



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2021년02월08일
(11) 등록번호 10-2213660
(24) 등록일자 2021년02월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 5/06 (2006.01) C07F 3/02 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2014-0053101
(22) 출원일자 2014년05월01일
심사청구일자 2019년04월25일
(65) 공개번호 10-2015-0126095
(43) 공개일자 2015년11월11일
(56) 선행기술조사문헌
JP2002305083 A*
(뒷면에 계속)

(73) 특허권자
삼성전자주식회사
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)
삼성에스디아이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20 (공세동)
(72) 발명자
황규영
경기도 안산시 상록구 건건8길 10, 106동 702호
(건건동, 건건e-편한세상아파트)
권오현
경기도 용인시 기흥구 한보라2로 141, 801동 405호
(공세동, 화성파크드림프라브아파트)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리앤목록특허법인

전체 청구항 수 : 총 18 항

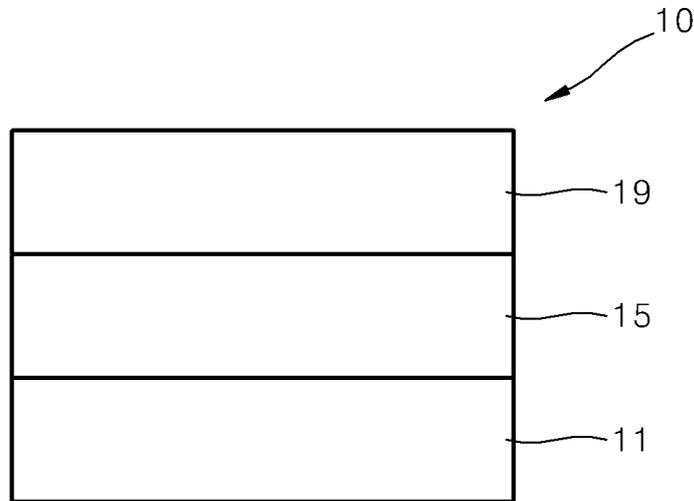
심사관 : 방성철

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

(57) 요약

유기금속 화합물 및 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제시된다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

최현호

서울특별시 송파구 올림픽로 399, 12동 402호 (신천동, 진주아파트)

김창우

경기도 의왕시 고산로 56 (고천동)

이승재

경기도 의왕시 고산로 56 (고천동)

최병기

경기도 화성시 동탄반석로 99, 419동 1401호 (반송동, 서해그랑블아파트)

(56) 선행기술조사문헌

KR1019990086810 A*

KR1020080085137 A*

US20040124769 A1*

US20050019605 A1*

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

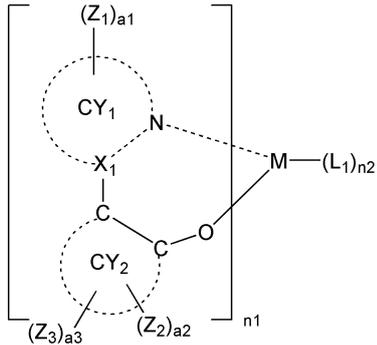
명세서

청구범위

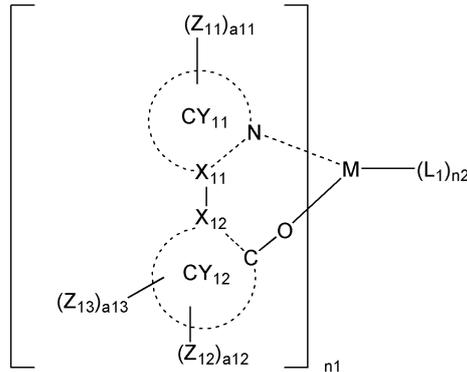
청구항 1

하기 화학식 1, 2 또는 3으로 표시되는 유기금속(organometallic) 화합물:

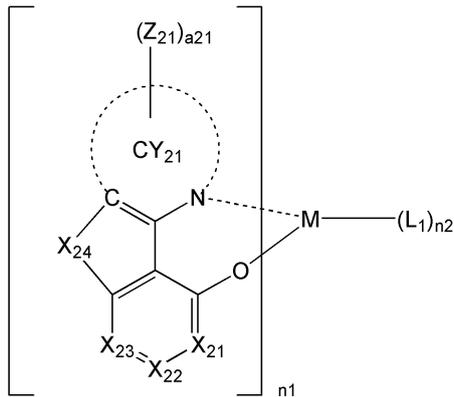
<화학식 1>



<화학식 2>



<화학식 3>



상기 화학식 1, 2 및 3 중,

M은 서로 독립적으로, 알루미늄(Al), 갈륨(Ga), 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg) 또는 아연(Zn)이고;

CY₁ 및 CY₁₁는 서로 독립적으로, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 트리아진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 퀴녹살린, 퀴나졸린 및 벤조이소퀴놀린 중에서 선택되고;

CY₂ 및 CY₂₁는 서로 독립적으로, 함질소 헤테로 시클릭 그룹(nitrogen-containing hetero cyclic group)이고;

CY₁₂는 방향족 시클릭 그룹(aromatic cyclic group) 또는 비-방향족 시클릭 그룹(non-aromatic cyclic group) 중에서 선택되고;

X₁은 N 또는 C이고, X₁₁은 N 또는 C이고, X₁₂는 N 또는 C이고, X₂₁은 N 또는 CR₂₁이고, X₂₂는 N 또는 CR₂₂이고, X₂₃은 N 또는 CR₂₃이고, X₂₄는 S, O, Si(R₂₄)(R₂₅) 또는 N(R₂₆)이고;

Z₁, Z₂, Z₁₁, Z₁₂, Z₂₁, R₂₁ 내지 R₂₆은 서로 독립적으로,

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, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;

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 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;

페닐기(phenyl), 펜탈레닐기(pentalenyl), 인데닐기(indenyl), 나프틸기(naphthyl), 아줄레닐기(azulenyl), 헵탈레닐기(heptalenyl), 인다세닐기(indacenyl), 아세나프틸기(acenaphthyl), 플루오레닐기(fluorenyl), 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기(phenalenyl), 페난트레닐기(phenanthrenyl), 안트라세닐기(anthracenyl), 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 파이레닐기(pyrenyl), 크라이세닐기(chrysenyl), 나프타세닐기(naphthacenyl), 피세닐기(picenyl), 페릴레닐기(perylenyl), 펜타페닐기(pentaphenyl), 헥사세닐기(hexacenyl), 펜타세닐기(pentacenyl), 루비세닐기(rubicenyl), 코로네닐기(coronenyl), 오발레닐기(ovalenyl), 피롤일기(pyrrolyl), 티오펜일기(thiophenyl), 퓨라닐기(furanyl), 이미다졸일기(imidazolyl), 피라졸일기(pyrazolyl), 티아졸일기(thiazolyl), 이소티아졸일기(isothiazolyl), 옥사졸일기(oxazolyl), 이소옥사졸일기(isooxazolyl), 피리디닐기(pyridinyl), 피라지닐기(pyrazinyl), 피리미디닐기(pyrimidinyl), 피리다지닐기(pyridazinyl), 이소인돌일기(isoindolyl), 인돌일기(indolyl), 인다졸일기(indazolyl), 푸리닐기(purinyl), 퀴놀리닐기(quinolinyl), 이소퀴놀리닐기(isoquinolinyl), 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 프탈라지닐기(phthalazinyl), 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐기(quinoxalinyl), 퀴나졸리닐기(quinazoliny), 시놀리닐기(cinnolinyl), 카바졸일기(carbazolyl), 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 아크리디닐기(acridinyl), 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 페나지닐기(phenazinyl), 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 벤조퓨라닐기(benzofuranyl), 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 이소벤조티아졸일기(isobenzothiazolyl), 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 이소벤조옥사졸일기(isobenzooxazolyl), 트리아졸일기(triazolyl), 테트라졸일기(tetrazolyl), 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 트리아지닐기(triazinyl), 디벤조퓨라닐기(dibenzofuranyl), 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl), 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 비페닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐; 또는

-N(Q₁)(Q₂) 또는 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅); 이고;

상기 Q₁ 내지 Q₅는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이

레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 퀴녹살리닐기이고;

Z₃ 및 Z₁₃은 서로 독립적으로, -F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및 -F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되고;

a₁, a₂, a₃, a₁₁, a₁₂ 및 a₂₁은 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고;

a₁₃은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고;

n₁은 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

L₁은 할로젠 리간드, 디케톤 리간드, 카르복실산 리간드, 카본 모노옥사이드 리간드, 이소니트릴 리간드, 시아노 리간드 및 포스포러스 리간드 중 선택되고;

n₂는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

상기 화학식 1 중 CY₂는 트라이진, 피리다진 및 피리미딘이 아니고;

상기 화학식 1 및 2 중 서로 이웃한 2개의 리간드의 치환기는 서로 연결되지 않고;

상기 화학식 3 중 X₂₄가 N(R₂₆)일 경우, X₂₁ 내지 X₂₃ 중 적어도 하나는 N이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 CY₂가 고리 구성 원소로서 N을 1개 갖는 함질소 헤테로시클릭 그룹인, 유기금속 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

CY₂₁은 서로 독립적으로, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 트리아진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 퀴녹살린, 퀴나졸린, 트리아졸, 옥사졸, 벤조옥사졸 및 벤조이소퀴놀린 중에서 선택되고,

CY₂는 피리딘, 퀴놀린 및 이소퀴놀린 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

CY₁₂는 벤젠, 나프탈렌, 플루오렌, 페난트렌, 안트라센, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌 및 크라이센 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 5

삭제

청구항 6

제1항에 있어서,

Z₁, Z₂, Z₁₁, Z₁₂, Z₂₁, R₂₁ 내지 R₂₆은 서로 독립적으로,

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, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;

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 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 또는 C₁-C₂₀알콕시기;

페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 카바졸일기; 또는

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 카바졸일기; 인, 유기금속 화합물.

청구항 7

삭제

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 a₃가 1 내지 5의 정수 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 a₁개의 Z₁ 중 적어도 하나가 F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

-F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되고, 상기 a₁₁개의 Z₁₁ 중 적어도 하나가 -F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

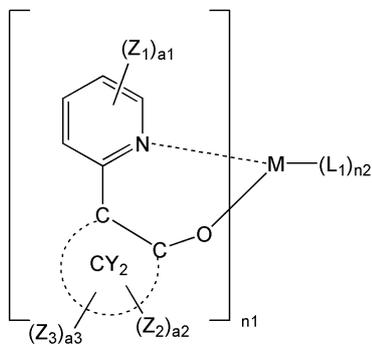
-F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되는, 유기금속 화합물.

청구항 10

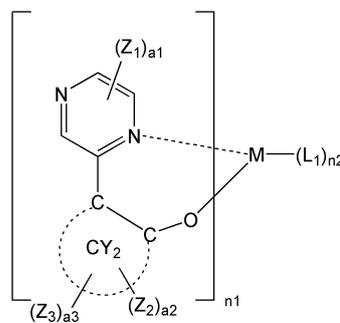
제1항에 있어서,

하기 화학식 1A 내지 1H 및 1K 하나로 표시되는, 유기금속 화합물:

<화학식 1A>

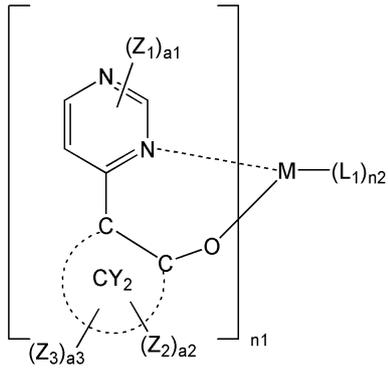


<화학식 1B>

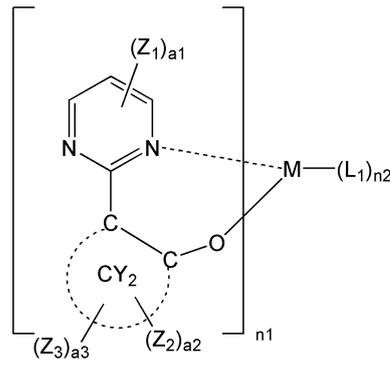


<화학식 1C>

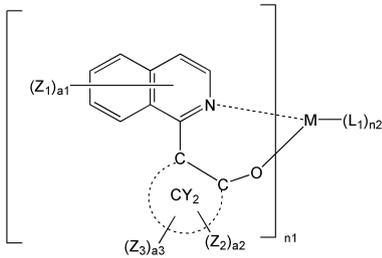
<화학식 1D>



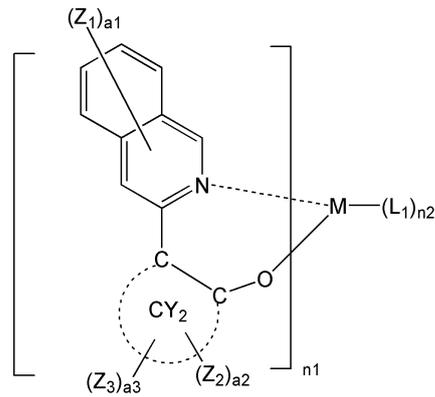
<화학식 1E>



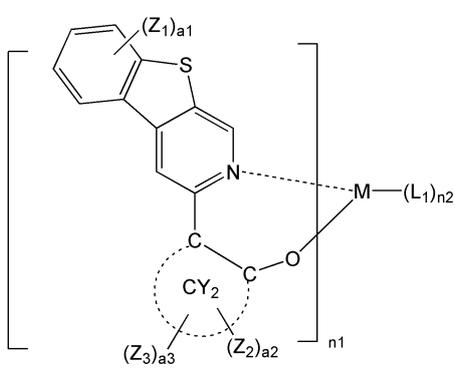
<화학식 1F>



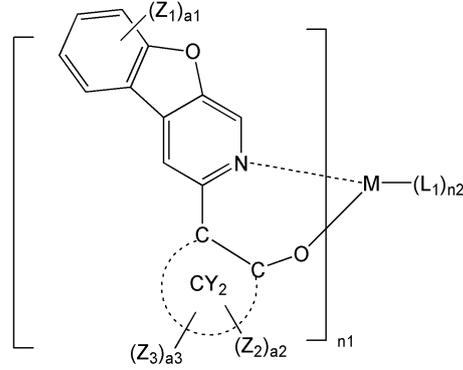
<화학식 1G>



<화학식 1H>



<화학식 1I>



상기 화학식 1A 내지 1H 및 1K 중

M, Z₁ 내지 Z₃, a₁ 내지 a₃, n₁, L₁ 및 n₂에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하고, CY₂는 피리딘, 퀴놀린 또는 이소퀴놀린이다.

청구항 11

제10항에 있어서,

Z₁ 및 Z₂은 서로 독립적으로,

수소, -F, 시아노기, 니트로기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

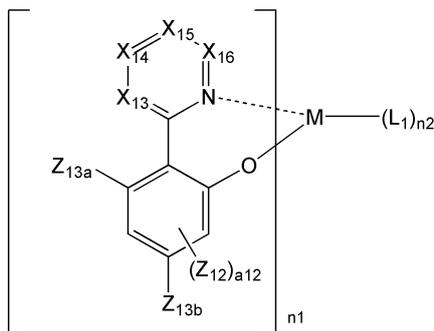
-F, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알콕시기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 12

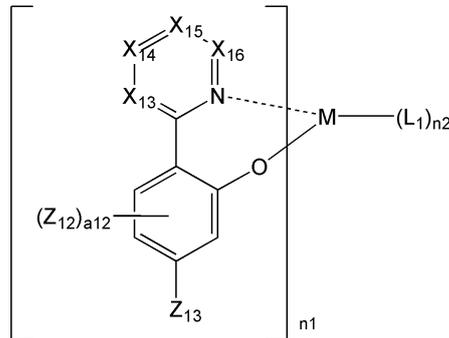
제1항에 있어서,

하기 화학식 2A, 2B 또는 2C로 표시되는, 유기금속 화합물:

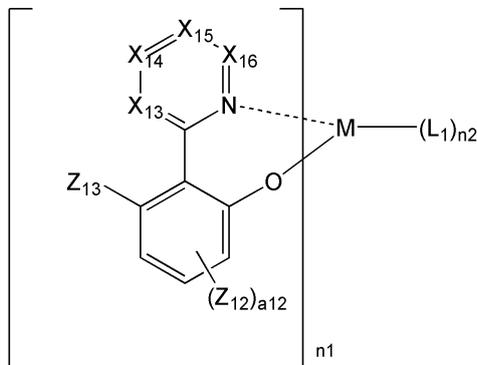
<화학식 2A>



<화학식 2B>



<화학식 2C>



상기 화학식 2A 내지 2C 중

M, Z₁₂, Z₁₃, a₁₂, n₁, L₁ 및 n₂에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하고;

Z_{13a} 및 Z_{13b}에 대한 설명은 Z₁₃에 대한 설명과 동일하고;

X_{13} 은 N 또는 CR_{13} 이고, X_{14} 는 N 또는 CR_{14} 이고, X_{15} 는 N 또는 CR_{15} 이고, X_{16} 은 N 또는 CR_{16} 이고;

R_{13} 내지 R_{16} 에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 Z_{11} 에 대한 설명과 동일하다.

청구항 13

제12항에 있어서,

Z_{12} 및 R_{13} 내지 R_{16} 은 서로 독립적으로,

수소, -F, 시아노기, 니트로기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

-F, 시아노기, 니트로기, C_1 - C_{20} 알콕시기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되고;

Z_{13} , Z_{13a} 및 Z_{13b} 는 서로 독립적으로,

-F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

-F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되는, 유기금속 화합물.

청구항 14

제12항에 있어서,

Z_{13} , Z_{13a} 및 Z_{13b} 는 서로 독립적으로, -F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기, 피리미디닐기, $-CF_3$ 및 $-CF_2CF_3$ 중에서 선택되는, 유기금속 화합물.

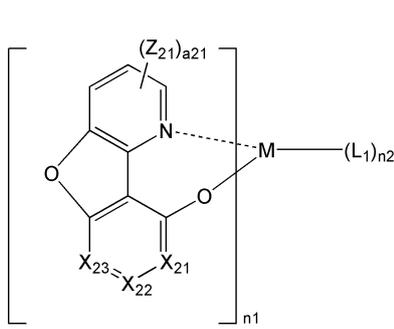
청구항 15

제1항에 있어서,

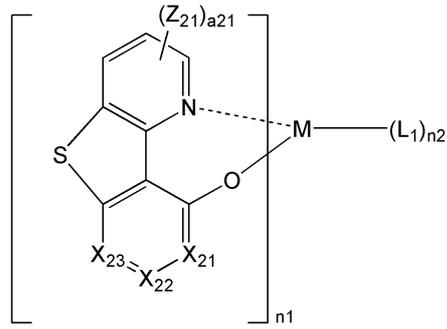
하기 화학식 3A 내지 3D 중 하나로 표시되는, 유기금속 화합물:

<화학식 3A>

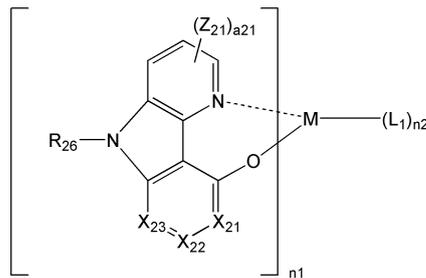
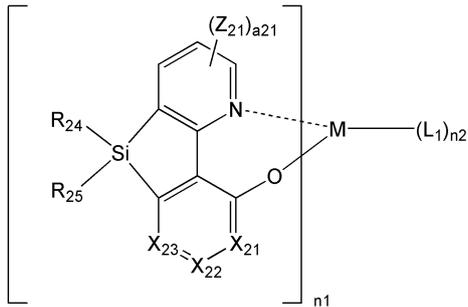
<화학식 3B>



<화학식 3C>



<화학식 3D>



상기 화학식 3A 내지 3D 중 M, Z₂₁, a₂₁, X₂₁ 내지 X₂₃, R₂₄ 내지 R₂₆, n₁, L₁ 및 n₂에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하고, 화학식 3D의 X₂₁ 내지 X₂₃ 중 적어도 하나는 N이다.

청구항 16

제15항에 있어서,

Z₂₁ 및 R₂₁ 내지 R₂₆은 서로 독립적으로,

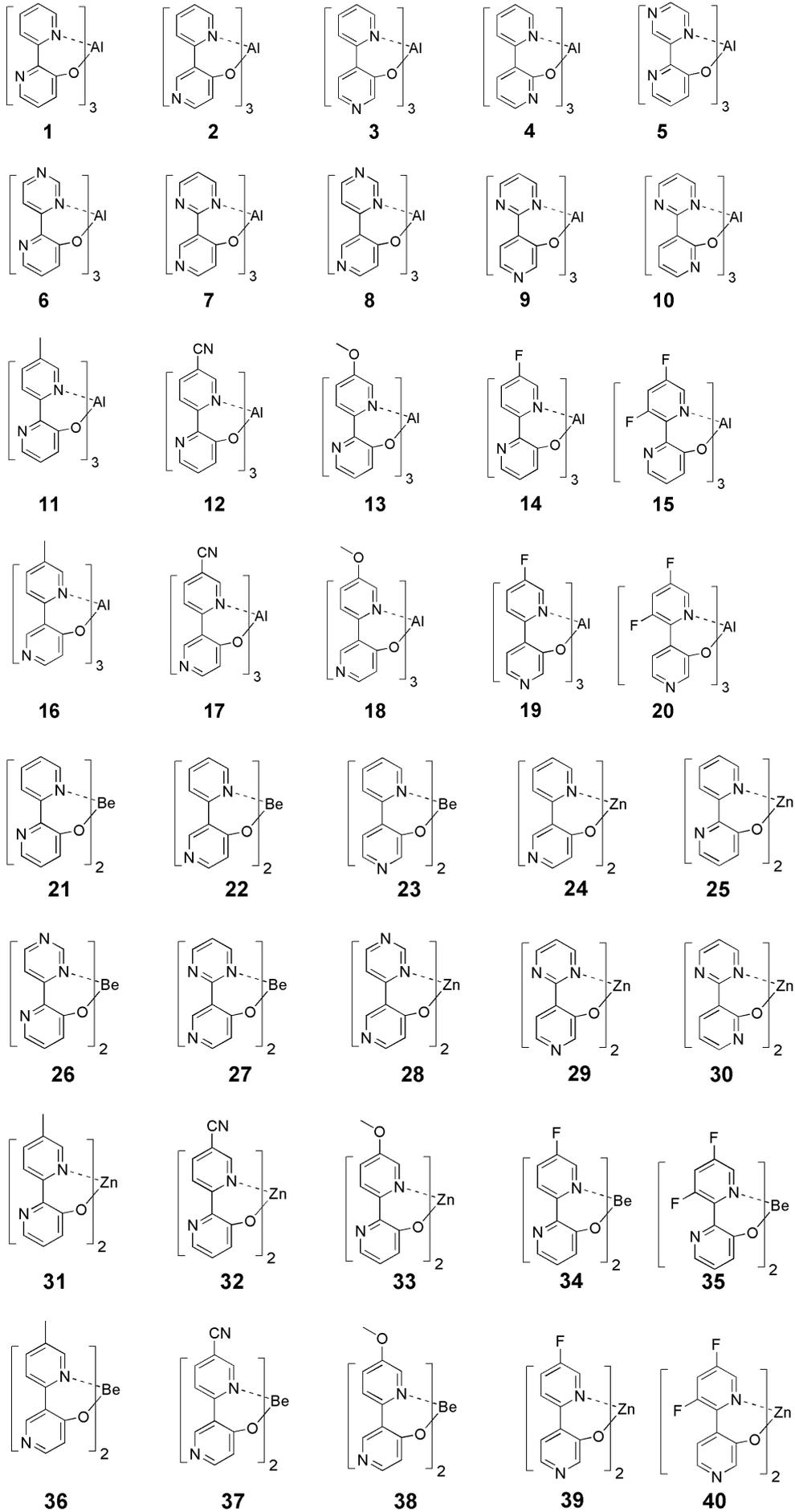
수소, -F, 시아노기, 니트로기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

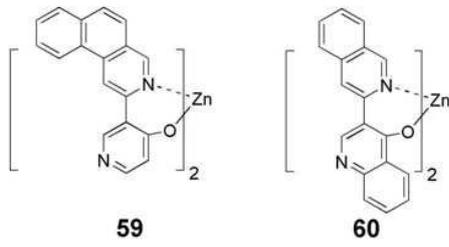
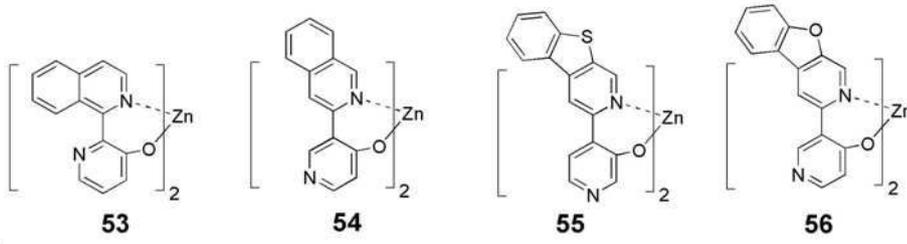
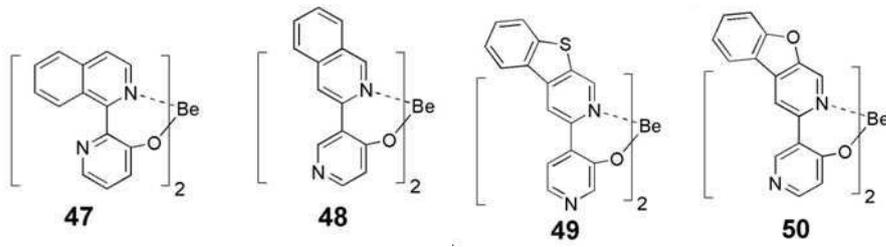
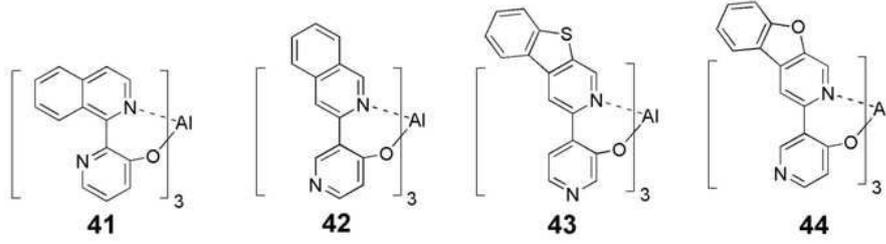
-F, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알콕시기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되는, 유기금속 화합물.

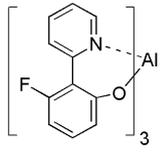
청구항 17

제1항에 있어서,

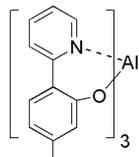
하기 화합물 1 내지 44, 47 내지 50, 53 내지 56 및 59 내지 168 중 하나인, 유기금속 화합물:



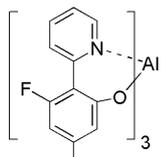




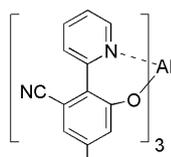
61



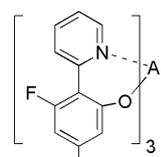
62



63



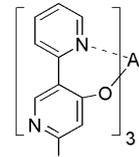
64



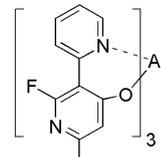
65



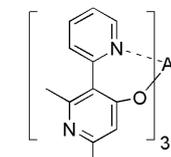
66



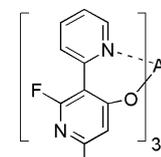
67



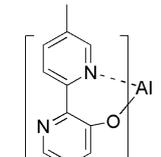
68



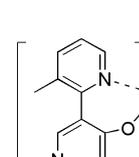
69



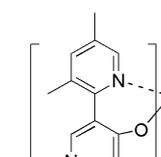
70



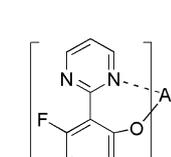
71



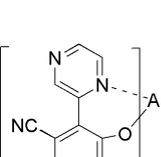
72



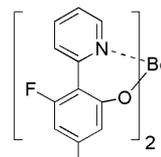
73



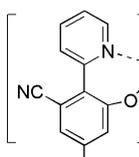
74



75



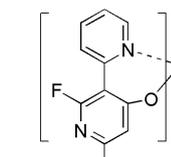
76



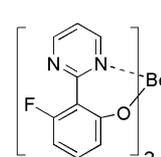
77



78



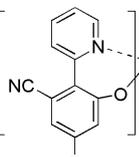
79



80



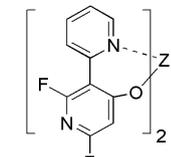
81



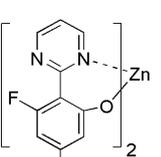
82



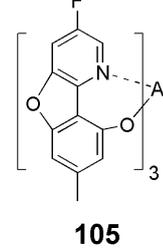
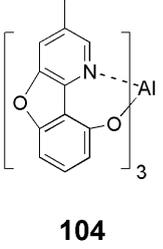
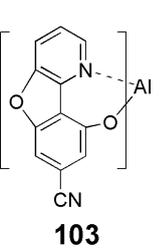
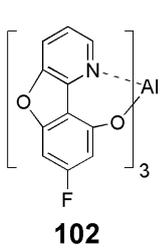
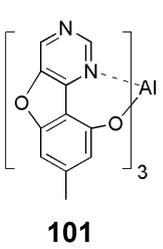
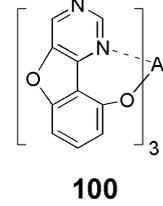
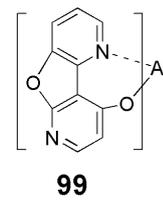
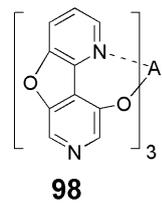
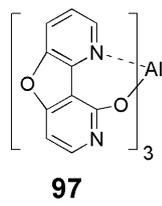
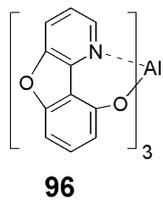
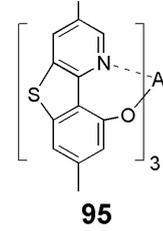
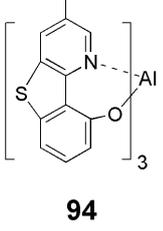
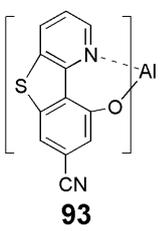
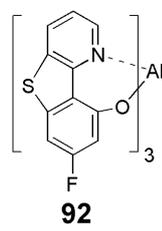
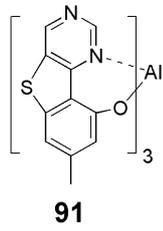
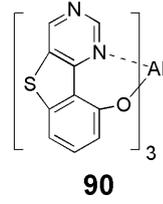
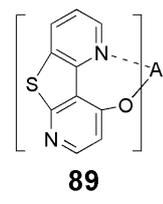
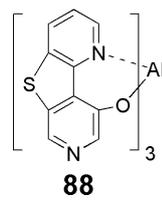
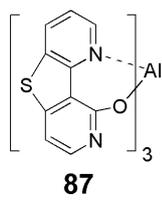
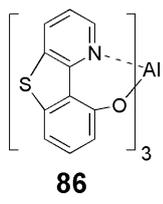
83

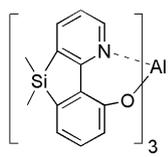


84

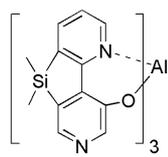


85

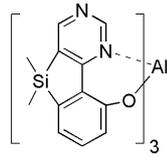




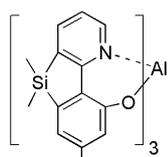
106



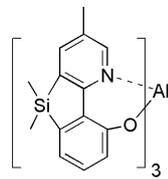
107



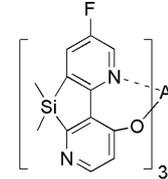
108



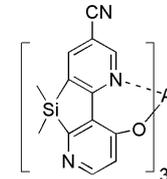
109



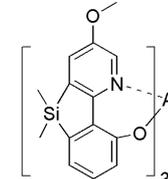
110



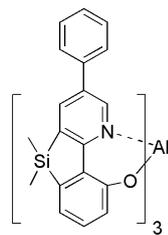
111



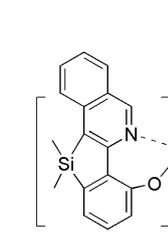
112



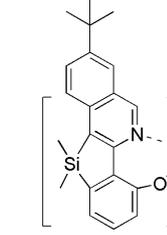
113



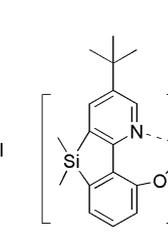
114



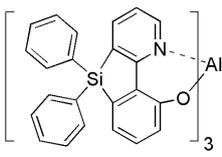
115



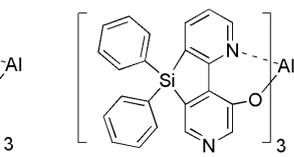
116



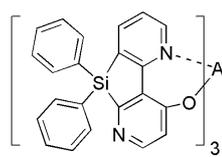
117



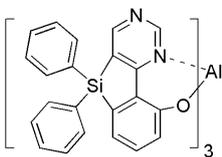
118



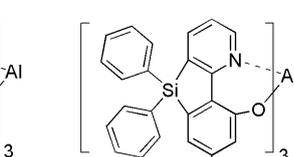
119



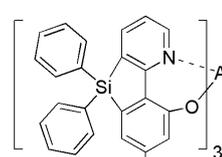
120



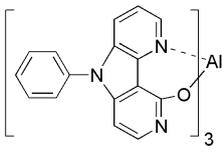
121



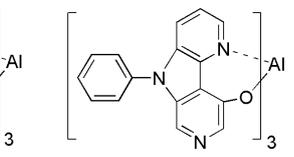
122



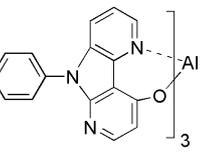
123



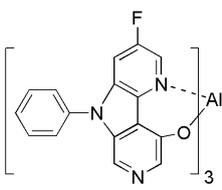
124



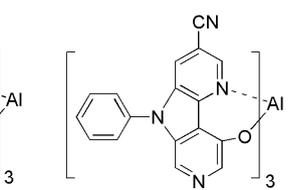
125



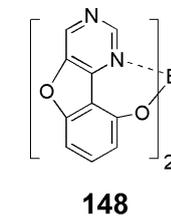
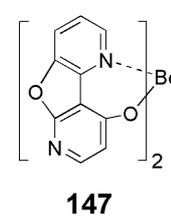
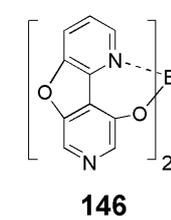
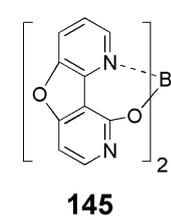
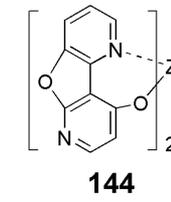
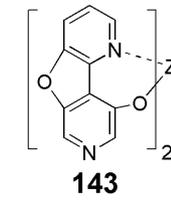
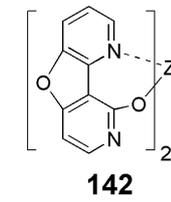
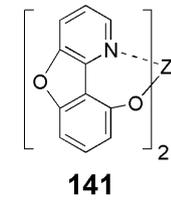
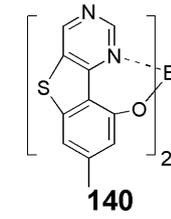
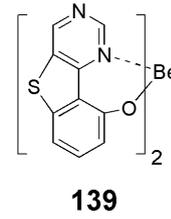
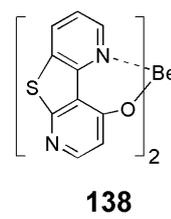
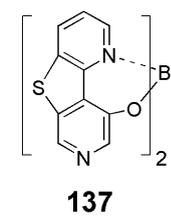
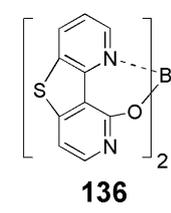
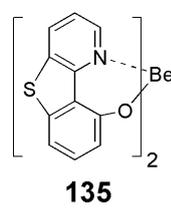
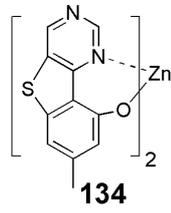
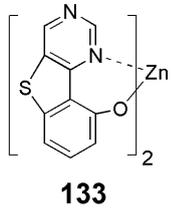
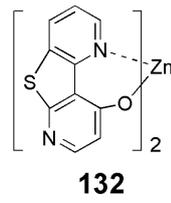
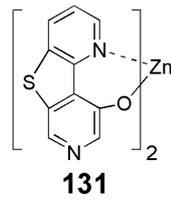
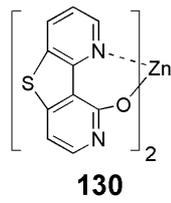
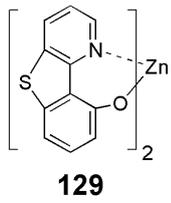
126

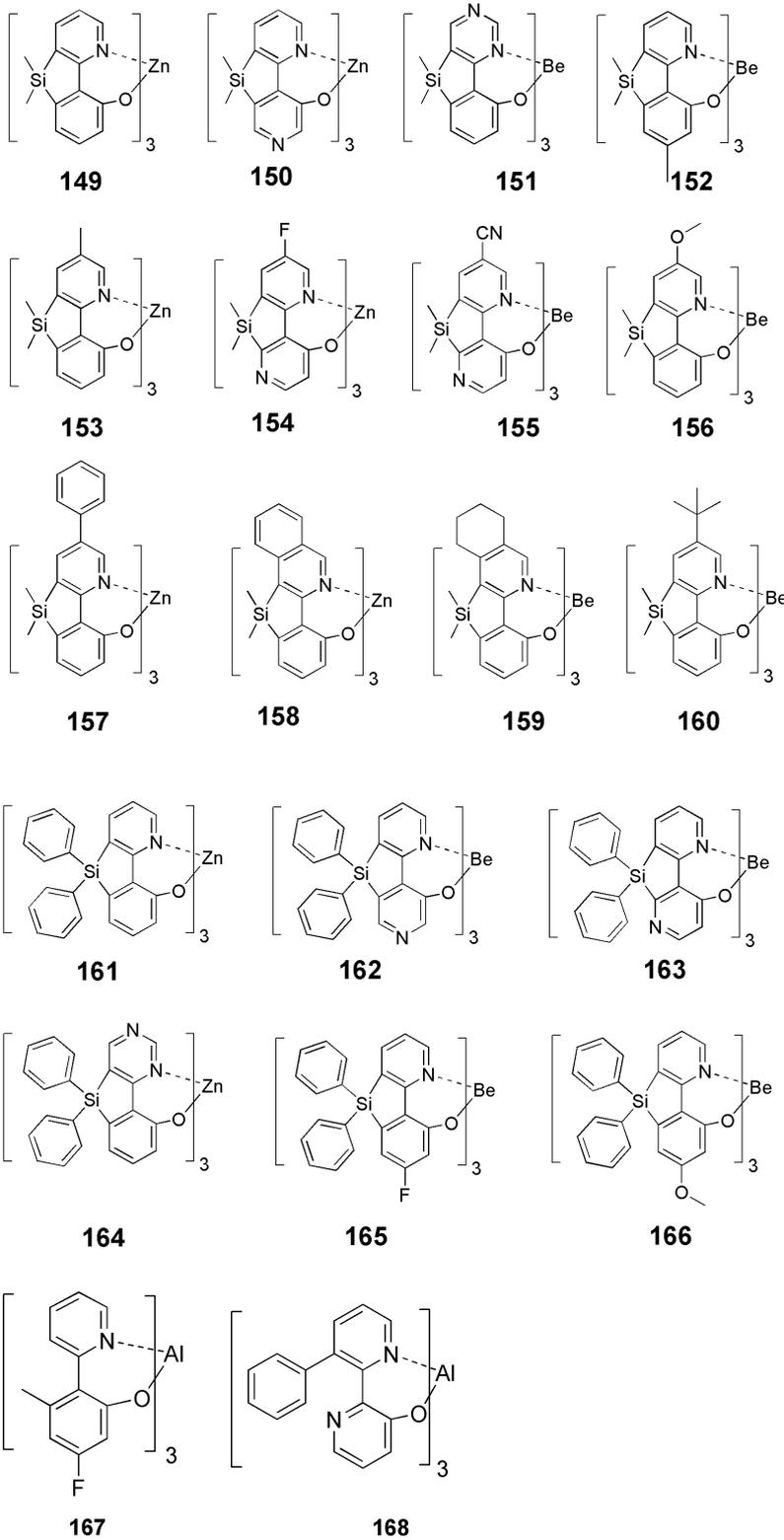


127



128





청구항 18

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 제1항 내지 제4항, 제6항, 및 제8항 내지 제17항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 19

제18항에 있어서,

상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은, i) 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되고, 정공 주입층, 정공 수송층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함한 정공 수송 영역; 및 ii) 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한 전자 수송 영역;을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 20

제18항에 있어서,

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

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기금속 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 제시된다.

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[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 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

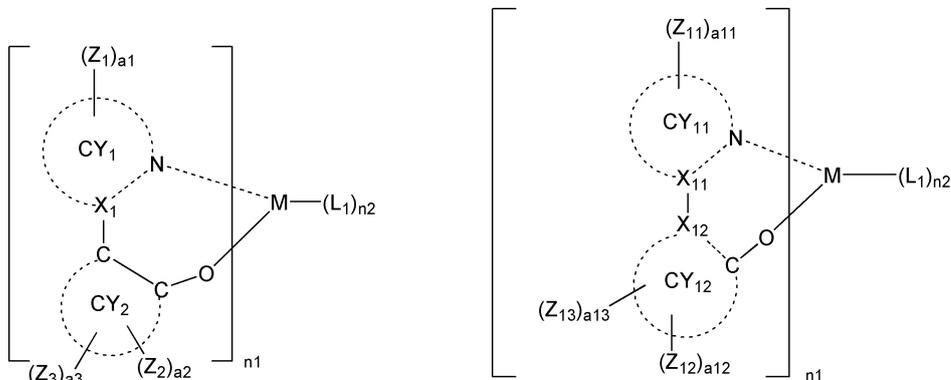
[0004] 신규 유기금속 화합물 및 이를 채용한 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0005] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1, 2 또는 3으로 표시되는 유기금속(organometallic) 화합물이 제공된다:

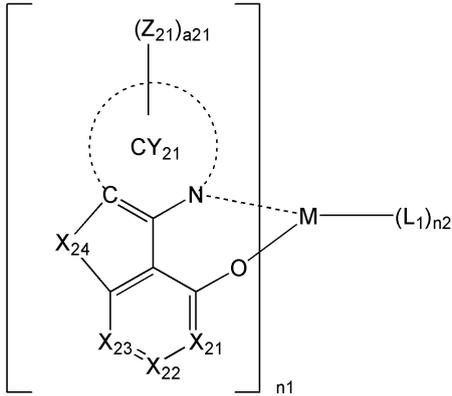
[0006] <화학식 1>

<화학식 2>



[0007]

[0008] <화학식 3>



- [0009]
- [0010] 상기 화학식 1, 2 및 3 중,
- [0011] M은 서로 독립적으로, 알루미늄(Al), 갈륨(Ga), 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg) 또는 아연(Zn)이고;
- [0012] CY₁, CY₂, CY₁₁ 및 CY₂₁은 서로 독립적으로, 함질소 헤테로 시클릭 그룹(nitrogen-containing hetero cyclic group)이고;
- [0013] CY₁₂는 방향족 시클릭 그룹(aromatic cyclic group) 또는 비-방향족 시클릭 그룹(non-aromatic cyclic group) 중에서 선택되고;
- [0014] X₁은 N 또는 C이고, X₁₁은 N 또는 C이고, X₁₂는 N 또는 C이고, X₂₁은 N 또는 CR₂₁이고, X₂₂는 N 또는 CR₂₂이고, X₂₃은 N 또는 CR₂₃이고, X₂₄는 S, O, Si(R₂₄)(R₂₅) 또는 N(R₂₆)이고;
- [0015] Z₁, Z₂, Z₁₁, Z₁₂, Z₂₁, R₂₁ 내지 R₂₆은 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, 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 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) 또는 -B(Q₆)(Q₇)이고;
- [0016] Z₃ 및 Z₁₃은 전자 당김기(electron withdrawing group)이고;
- [0017] a₁, a₂, a₃, a₁₁, a₁₂ 및 a₂₁은 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고;
- [0018] a₁₃은 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고;
- [0019] n₁은 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고;
- [0020] L₁은 1가 유기 리간드, 2가 유기 리간드 및 3가 유기 리간드 중에서 선택되고;
- [0021] n₂는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;
- [0022] 상기 화학식 1 중 CY₂는 트라이진, 피리다진 및 피리미딘이 아니고;
- [0023] 상기 화학식 1 및 2 중 서로 이웃한 2개의 리간드의 치환기는 서로 연결되지 않고;
- [0024] 상기 화학식 3 중 X₂₄가 N(R₂₆)일 경우, X₂₁ 내지 X₂₃ 중 적어도 하나는 N이고;
- [0025] 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케

닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 적어도 하나의 치환기는,

[0026] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;

[0027] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기;

[0028] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0029] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅) 및 -B(Q₂₆)(Q₂₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

[0030] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅) 또는 -B(Q₃₆)(Q₃₇); 이고;

[0031] 상기 Q₁ 내지 Q₇, Q₁₁ 내지 Q₁₇, Q₂₁ 내지 Q₂₇ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₇은 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

[0032] 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.

[0033] 상기 유기금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있고, 상기 발광층에 포함된 상기 유기금속 화합물은 호스트의 역할을 하고, 상기 발광층은 인광 도펀트를 더 포함할 수 있다.

발명의 효과

[0034] 상기 유기금속 화합물은 우수한 전기적 특성 및 열적 안정성을 갖는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명 특성을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

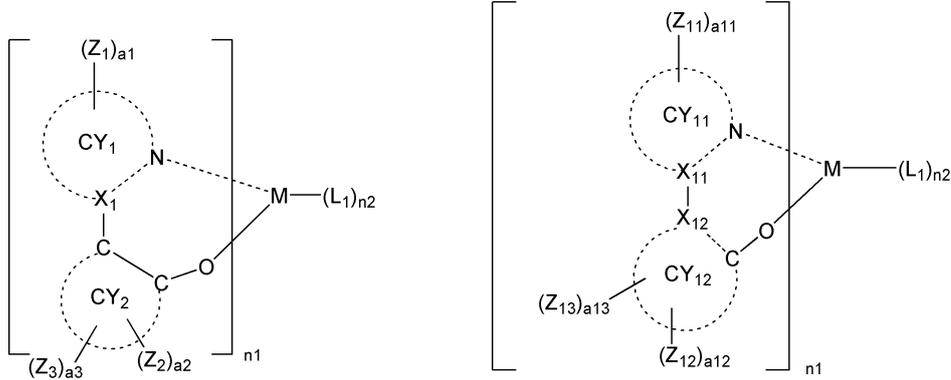
[0035] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0036] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1, 2 또는 3으로 표시된다:

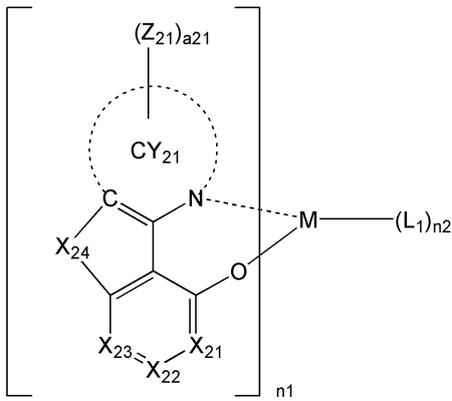
[0037] <화학식 1>

<화학식 2>



[0038]

[0039] <화학식 3>



[0040]

[0041] 상기 화학식 1 내지 3 중, M은 서로 독립적으로, 알루미늄(Al), 갈륨(Ga), 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg) 또는 아연(Zn)이다.

[0042] 예를 들어, 상기 화학식 1 내지 3 중 M은 알루미늄 또는 아연일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0043] 상기 화학식 1 내지 3 중 CY₁, CY₂, CY₁₁ 및 CY₂₁은 서로 독립적으로, 함질소 헤테로 시클릭 그룹(nitrogen-containing hetero cyclic group)이고, CY₁₂는 방향족 시클릭 그룹(aromatic cyclic group) 또는 비-방향족 시클릭 그룹(non-aromatic cyclic group) 중에서 선택된다.

[0044] 상기 CY₂는 고리 구성 원소로서 N을 1개 갖는 함질소 헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

[0045] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 내지 3 중 CY₁, CY₁₁ 및 CY₂₁은 서로 독립적으로, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 트리아진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 퀴녹살린, 퀴나졸린, 트리아졸, 옥사졸, 벤조옥사졸 및 벤조이소퀴놀린 중에서 선택되고, CY₂는 피리딘, 퀴놀린 및 이소퀴놀린 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0046] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2 중 CY₁₂는 벤젠, 나프탈렌, 플루오렌, 페난트렌, 안트라센, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌 및 크라이센 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0047] 상기 화학식 1 내지 3 중 X₁은 N 또는 C이고, X₁₁은 N 또는 C이고, X₁₂은 N 또는 C이고, X₂₁은 N 또는 CR₂₁이고, X₂₂은 N 또는 CR₂₂이고, X₂₃은 N 또는 CR₂₃이고, X₂₄는 S, O, Si(R₂₄)(R₂₅) 또는 N(R₂₆)이다.

[0048] 상기 Z₁, Z₂, Z₁₁, Z₁₂, Z₂₁, R₂₁ 내지 R₂₆은 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, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는

레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐; 또는

- [0054] $-N(Q_1)(Q_2)$ 또는 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$; 이고;
- [0055] 상기 Q_1 내지 Q_5 는 서로 독립적으로, 수소, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 크라이세닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 퀴녹살리닐기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0056] 다른 구현예에 따르면, 상기 $Z_1, Z_2, Z_{11}, Z_{12}, Z_{21}, R_{21}$ 내지 R_{26} 은 서로 독립적으로,
- [0057] 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_1-C_{20} 알킬기 또는 C_1-C_{20} 알콕시기;
- [0058] 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 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기 또는 C_1-C_{20} 알콕시기;
- [0059] 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 카바졸일기; 또는
- [0060] 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_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기 또는 카바졸일기;일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0061] 상기 화학식 1 및 2 중 Z_3 및 Z_{13} 은 전자 당김기(electron withdrawing group)이다.
- [0062] 일 구현예에 따르면, 상기 Z_3 및 Z_{13} 은, 서로 독립적으로,
- [0063] -F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및
- [0064] -F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택된 전자 당김기일 수 있다.
- [0065] 다른 구현예에 따르면, 상기 Z_3 및 Z_{13} 은, 서로 독립적으로, -F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기, 피리미디닐기, $-CF_3$ 및 $-CF_2CF_3$ 중에서 선택된 전자 당김기일 수 있다.
- [0066] 상기 화학식 1 내지 3 중 $a_1, a_2, a_3, a_{11}, a_{12}$ 및 a_{21} 은 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택될 수 있다. 예를 들어, 상기 $a_1, a_2, a_3, a_{11}, a_{12}$ 및 a_{21} 은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0067] 상기 a_1 은 Z_1 의 개수를 나타낸 것으로서, a_1 이 2 이상일 경우, 2 이상의 Z_1 은 서로 동일하거나 상이하다. a_2, a_3, a_{11}, a_{12} 및 a_{21} 에 대한 해석은 상술한 바와 같은 a_1 에 대한 해석과 화학식 1 내지 3을 참조하여 이해될 수 있다.
- [0068] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 a_3 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식

1 중 a_3 는 1 또는 2일 수 있다. a_3 가 0이 아닐 경우, 화학식 1의 CY_2 는 치환기로서 전자 당김기를 반드시 갖는다.

[0069] 상기 화학식 2 중 a_{13} 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다. 예를 들어, a_{13} 은 1 또는 2일 수 있다. a_{13} 은 0이 아니므로, 화학식 2의 CY_{12} 는 적어도 하나의 전자 당김기를 치환기로서 반드시 갖는다.

[0070] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 a_1 개의 Z_1 중 적어도 하나가 전자 당김기이고, 상기 화학식 2의 a_{11} 개의 Z_{11} 중 적어도 하나가 전자 당김기일 수 있다. 상기 전자 당김기의 구체예는 상기 Z_3 에 대한 설명을 참조한다.

[0071] 상기 화학식 1 내지 3 중 n_1 은 1 내지 3의 정수 중에서 선택된다. 예를 들어, 상기 화학식 1 내지 3 중 n_1 은 2 또는 3일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0072] 상기 화학식 1 내지 3 중 L_1 은 1가 유기 리간드, 2가 유기 리간드 및 3가 유기 리간드 중에서 선택된다. 상기 1가 유기 리간드, 2가 유기 리간드 및 3가 유기 리간드는 공지의 유기 리간드 중에서 선택된다.

[0073] 예를 들어, 상기 L_1 은 할로젠 리간드(예를 들면, Cl, F), 디케톤 리간드(예를 들면, 아세틸아세토네이트, 1,3-디페닐-1,3-프로판디오네이트, 2,2,6,6-테트라메틸-3,5-헵탄디오네이트, 헥사플루오로아세토네이트), 카르복실산 리간드(예를 들면, 피콜리네이트, 디메틸-3-피라졸카르복실레이트, 벤조에이트), 카본 모노옥사이드 리간드, 이소니트릴 리간드, 시아노 리간드 및 포스포러스 리간드(예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphaite)) 중 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0074] 상기 화학식 1 내지 3 중 n_2 는 0 내지 3의 정수 중에서 선택된다. 예를 들어, 상기 화학식 1 내지 3 중 n_2 는 0 또는 1이거나, 0일 수 있다.

[0075] 상기 화학식 1 중 CY_2 는 트라이진, 피리다진 및 피리미딘이 아니다.

[0076] 상기 화학식 1 및 2 중 서로 이웃한 2개의 리간드의 치환기는 서로 연결되지 않는다.

[0077] 상기 화학식 3 중 X_{24} 가 $N(R_{26})$ 일 경우, X_{21} 내지 X_{23} 중 적어도 하나는 N이다.

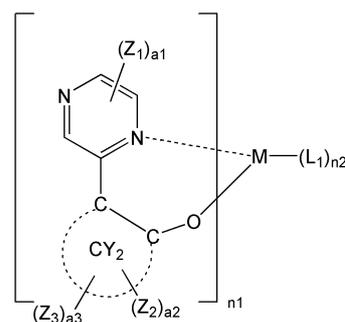
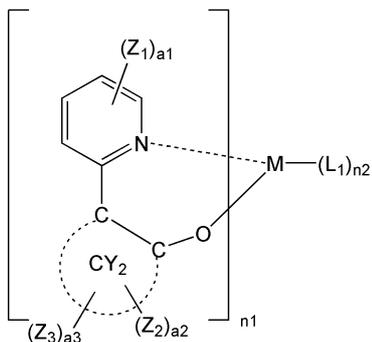
[0078] 일 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 1A 내지 1K 중 하나로 표시될 수 있다.

[0079] <화학식 1A>

<화학식 1B>

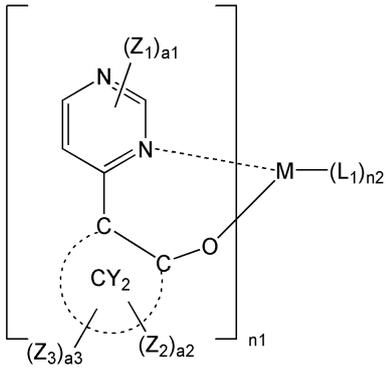
[0080]

[0081]



<화학식 1C>

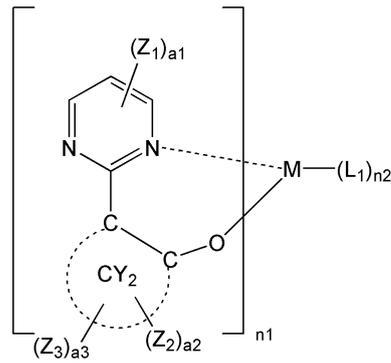
<화학식 1D>



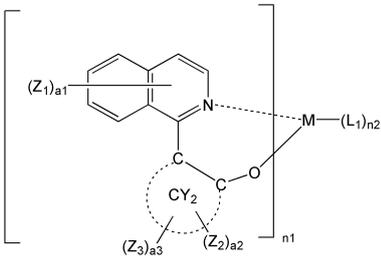
[0082]

[0083]

<화학식 1E>



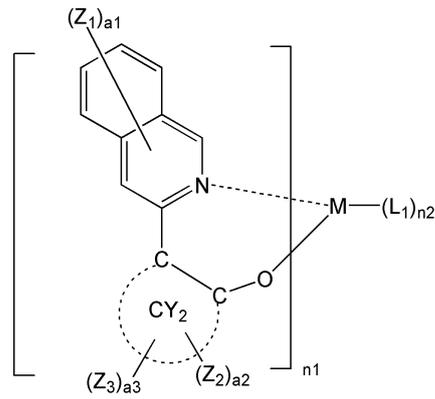
<화학식 1F>



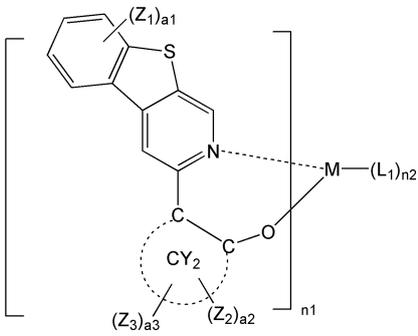
[0084]

[0085]

<화학식 1G>



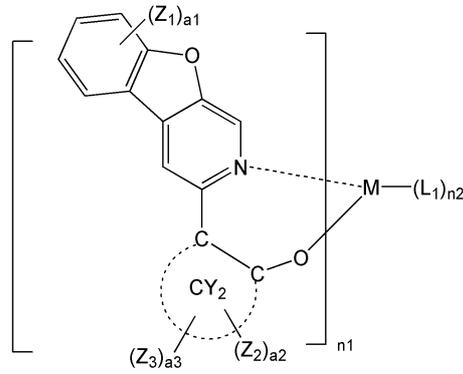
<화학식 1H>



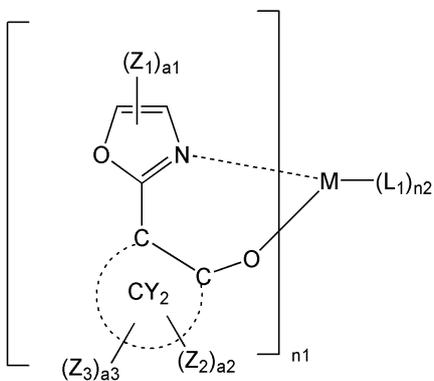
[0086]

[0087]

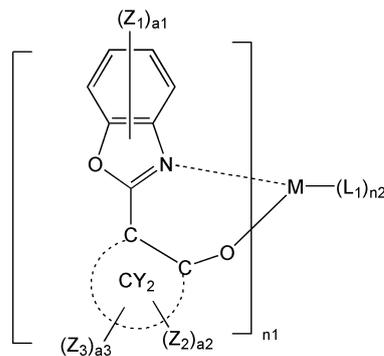
<화학식 1I>



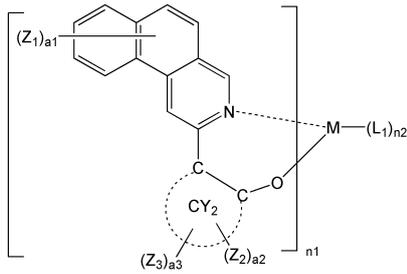
<화학식 1J>



[0088]



[0089] <화학식 1K>



[0090]

[0091] 상기 화학식 1A 내지 1K 중 M, Z₁ 내지 Z₃, a₁ 내지 a₃, n₁, L₁, n₂ 및 CY₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0092] 예를 들어, 상기 화학식 1A 내지 1K 중,

[0093] CY₂는 피리딘, 퀴놀린 또는 이소퀴놀린이고;

[0094] Z₁ 내지 Z₃은 서로 독립적으로,

[0095] 수소, -F, 시아노기, 니트로기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

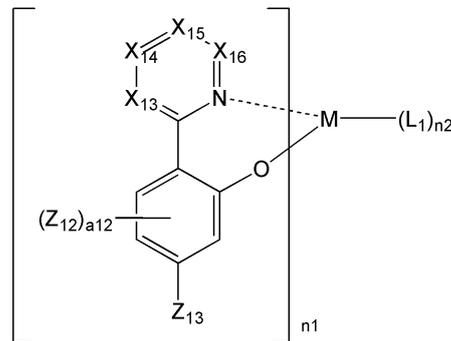
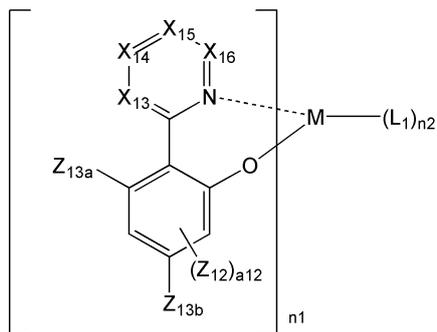
[0096] -F, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알콕시기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되고;

[0097] a₁ 내지 a₃는 서로 독립적으로 0, 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0098] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은, 하기 화학식 2A, 2B 또는 2C로 표시될 수 있다:

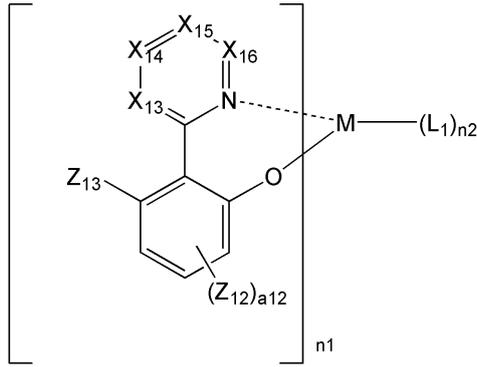
[0099] <화학식 2A>

<화학식 2B>



[0100]

[0101] <화학식 2C>



[0102]

[0103]

[0104]

[0105]

[0106]

[0107]

[0108]

[0109]

[0110]

[0111]

[0112]

[0113]

[0114]

[0115]

[0116]

[0117]

상기 화학식 2A 내지 2C 중

M, Z₁₂, Z₁₃, a₁₂, n₁, L₁ 및 n₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고;

Z_{13a} 및 Z_{13b}에 대한 설명은 Z₁₃에 대한 설명과 동일하고;

X₁₃은 N 또는 CR₁₃이고, X₁₄는 N 또는 CR₁₄이고, X₁₅는 N 또는 CR₁₅이고, X₁₆은 N 또는 CR₁₆이고;

R₁₃ 내지 R₁₆에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 Z₁₁에 대한 설명과 동일하다.

예를 들어, 상기 화학식 2A 내지 2C 중,

Z₁₂ 및 R₁₃ 내지 R₁₆은 서로 독립적으로,

수소, -F, 시아노기, 니트로기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

-F, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알콕시기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되고;

Z₁₃, Z_{13a} 및 Z_{13b}는 서로 독립적으로,

-F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

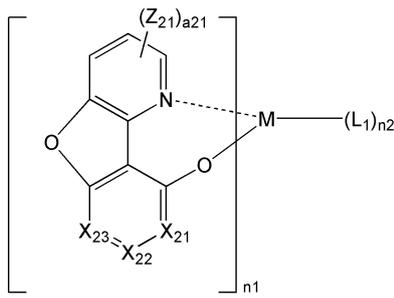
-F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

예를 들어, 상기 화학식 2A 내지 2C 중 Z₁₃, Z_{13a} 및 Z_{13b}는 서로 독립적으로, -F, 시아노기, 니트로기, 피리디닐기, 피리미디닐기, -CF₃ 및 -CF₂CF₃ 중에서 선택될 수 있다.

예를 들어, 상기 화학식 2A 내지 2C 중 n₂는 0일 수 있다.

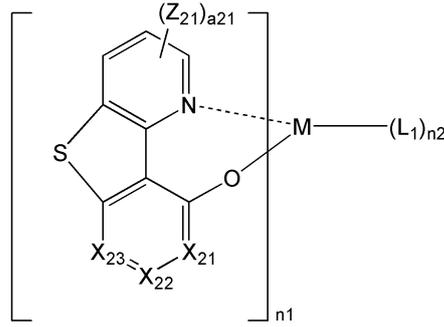
또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은, 하기 화학식 3A 내지 3D 중 하나로 표시될 수 있다:

[0118] <화학식 3A>

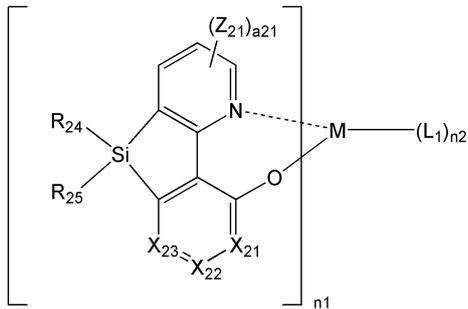


[0119]

<화학식 3B>

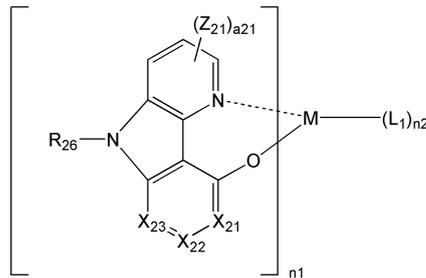


[0120] <화학식 3C>



[0121]

<화학식 3D>



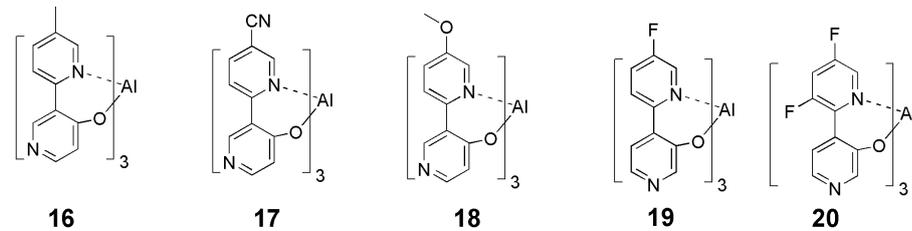
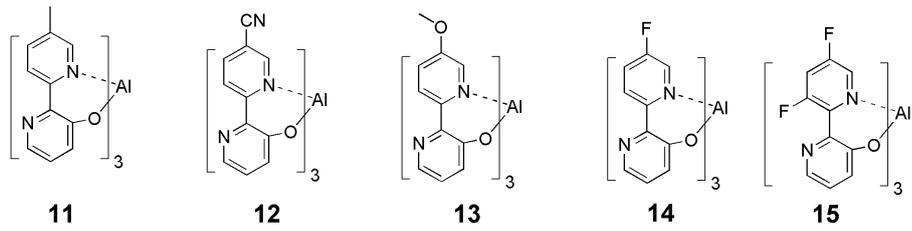
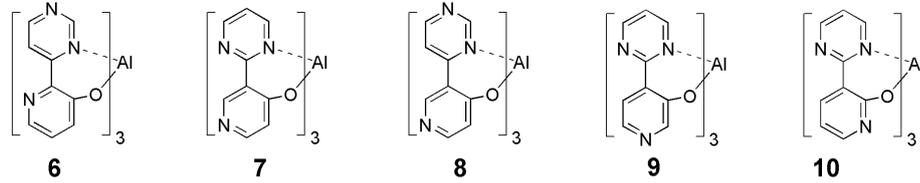
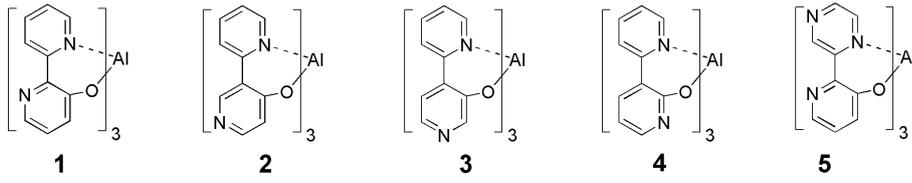
[0122] 상기 화학식 3A 내지 3D 중 M, Z₂₁, a₂₁, X₂₁ 내지 X₂₃, R₂₄ 내지 R₂₆, n₁, L₁ 및 n₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고, 화학식 3D의 X₂₁ 내지 X₂₃ 중 적어도 하나는 N이다.

[0123] 예를 들어, 상기 화학식 3A 내지 3D 중 Z₂₁ 및 R₂₁ 내지 R₂₆은 서로 독립적으로,

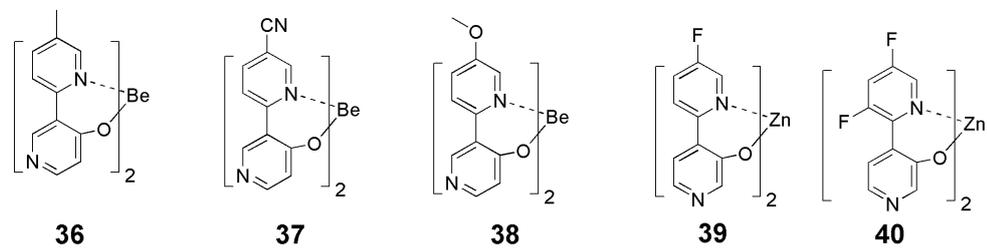
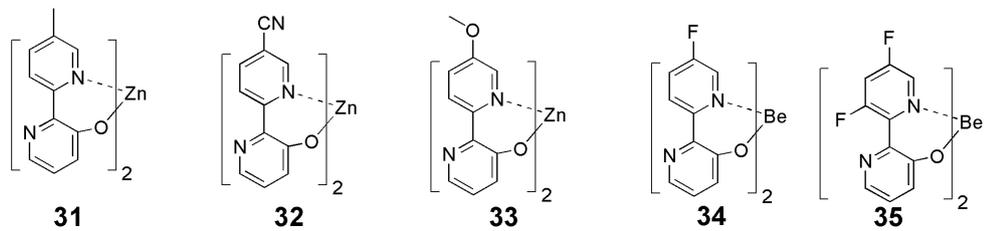
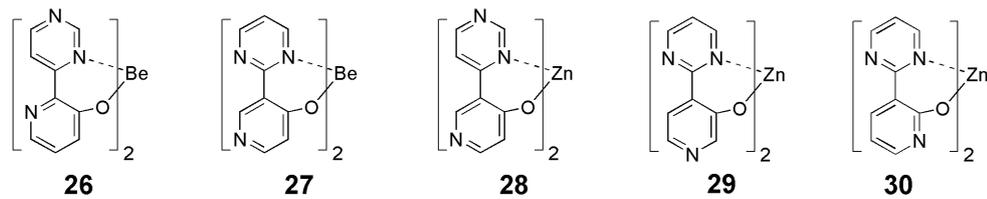
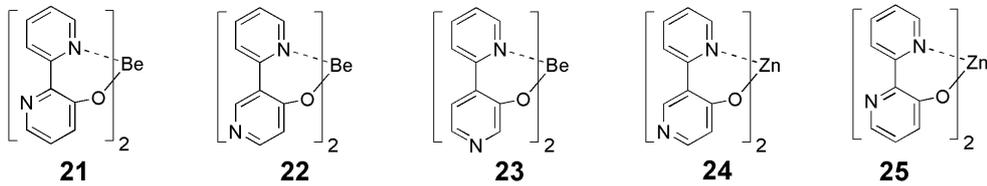
[0124] 수소, -F, 시아노기, 니트로기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

[0125] -F, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알콕시기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, 메톡시기, 에톡시기, 프로픽시, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

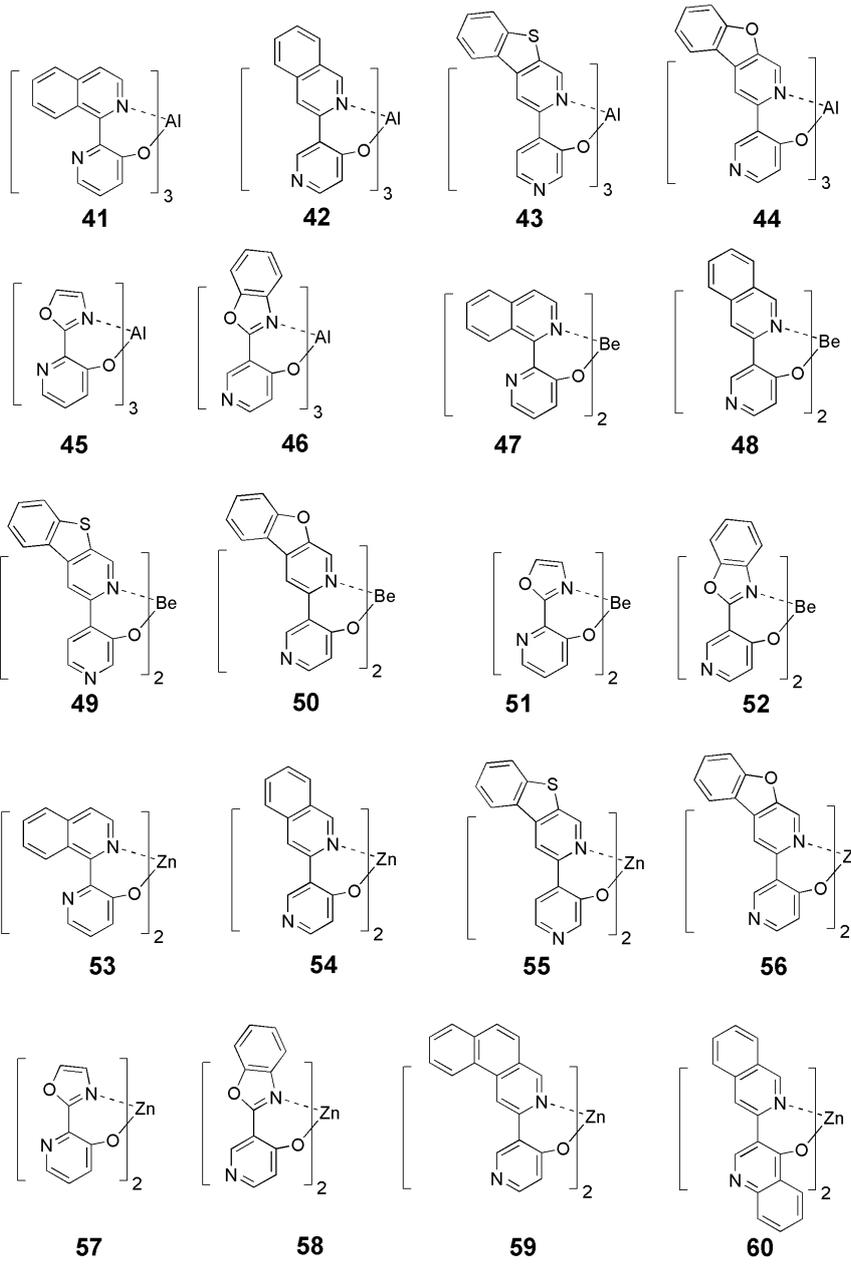
[0126] 상기 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 168 중 하나일 수 있다:



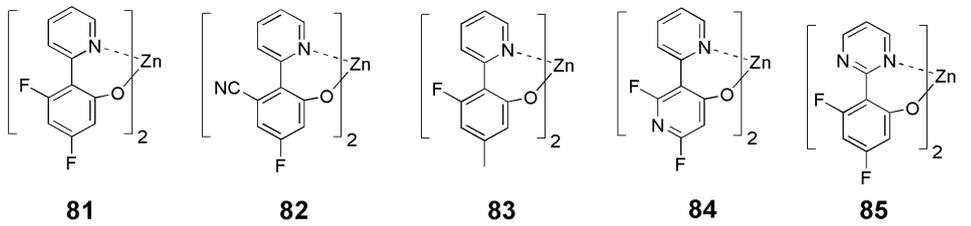
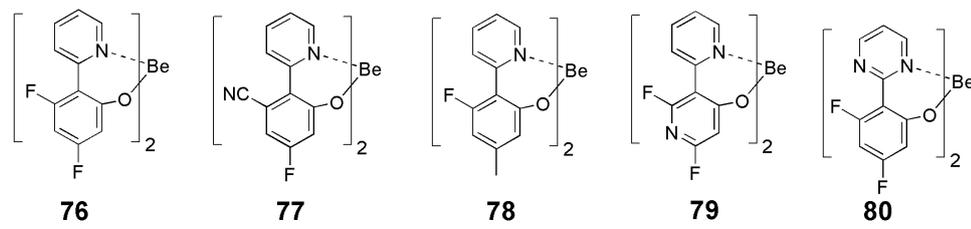
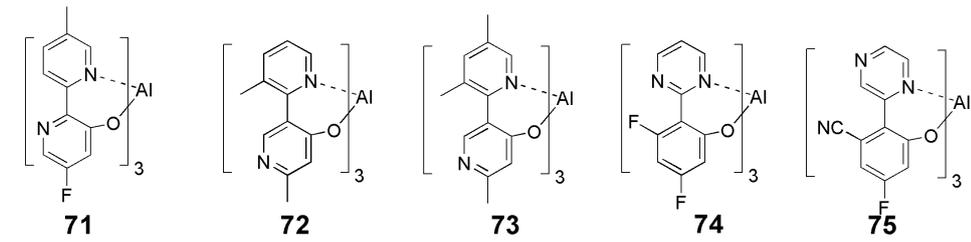
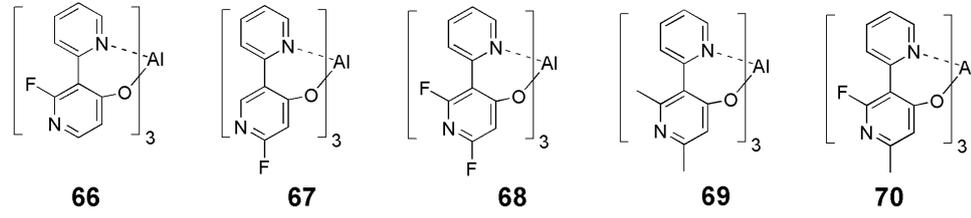
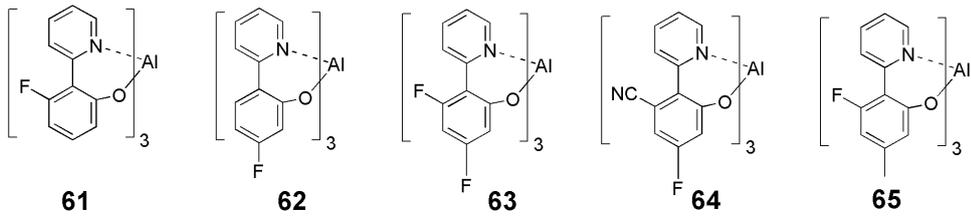
[0127]



[0128]

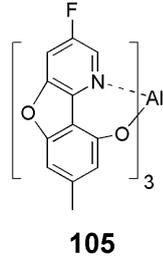
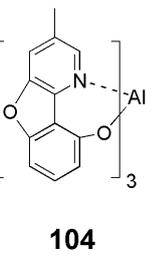
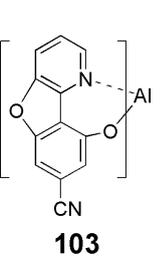
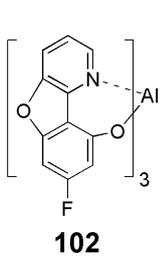
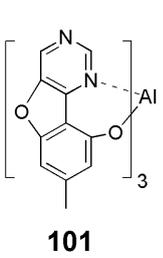
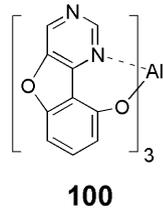
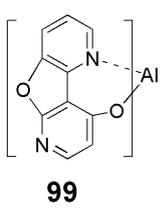
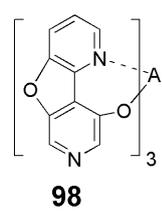
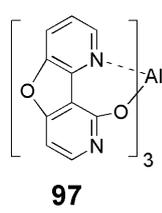
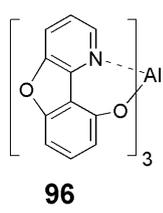
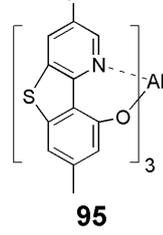
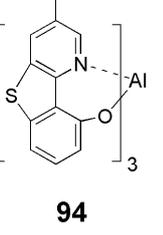
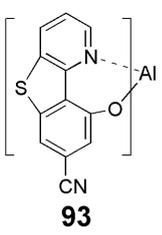
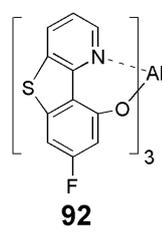
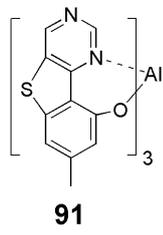
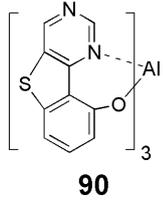
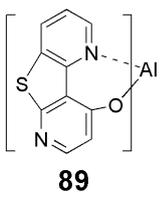
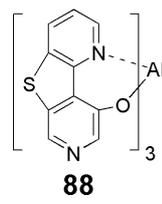
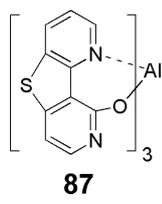
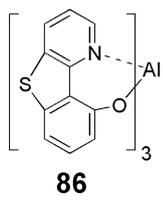


[0129]

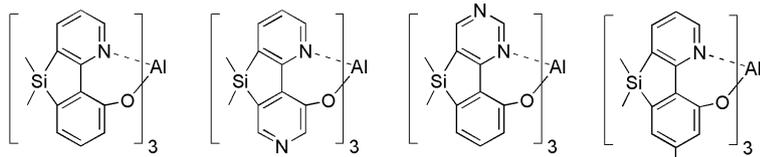


[0130]

[0131]



[0132]

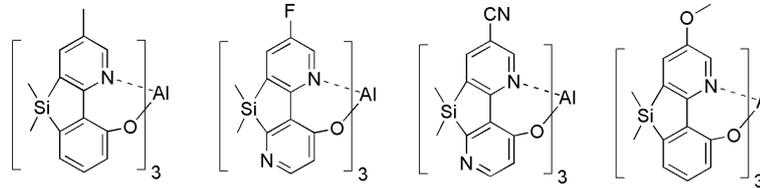


106

107

108

109

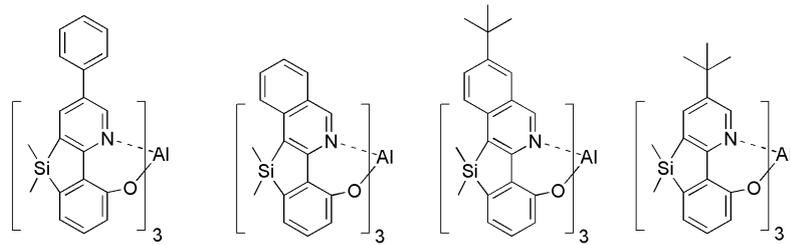


110

111

112

113

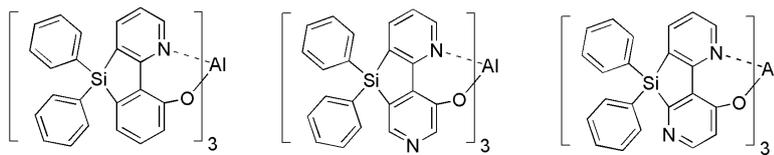


114

115

116

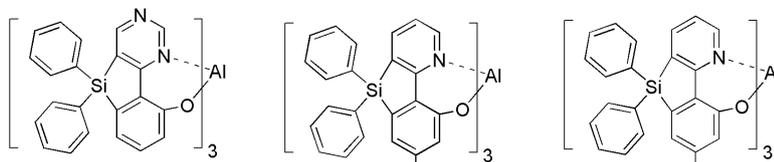
117



118

119

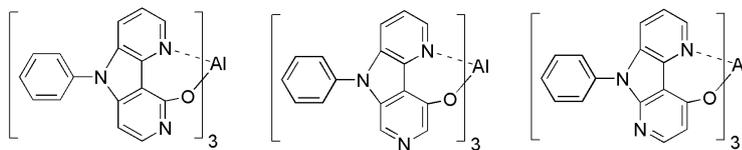
120



121

122

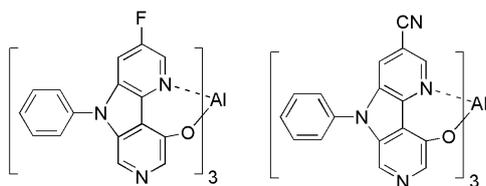
123



124

125

126

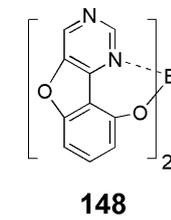
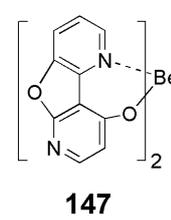
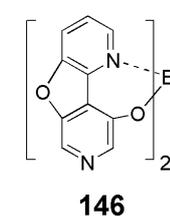
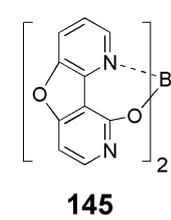
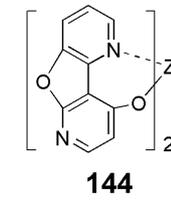
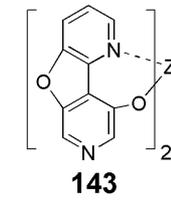
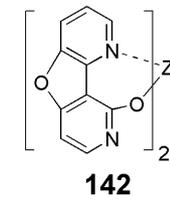
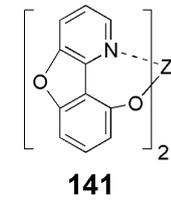
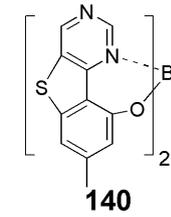
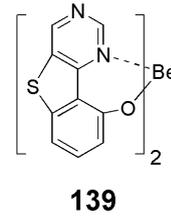
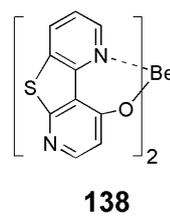
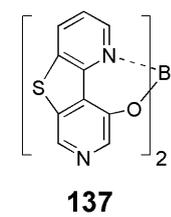
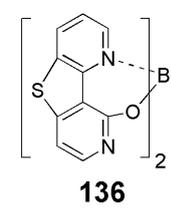
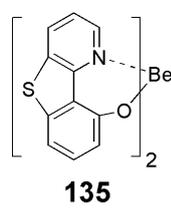
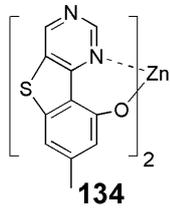
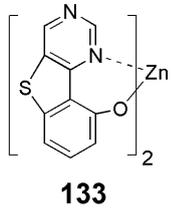
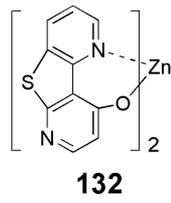
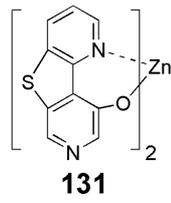
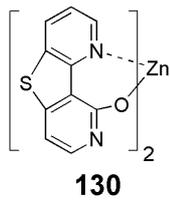
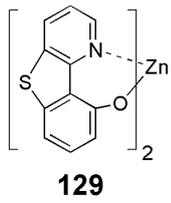


127

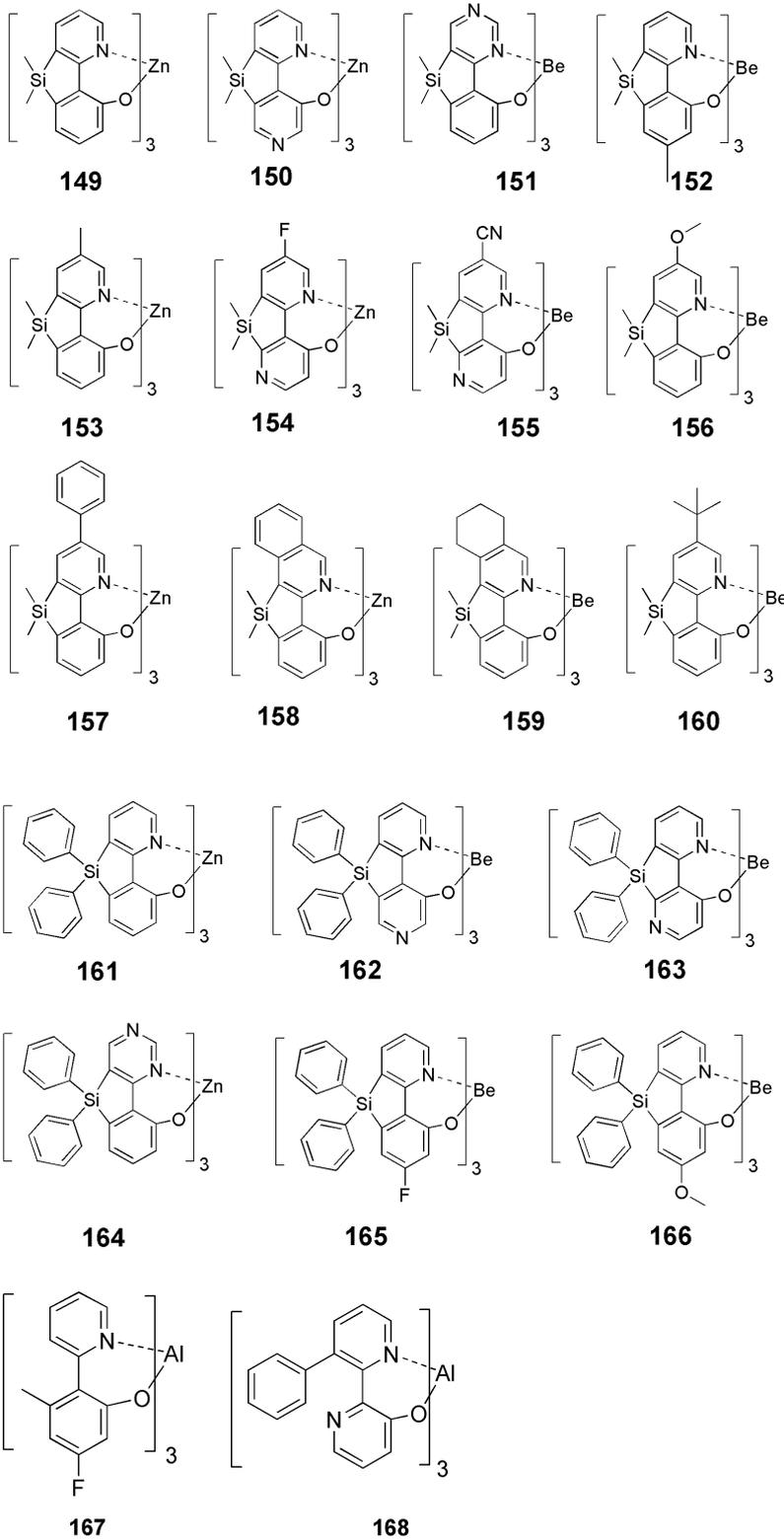
128

[0133]

[0134]



[0135]



[0136]

[0137]

[0138]

[0139]

[0140]

상기 화학식 1 중 CY_2 는 서로 독립적으로, 합질소 헤테로 시클릭 그룹(nitrogen-containing hetero cyclic group), 예를 들면, 고리 구성 원소로서 N을 1개 갖는 합질소 헤테로시클릭 그룹이므로, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 넓은 단일항 에너지 레벨과 삼중항 에너지 레벨 범위(예를 들면, 1.5 내지 3.5eV)를 가질 수 있다.

또한, 상기 화학식 1 및 2 중 서로 이웃한 2개의 리간드의 치환기는 서로 연결되어 있지 않으므로, 상기 화학식 1 또는 2로 표시된 유기금속 화합물은 우수한 화학적 및 열적 안정성을 가질 수 있다.

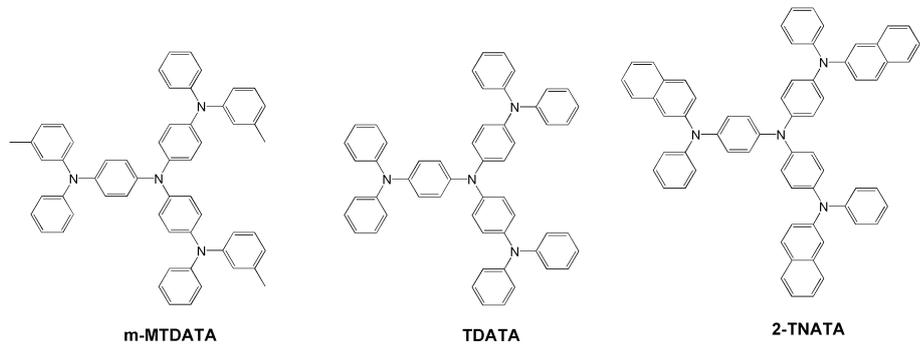
한편, 상기 화학식 3으로 표시되는 유기금속 화합물은 우수한 전하 이동도를 제공할 수 있는 바, 이를 채용한

유기 발광 소자의 전기적 특성이 향상될 수 있다.

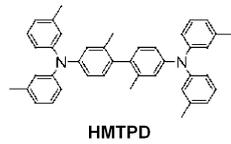
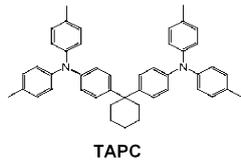
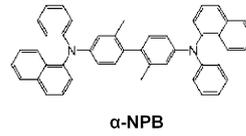
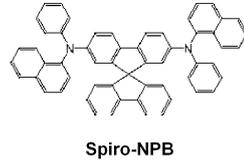
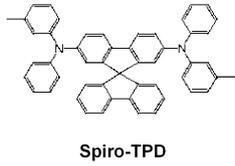
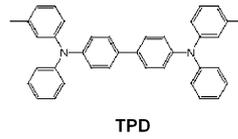
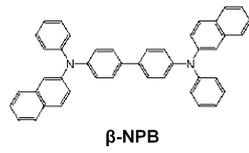
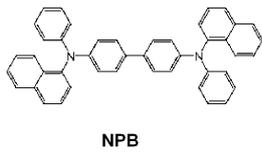
- [0141] 마지막으로, X_{24} 가 $N(R_{26})$ 이고 X_{21} 내지 X_{23} 중 적어도 하나는 N인 화학식 3으로 표시되는 유기금속 화합물은 넓은 단일항 에너지 레벨과 삼중항 에너지 레벨 범위(예를 들면, 1.5 내지 3.5eV)를 가질 수 있다.
- [0142] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 용이하게 인식할 수 있다.
- [0143] 따라서, 상기 화학식 1, 2 또는 3으로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 유기층, 예를 들면, 상기 유기층 중 발광층의 호스트로 사용하기 적합할 수 있는 바, 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 상기 화학식 1, 2 또는 3으로 표시되는 유기금속 화합물을 적어도 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0144] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1, 2 또는 3으로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한 유기층을 구비함으로써, 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있다.
- [0145] 상기 화학식 1, 2 또는 3으로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은 발광층, 제1전극과 발광층 사이의 정공 수송 영역(예를 들면, 정공 주입층, 정공 수송층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함함) 및 발광층과 제2전극 사이의 전자 수송 영역(예를 들면, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함함) 중 적어도 하나에 포함될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1, 2 또는 3으로 표시되는 유기금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있다. 이 때, 상기 발광층은 도펀트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 유기금속 화합물은 호스트의 역할을 할 수 있다. 상기 발광층은 녹색광 또는 적색광을 방출하는 녹색 발광층 또는 적색 발광층일 수 있고, 상기 도펀트는 인광 도펀트일 수 있다.
- [0146] 본 명세서 중 "(유기층이) 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1 내지 3의 범주에 속하는 1종의 유기금속 화합물 또는 상기 화학식 1 내지 3의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 유기금속 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0147] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재할 수 있다.
- [0148] 상기 제1전극은 정공 주입 전극인 애노드이고 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드이거나, 상기 제1전극은 전자 주입 전극인 캐소드이고 상기 제2전극은 정공 주입 전극인 캐소드이다.
- [0149] 예를 들어, 상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은, i) 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되고, 정공 주입층, 정공 수송층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함한 정공 수송 영역; 및 ii) 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한 전자 수송 영역;을 포함할 수 있다.
- [0150] 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.
- [0151] 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.
- [0152] 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.
- [0153] 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(SnO₂), 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.

- [0154] 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.
- [0155] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.
- [0156] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.
- [0157] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.
- [0158] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층 및 버퍼층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0159] 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.
- [0160] 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.
- [0161] 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 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0162] 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.
- [0163] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.
- [0164] 상기 정공 수송 영역은, 예를 들면, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, α-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/캄페르술포산), 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:



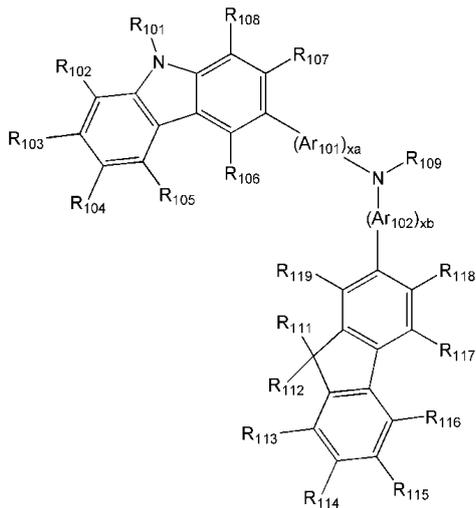
[0165]



[0166]

[0167]

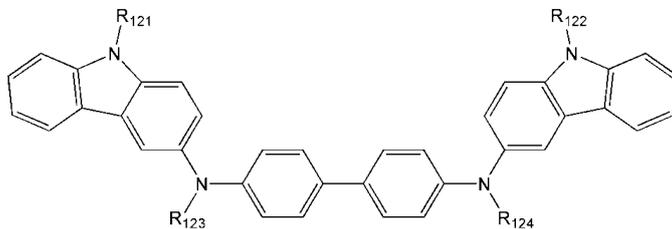
<화학식 201>



[0168]

[0169]

<화학식 202>



[0170]

[0171]

상기 화학식 201 중, Ar₁₀₁ 및 Ar₁₀₂는 서로 독립적으로,

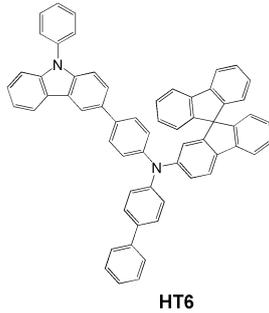
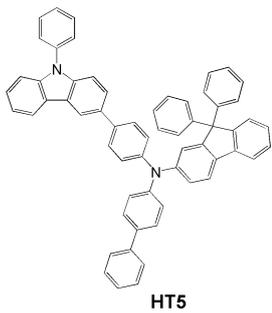
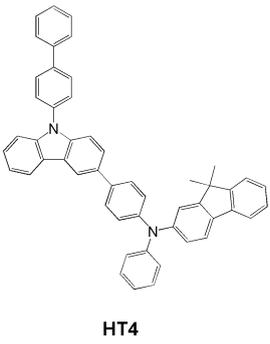
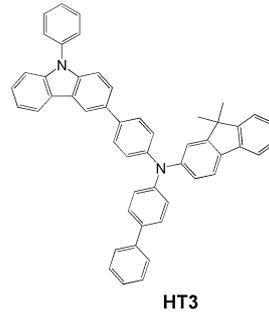
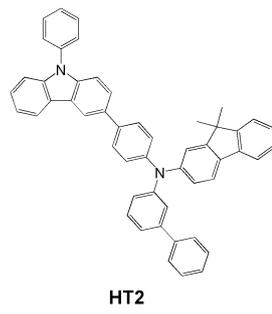
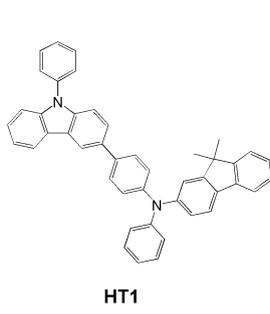
[0172]

페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인테닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 콰이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 또는 펜타세닐렌기; 또는

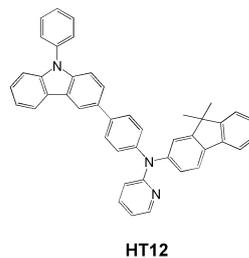
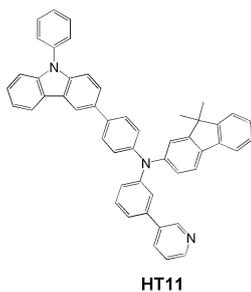
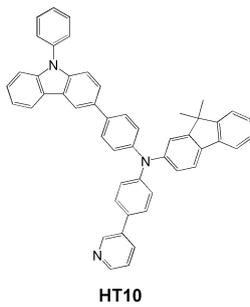
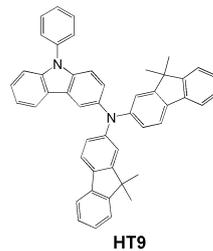
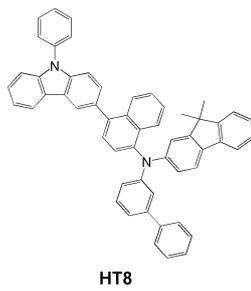
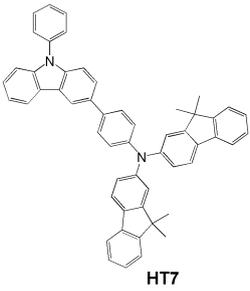
[0173]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀

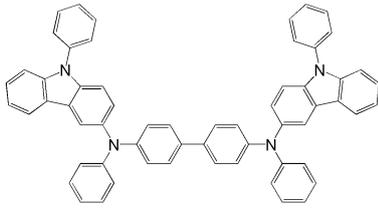
[0187] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



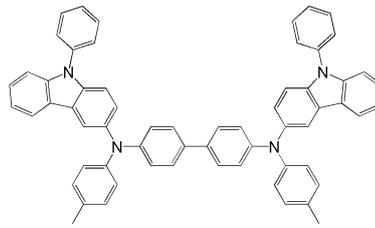
[0188]



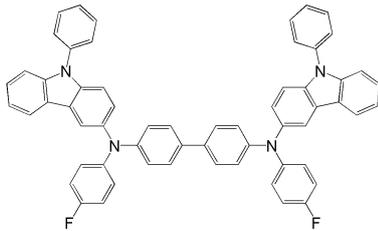
[0189]



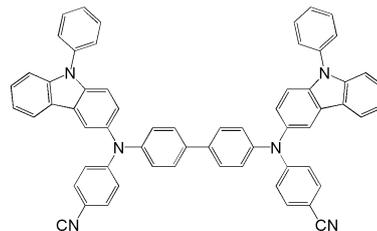
HT13



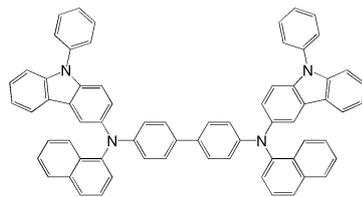
HT14



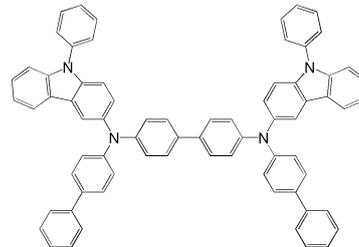
HT15



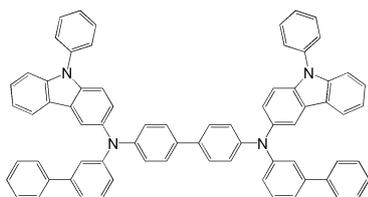
HT16



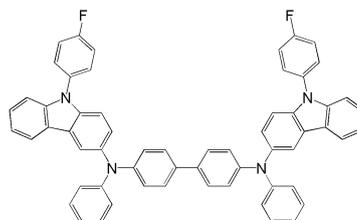
HT17



HT18



HT19



HT20

[0190]

[0191]

[0192]

[0193]

[0194]

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 수송층을 모두 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.

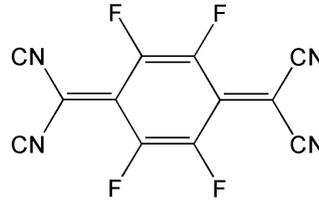
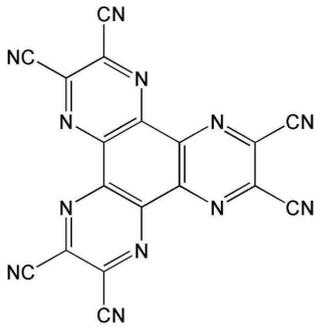
상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 전하-생성 물질은 상기 정공 수송 영역 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀸논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀸논 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.

[0195] <화합물 HT-D1>

<F4-TCNQ>



[0196]

[0197] 상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

[0198]

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

[0199]

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 선택 될 수 있다.

[0200]

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 호스트는 상기 화학식 1 내지 3 중 하나로 표시되는 유기금속 화합물 중 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0201]

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. 상기 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중 호스트는 상기 화학식 1 내지 3 중 하나로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 녹색 발광층 중 호스트는 상기 화학식 1 내지 3 중 하나로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.

[0202]

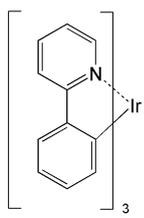
상기 발광층 중 도펀트는 형광 방출 메커니즘에 따라 광을 방출하는 형광 도펀트로서 또는 인광 방출 메커니즘에 따라 광을 방출하는 인광 도펀트를 포함할 수 있다.

[0203]

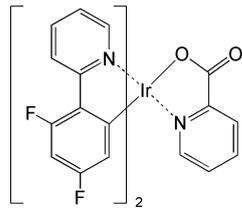
일 구현예에 따르면, 상기 발광층은 화학식 1 내지 3 중 하나로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한 호스트 및 인광 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 인광 도펀트는 전이 금속(예를 들면, 이리듐(Ir), 백금(Pt), 오스뮴(Os), 로듐(Rh) 등)을 포함한 유기금속 착체를 포함할 수 있다.

[0204]

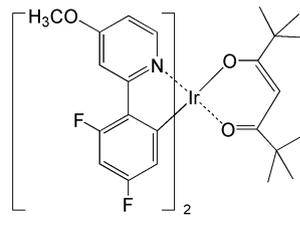
상기 인광 도펀트는 하기 화합물 PD1 내지 PD74 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다 (화합물 PD1은 Ir(ppy)₃임)



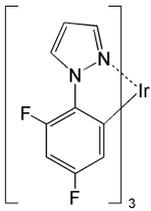
PD1



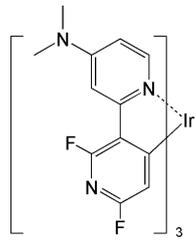
PD2



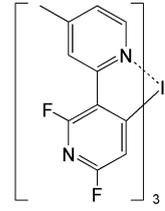
PD3



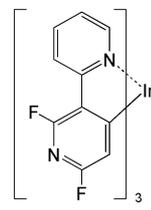
PD4



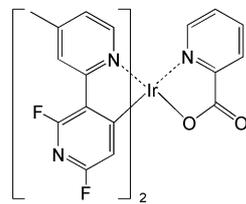
PD5



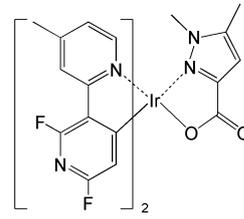
PD6



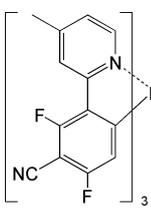
PD7



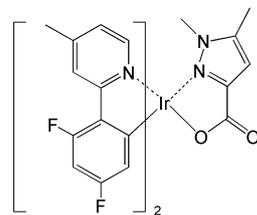
PD8



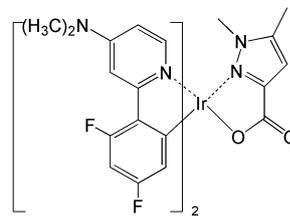
PD9



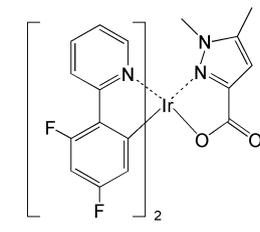
PD10



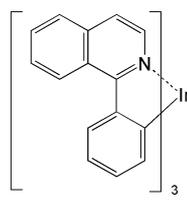
PD11



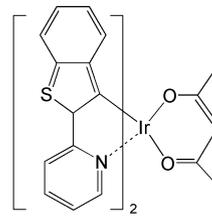
PD12



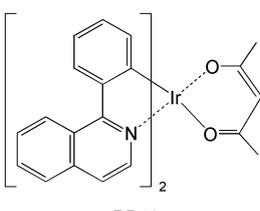
PD13



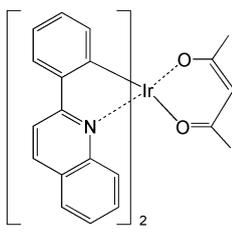
PD14



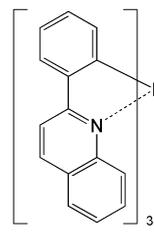
PD15



PD16



PD17

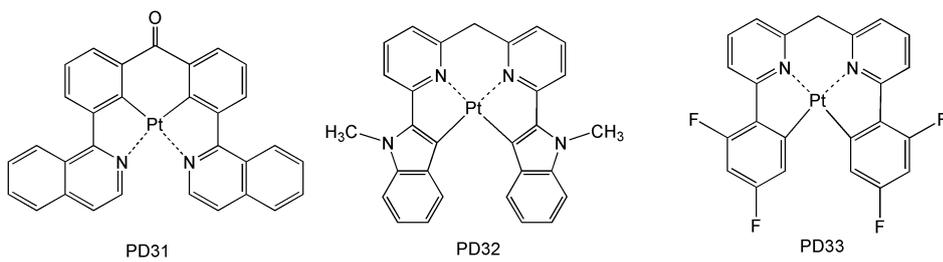
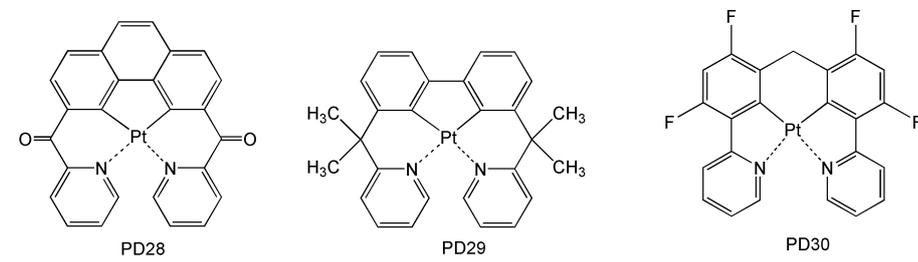
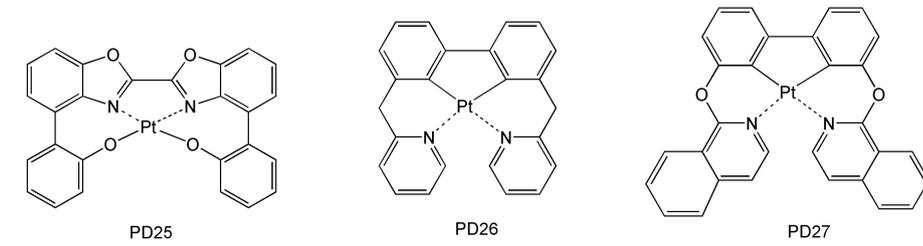
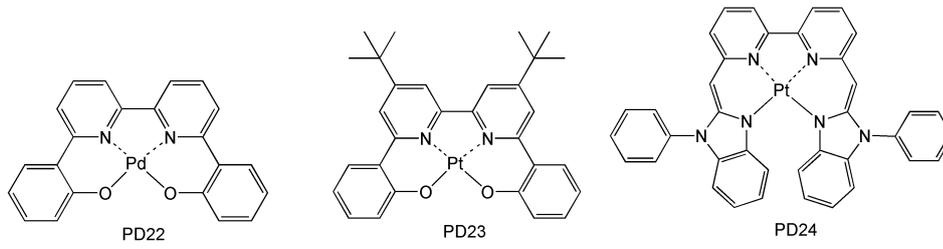
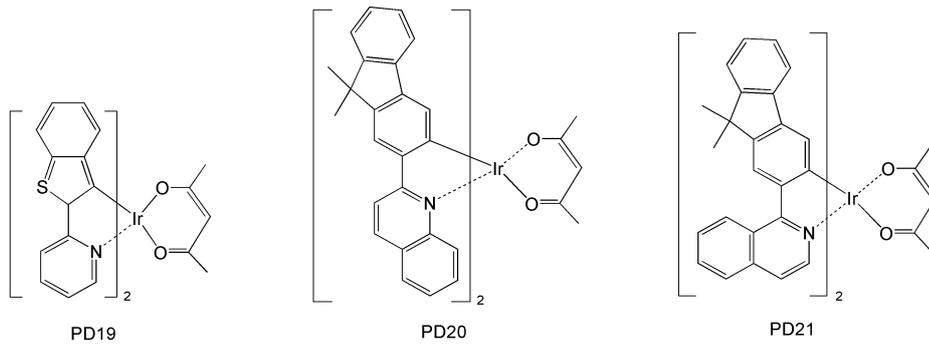


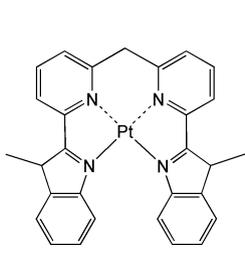
PD18

[0205]

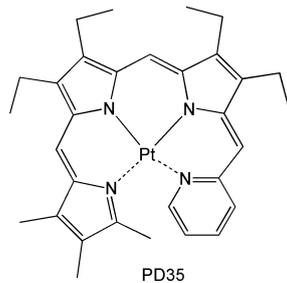
[0206]

[0207]

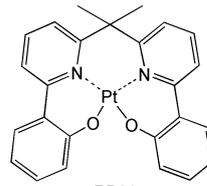




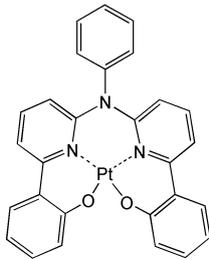
PD34



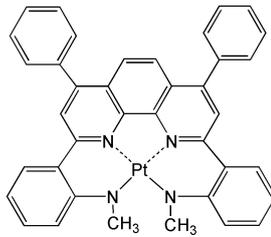
PD35



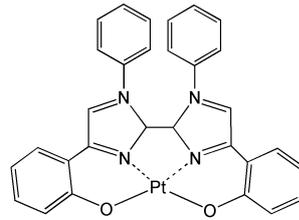
PD36



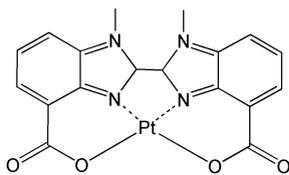
PD37



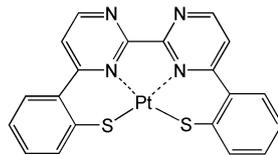
PD38



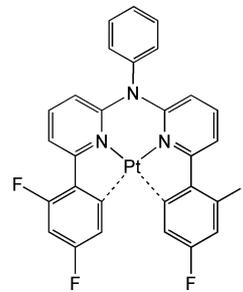
PD39



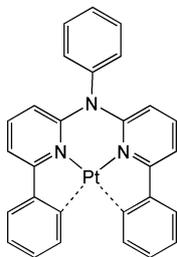
PD40



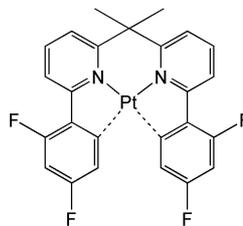
PD41



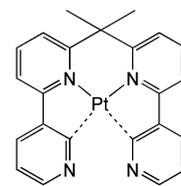
PD42



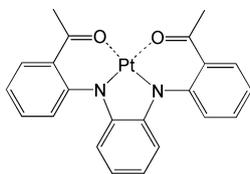
PD43



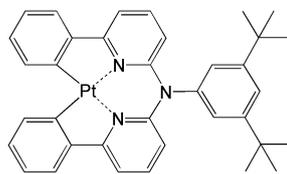
PD44



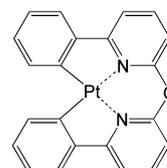
PD45



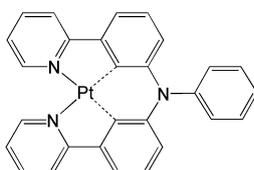
PD46



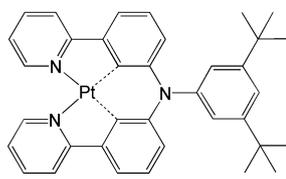
PD47



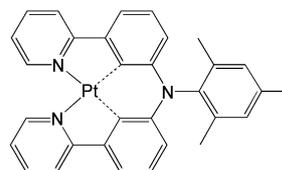
PD48



PD49



PD50

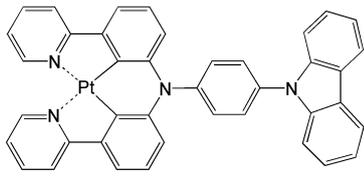


PD51

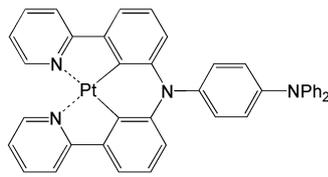
[0211]

[0212]

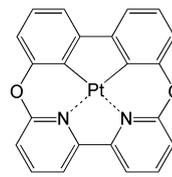
[0213]



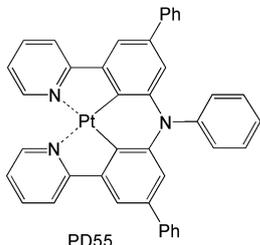
PD52



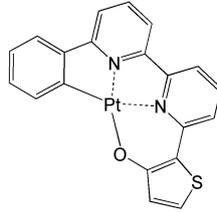
PD53



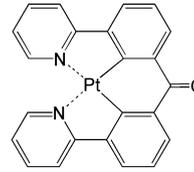
PD54



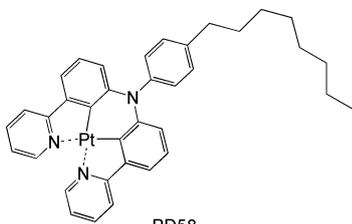
PD55



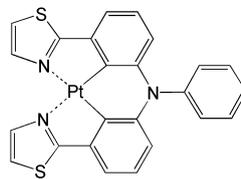
PD56



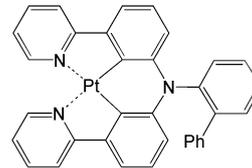
PD57



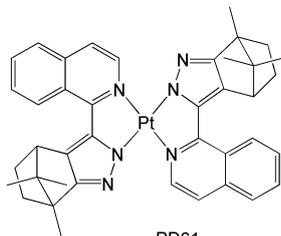
PD58



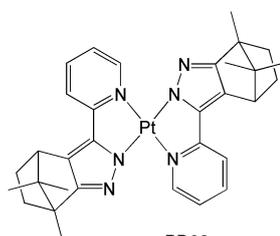
PD59



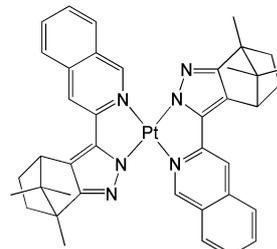
PD60



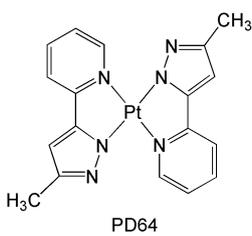
PD61



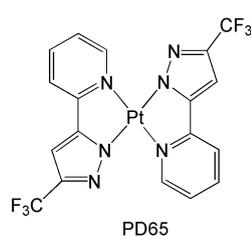
PD62



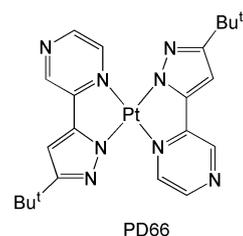
PD63



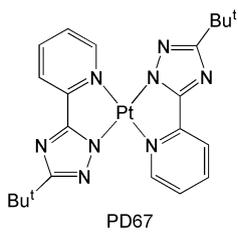
PD64



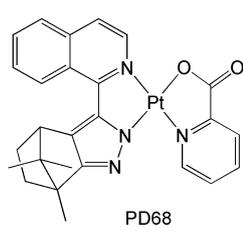
PD65



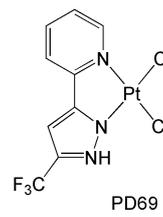
PD66



PD67



PD68

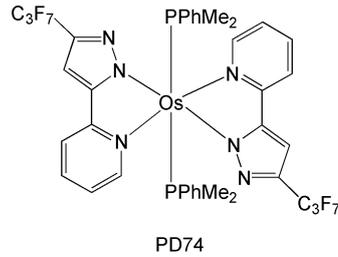
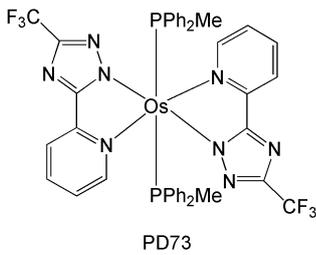
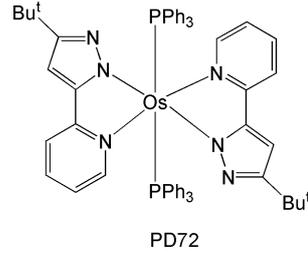
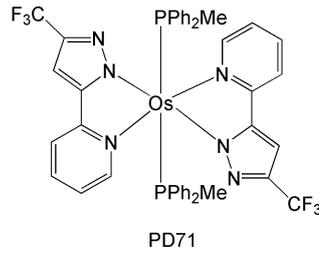
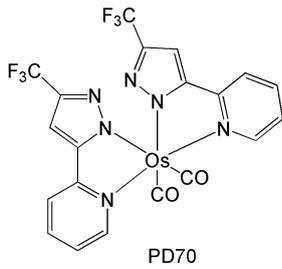


PD69

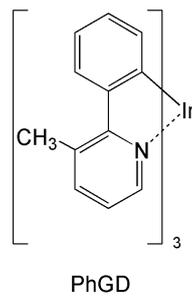
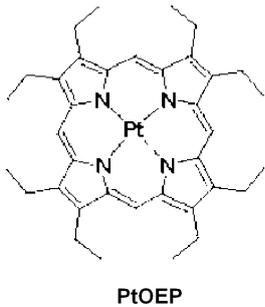
[0214]

[0215]

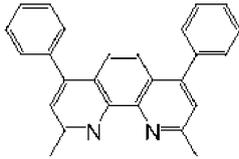
[0216]



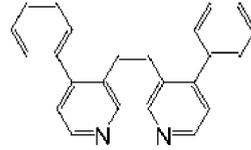
- [0217]
- [0218] 또는, 상기 인광 도펀트는 하기 PtOEP 또는 화합물 PhGD를 포함할 수 있다:



- [0219]
- [0220] 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.
- [0221] 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.
- [0222] 다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.
- [0223] 전자 수송 영역은 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0224] 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.
- [0225] 상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참조한다.
- [0226] 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP 및 Bphen 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



BCP



Bphen

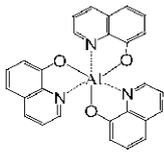
[0227]

[0228]

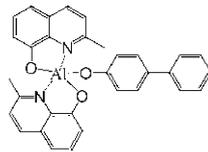
상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0229]

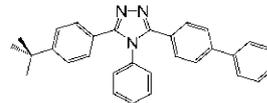
상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq₃, Balq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.



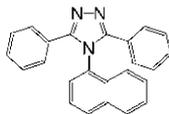
Alq₃



Balq



TAZ

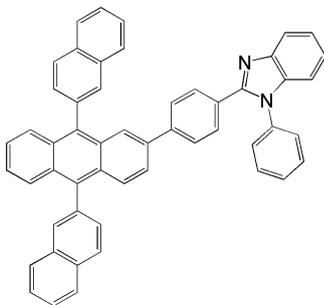


NTAZ

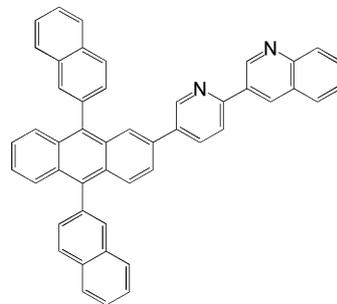
[0230]

[0231]

또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 및 ET2 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



ET1



ET2

[0232]

[0233]

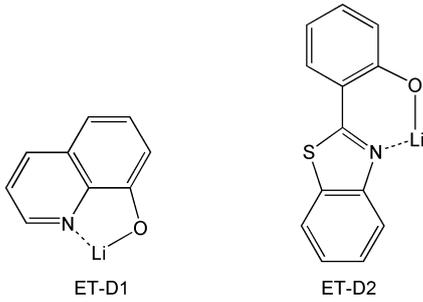
상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0234]

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

[0235]

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.



- [0236]
- [0237] 또한 전자 수송 영역은, 제2전극(19)으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 전자 주입층(EIL)을 포함할 수 있다.
- [0238] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li₂O 및 BaO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0239] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0240] 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.
- [0241] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0242] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0243] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는 -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0244] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0245] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0246] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0247] 본 명세서 중 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 2 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로푸라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0248] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로펜테닐기, 시클

로핵세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0249] 본 명세서 중 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 2 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-히드로푸라닐기, 2,3-히드로티오펜닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0250] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0251] 본 명세서 중 C₂-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 2 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C₂-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 2 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₂-C₆₀헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C₂-C₆₀헤테로아릴기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0252] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.

[0253] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함(예를 들어, 탄소수는 8 내지 60일 수 있음)하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹을 의미한다. 상기 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.

[0254] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소(예를 들어, 탄소수는 2 내지 60일 수 있음) 외에 N, O, P 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹을 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.

[0255] 본 명세서 중 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬렌기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐렌기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 적어도 하나의 치환기는,

[0256] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기,

카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0257] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0258] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0259] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅) 및 -B(Q₂₆)(Q₂₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0260] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅) 및 -B(Q₃₆)(Q₃₇); 중에서 선택될 수 있다.

[0261] 또한, 본 명세서 중 Q₁ 내지 Q₇, Q₁₁ 내지 Q₁₇ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₇은 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0262] 예를 들어, 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬렌기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐렌기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 적어도 하나의 치환기는,

[0263] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0264] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂),

-Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅) 및 -B(Q₁₆)(Q₁₇) 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0265] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헵세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기 및 퀴나졸리닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 핵사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤조이미다졸일기, 푸라닐기, 벤조푸라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이소옥사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리미디닐기 및 이미다조피리디닐기;

[0266] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₂-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₂-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅) 및 -B(Q₂₆)(Q₂₇) 중 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헵세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기 및 퀴나졸리닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 핵사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤조이미다졸일기, 푸라닐기, 벤조푸라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이소옥사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리미디닐기 및 이미다조피리디닐기; 및

[0267] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅) 및 -B(Q₃₆)(Q₃₇); 중에서 선택되고;

[0268] 상기 Q₁ 내지 Q₇, Q₁₁ 내지 Q₁₇ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₇은 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헵세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난쓰레닐기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 퀴녹살리닐기, 시놀리닐기 및 퀴나졸리닐기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 핵사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤조이미다졸일기, 푸라닐기, 벤조푸라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아

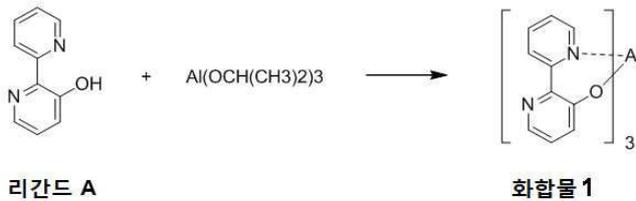
지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리미디닐기 및 이미다조피리디닐기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0269] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다.

[0270] 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.

[0271] [실시예]

[0272] **합성예 1 : 화합물 1의 합성**

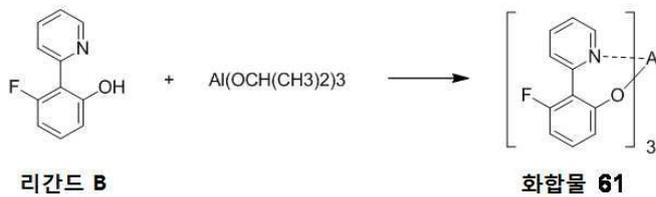


[0273]

[0274] 리간드 A 5.16g (30 mmol)와 Al(OCH(CH₃)₂)₃ 2.04g (10 mmol)을 내압 튜브에 넣었다. 에탄올 100mL를 넣고 85 °C에서 18시간동안 반응을 진행한 후, 반응이 종결되면 뜨거운 상태로 필터하고, 에탄올, 다이클로로메탄 (CH₂Cl₂), 헥산으로 세척한 다음, 건조하여 2.97g (55%) 화합물 1을 수득하였다.

[0275] 계산된 화합물 1의 원소 분석 수치 (C: 66.66, H: 3.92, N: 15.52), 측정된 원소 분석 수치 (C: 67.64, H: 3.975, N 15.52)

[0276] **합성예 2 : 화합물 61의 합성**

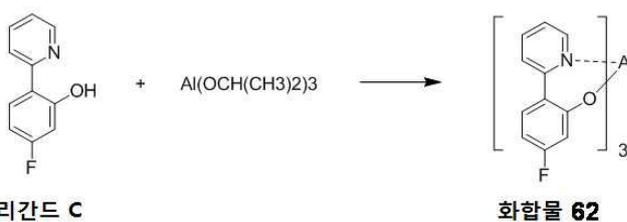


[0277]

[0278] 리간드 B 5.67g (30 mmol)와 Al(OCH(CH₃)₂)₃ 2.04g (10 mmol)을 내압 튜브에 넣었다. 에탄올 50mL를 넣고 85 °C에서 72시간동안 반응을 진행한 후, 반응이 종결되면 뜨거운 상태로 필터하고, 에탄올, 다이클로로메탄 (CH₂Cl₂), 헥산으로 세척한 다음 건조하여 1.36g (23%)의 화합물 61을 수득하였다.

[0279] 계산된 화합물 61의 원소 분석 수치 (C: 67.01, H: 3.58, N: 7.10), 측정된 원소 분석 수치 (C: 67.99, H: 3.51, N 6.95)

[0280] **합성예 3 : 화합물 62의 합성**



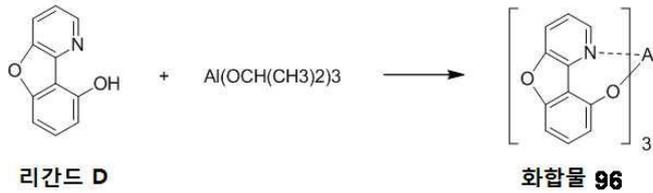
[0281]

[0282] 리간드 C 5.67g (30 mmol)와 Al(OCH(CH₃)₂)₃ 2.04g (10 mmol)을 내압 튜브에 넣었다. 에탄올 40mL를 넣고 85 도°C에서 72시간동안 반응을 진행한 후, 반응이 종결되면 뜨거운 상태로 필터하고, 에탄올, 다이클로로메탄

(CH₂Cl₂), 헥산으로 세척한 다음 건조하여 3.13g (53%)의 화합물 62를 수득하였다.

[0283] 계산된 화합물 62의 원소 분석 수치 (C: 67.01, H: 3.58, N: 7.10), 측정된 원소 분석 수치 (C: 67.56, H: 2.59, N 7.00)

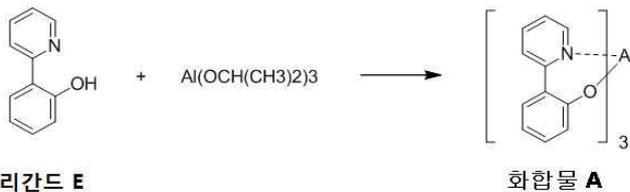
[0284] **합성예 4 : 화합물 96의 합성**



[0285] 리간드 D 5.55g (30 mmol)와 Al(OCH(CH₃)₂)₃ 2.04g (10 mmol)을 내압 튜브에 넣었다. 에탄올 50mL를 넣고 85 °C에서 72시간동안 반응을 진행한 후, 반응이 종결되면 뜨거운 상태로 필터하고, 에탄올, 다이클로로메탄 (CH₂Cl₂), 헥산으로 세척한 다음, 건조하여 3.04g (52.5%)의 화합물 96을 수득하였다.

[0287] 계산된 화합물 96의 원소 분석 수치 (C: 68.40, H: 3.13, N: 7.25), 측정된 원소 분석 수치 (C: 69.33, H: 2.899, N 7.05)

[0288] **비교예 1 : 화합물 A의 합성**



[0289] 리간드 E 5.14g (30 mmol)와 Al(OCH(CH₃)₂)₃ 2.04g (10 mmol)을 내압 튜브에 넣었다. 에탄올 50mL를 넣고 85 °C에서 20시간동안 반응을 진행한 후, 반응이 종결되면 뜨거운 상태로 필터하고, 에탄올, 다이클로로메탄 (CH₂Cl₂), 헥산으로 세척한 다음, 건조하여 3.60g (67%)의 화합물 A를 수득하였다.

[0291] 계산된 화합물 A의 원소 분석 수치 (C: 73.73, H: 4.50, N: 7.82), 측정된 원소 분석 수치 (C: 73.36, H: 4.836, N 7.74)

[0292] **평가예 1: 열적 특성 평가**

[0293] 화합물 1, 61, 62 및 A 각각에 대하여 TGA(Thermo Gravimetric Analysis) 및 DSC(Differential Scanning Calorimetry)를 이용하여 열분석 (N₂ 분위기, 온도구간 : 상온~ 800°C (10°C/min)-TGA, 상온에서 450°C까지-DSC, Pan Type : Pt Pan in 일회용 Al Pan(TGA), 일회용 Al pan(DSC))을 수행한 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0294]

화합물 No.	Td5	Tg	Tm	Ts
화합물 1	314	167.27	n/a	n/a
화합물 61	284	n/a	n/a	n/a
화합물 62	305	n/a	n/a	n/a
화합물 96	330	n/a	n/a	n/a
화합물 A	272	94.29	n/a	n/a

[0295] 상기 표 1로부터 화합물 1, 61 및 62는 우수한 열안정성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0296] **실시예 1**

[0297] ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하였다.

[0298] 이어서, 상기 유리 기판 상의 ITO 전극(애노드) 상에 m-MTDATA를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 α-NPD를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 250Å 두께의 정공 수송층을 형성한다. 상기 정공 수송층 버퍼층 상에 Ir(ppy)₃ (도펀트) 및 상기 화합물 1(호스트)을 각각 증착 속도 0.1Å/sec와 1Å/sec로 공증착하여 400Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0299] 상기 발광층 상에 BAlq를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상에 Alq₃를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 후, 상기 전자 주입층 상에 Al를 진공 증착하여 1200Å 두께의 제2전극(캐소드)을 형성함으로써, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / 화합물 1 + 10% (Ir(ppy)₃) (400Å) / BAlq(50Å) / Alq₃(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å) 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0300] **실시예 2**

[0301] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 1 대신, 화합물 61을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / 화합물 61 + 10% (Ir(ppy)₃) (400Å) / BAlq(50Å) / Alq₃(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å)의 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0302] **실시예 3**

[0303] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 1 대신, 화합물 62를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / 화합물 62 + 10% (Ir(ppy)₃) (400Å) / BAlq(50Å) / Alq₃(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å)의 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0304] **실시예 4**

[0305] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 1 대신, 화합물 96을 사용하고 도펀트로서 도펀트로서 Ir(ppy)₃ 대신 Ir(piq)₃ (Ir(piq)₃는 본 명세서 중 화합물 PD14와 동일한 화합물임)를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / 화합물 96 + 10% (Ir(piq)₃) (400Å) / BAlq(50Å) / Alq₃(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å)의 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0306] **비교예 1**

[0307] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 1 대신 화합물 A를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / 화합물 A + 10% (Ir(ppy)₃) (400Å) / BAlq(50Å) / Alq₃(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å)의 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0308] **비교예 2**

[0309] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 1 대신 CBP를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을

이용하여, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / CBP + 10% (Ir(ppy)₃) (400Å) / BA1q(50Å) / Alq3(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å)의 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0310] **비교예 3**

[0311] 발광층 형성시 도펀트로서 Ir(ppy)₃ 대신 Ir(piQ)₃를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / CBP + 10% (Ir(piQ)₃) (400Å) / BA1q(50Å) / Alq3(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å)의 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0312] **평가예 2: 유기 발광 소자의 특성 평가**

[0313] 상기 실시예 1 내지 4 및 비교예 1 내지 3의 유기 발광 소자의 특성을 하기 방법에 따라 평가하여, 그 결과를 표 2에 나타내었다.

[0314] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0315] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 -5V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0316] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0317] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 -5V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0318] (3) 발광효율 측정

[0319] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

표 2

	호스트	도펀트	구동 전압 (V)	전류 효율 (cd/A)	전력효율 (Lm/W)
실시예 1	화합물 1	Ir(ppy) ₃	5.9	29.0	15.4
실시예 2	화합물 61	Ir(ppy) ₃	6.0	27.5	14.4
실시예 3	화합물 62	Ir(ppy) ₃	5.8	30.5	16.5
실시예 4	화합물 96	Ir(piQ) ₃	5.8	7.8	4.2
비교예 1	화합물 A	Ir(ppy) ₃	7.0	25.5	11.4
비교예 2	CBP	Ir(ppy) ₃	6.6	30.5	14.5
비교예 3	CBP	Ir(piQ) ₃	6.2	7.4	3.7

[0321] 상기 표 2로부터, 실시예 1 내지 3의 유기 발광 소자는 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자에 비하여, 낮은 구동 전압 및 높은 전류 효율과 전력 효율을 갖고, 실시예 4의 유기 발광 소자는 비교예 3의 유기 발광 소자에 비하여 낮은 구동 전압을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0322] 10: 유기 발광 소자

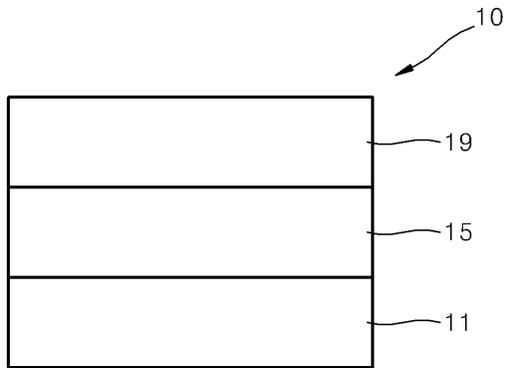
11: 제1전극

15: 유기층

19: 제2전극

도면

도면1



【심사관 직권보정사항】

【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

【보정세부항목】 청구항 18

【변경전】

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 제1항 내지 제17항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자.

【변경후】

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 제1항 내지 제4항, 제6항, 및 제8항 내지 제17항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자.