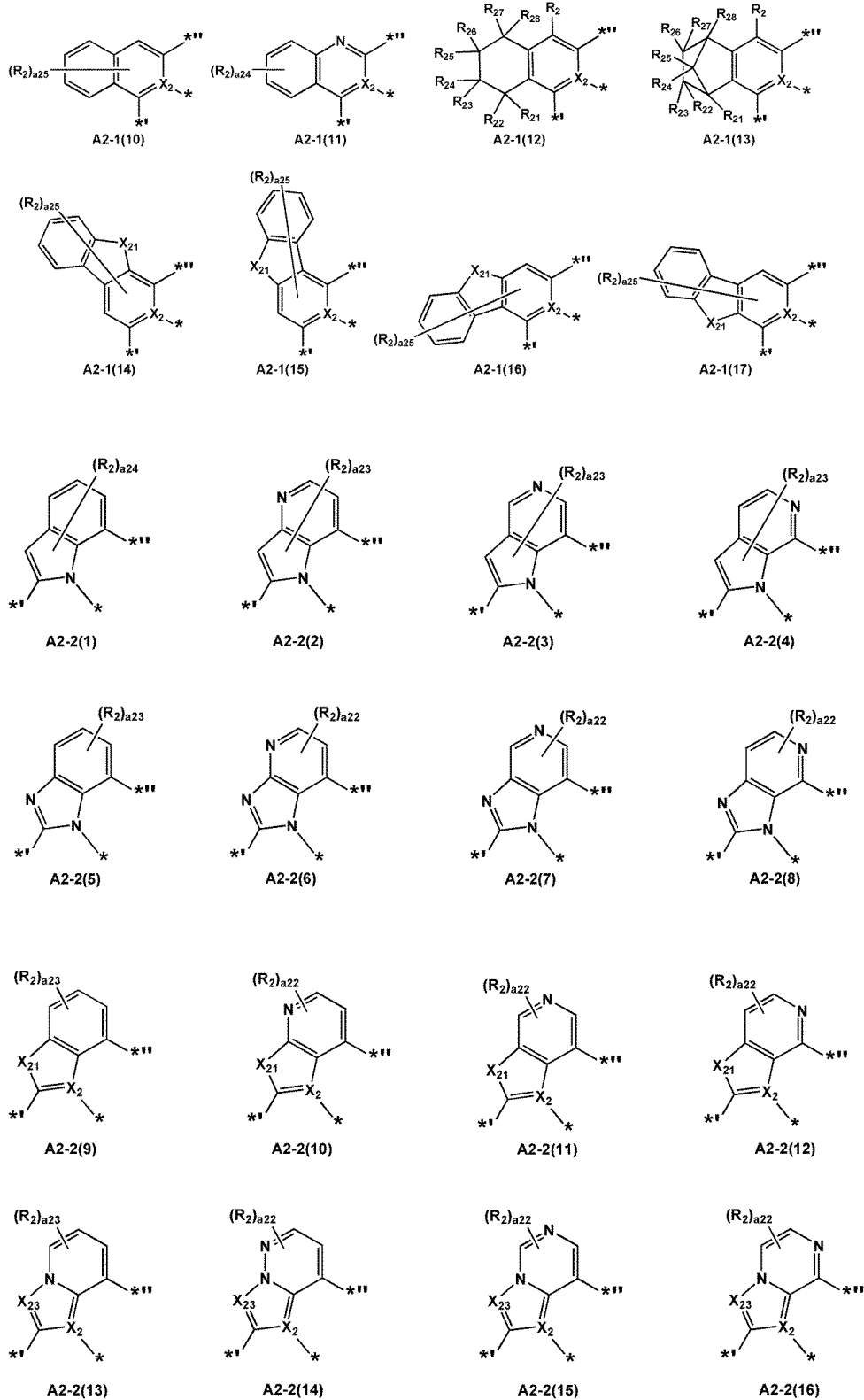
**【변경후】**

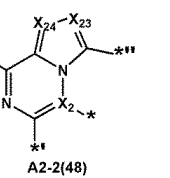
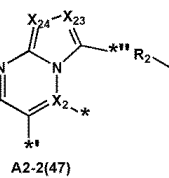
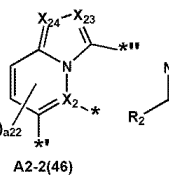
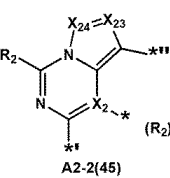
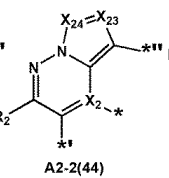
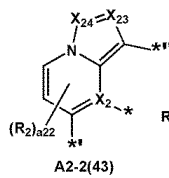
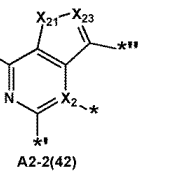
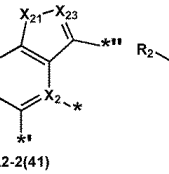
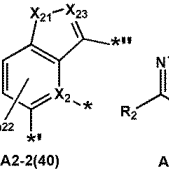
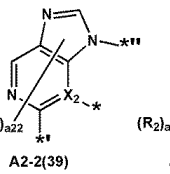
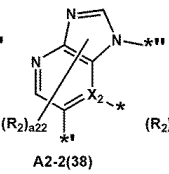
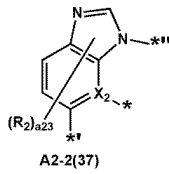
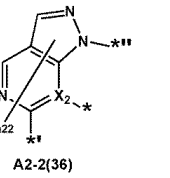
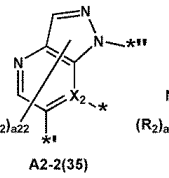
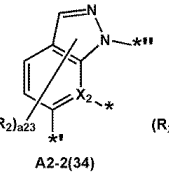
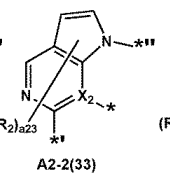
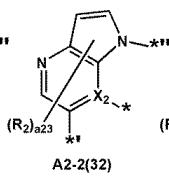
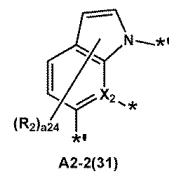
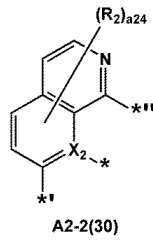
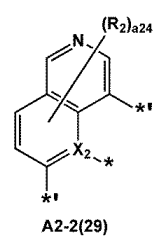
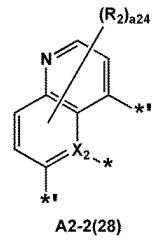
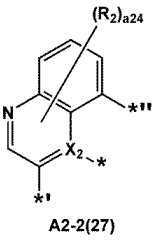
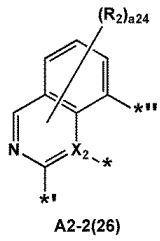
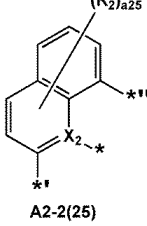
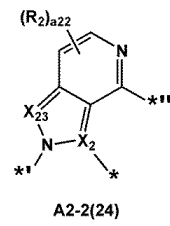
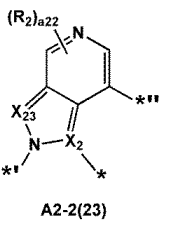
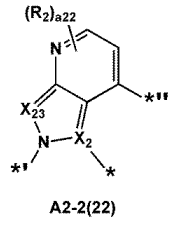
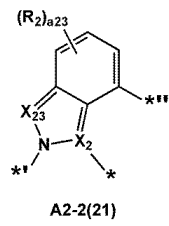
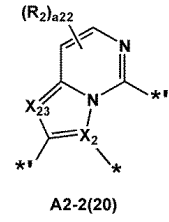
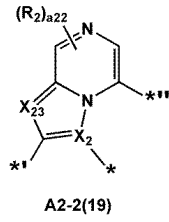
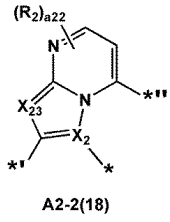
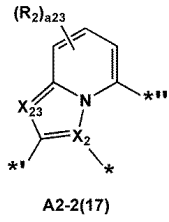
제1항에 있어서,



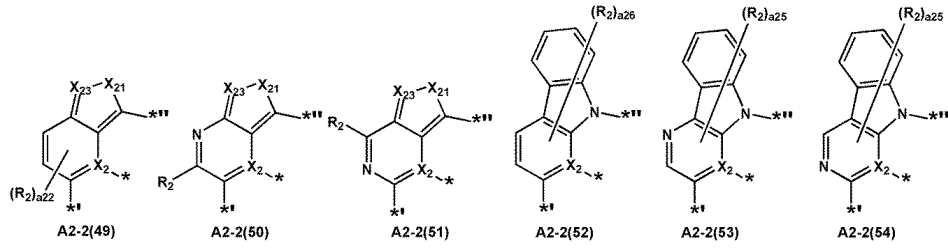
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(17), A2-2(1) 내지 A2-2(58) 및 A2-3(1) 내지 A2-3(62) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물:

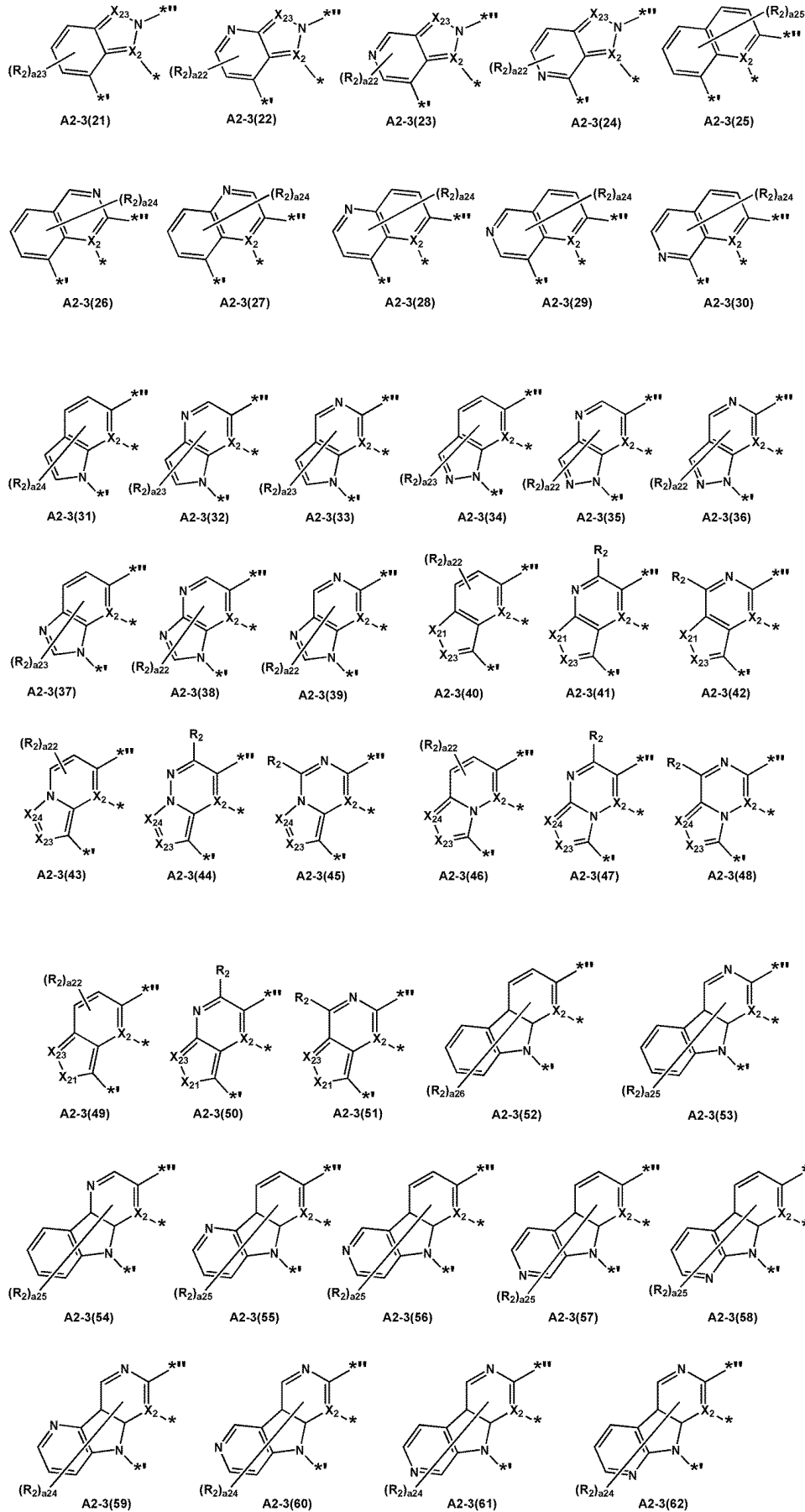












상기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(17), A2-2(1) 내지 A2-2(58) 및 A2-3(1) 내지 A2-3(62) 중,

$X_2$  및  $R_2$ 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

$X_{21}$ 은 O, S, N( $R_{21}$ ), C( $R_{21}$ )( $R_{22}$ ) 또는 Si( $R_{21}$ )( $R_{22}$ )이고,

$R_{21}$  내지  $R_{28}$ 에 대한 설명은 각각 제1항 중  $R_2$ 에 대한 설명과 동일하고,

a26은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

a25는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a24는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a23은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a22는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

\*는 화학식 1 중  $A_2$  또는 M과의 결합 사이트이고,

\*'은 화학식 1 중  $T_1$ 과의 결합 사이트이고,

\*"은 화학식 1 중  $T_2$ 와의 결합 사이트이다.