



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2021-0112425  
(43) 공개일자 2021년09월15일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
H01L 51/0083 (2013.01)  
H01L 51/0071 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2020-0026896  
(22) 출원일자 2020년03월04일  
심사청구일자 없음

(71) 출원인  
삼성디스플레이 주식회사  
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)  
(72) 발명자  
이은영  
세종특별자치시 보람로 15  
고수병  
경기도 용인시 기흥구 동백2로 39 (중동, 어은목  
마을대원칸타빌아파트) 4104동 1102호  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
특허법인 고려

전체 청구항 수 : 총 20 항

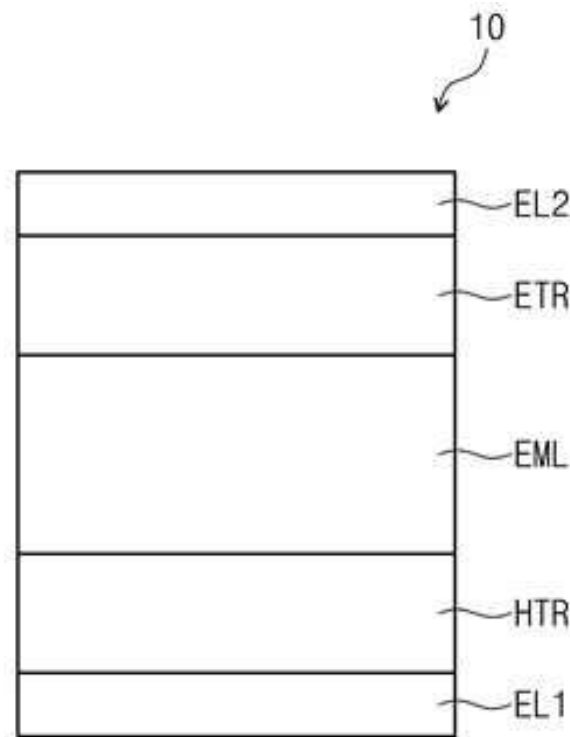
(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 유기 금속 화합물

(57) 요약

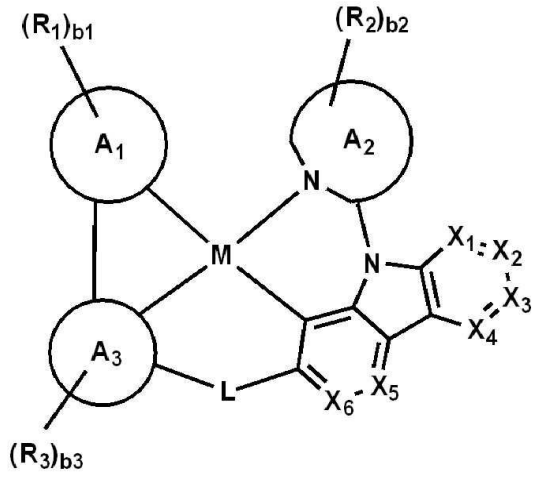
일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극, 제1 전극 상에 배치된 제2 전극, 및 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 발광층을 포함하고, 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 포함하여 높은 발광 효율 특성을 나타낼 수 있다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



[화학식 1]



(52) CPC특허분류  
*H01L 51/5024* (2013.01)  
*H01L 2251/30* (2013.01)

(72) 발명자

**김성범**

경기도 용인시 기흥구 금화로11번길 10 303동 403호 (상갈동, 금화마을주공3단지아파트)

**이재성**

경기도 화성시 노작로 177 (반송동, 마젤란오피스텔) 408호

**이현정**

경상북도 포항시 남구 청암로 77 (지곡동, 포항공과대학교) 리스트 3동 3365호

명세서

청구범위

청구항 1

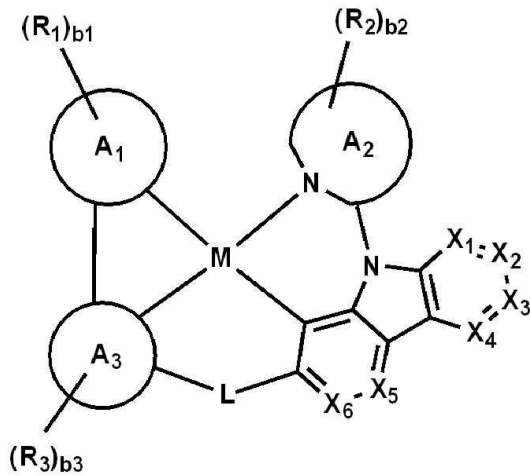
제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 제2 전극; 및

상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 배치된 발광층; 을 포함하고,

상기 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

M은 전이 금속이고,

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 선택되는 하나 또는 둘이 N이고, 나머지는 CR<sub>4</sub>이고,

X<sub>1</sub>이 N인 경우, X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 어느 하나는 N이고,

R<sub>4</sub>는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이고,

A<sub>1</sub> 내지 A<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 1 이상 60 이하의 헤테로 고리이고,

b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 1 이상 4 이하의 정수이고,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 60 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 60 이하의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 60 이하의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 60 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 1 이상 10 이하의 헤테로 고리기이고,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 중수소 원자 또는 CD<sub>3</sub>이거나, 또는 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 중수소 원자 또는 CD<sub>3</sub>으로 치환된 것이고,

L은 직접 결합, O, S, -CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>-, -CR<sub>13</sub>=CR<sub>14</sub>-, -C≡C-, -C(=O)-, -C(=S)-, -BR<sub>15</sub>-, -NR<sub>16</sub>-, -PR<sub>17</sub>R<sub>18</sub>-, 또는 -GeR<sub>19</sub>R<sub>20</sub>- 이고,

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>20</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 30 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

**청구항 2**

제 1항에 있어서,

상기 M은 Pt, Pd, Cu, 또는 Os인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 3**

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 인광 발광하는 것인 유기 전계 발광 소자.

**청구항 4**

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고,

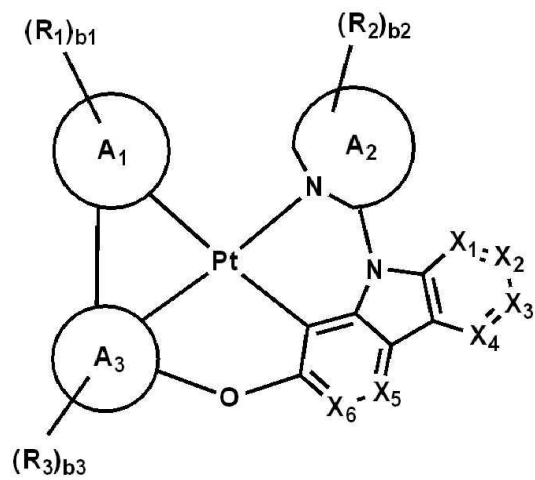
상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 5**

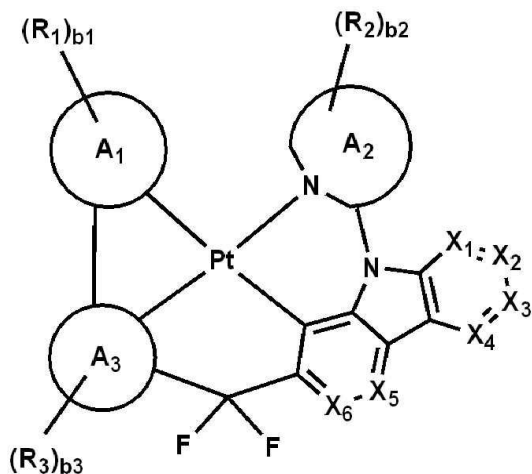
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서,

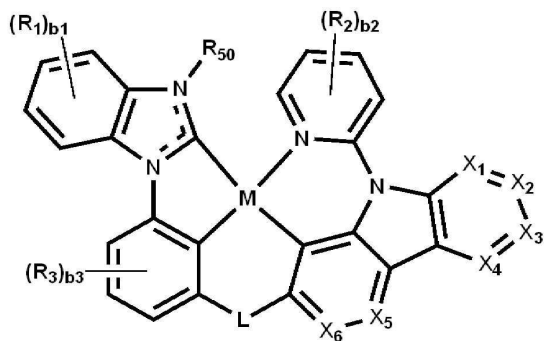
A<sub>1</sub> 내지 A<sub>3</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 6**

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

R<sub>50</sub>은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 30 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,

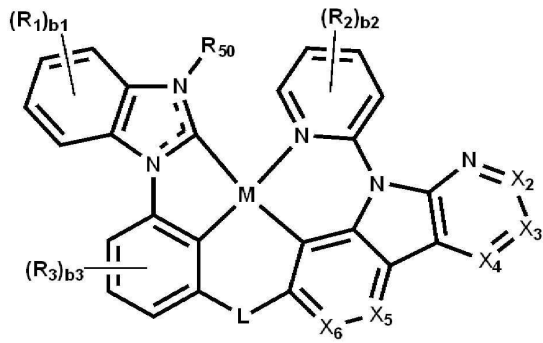
M, L, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 7**

제 6항에 있어서,

상기 화학식 3은 하기 화학식 3-1로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 3-1]



상기 화학식 3-1에서,

$X_2$  내지  $X_6$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는  $CR_4$ 이고,

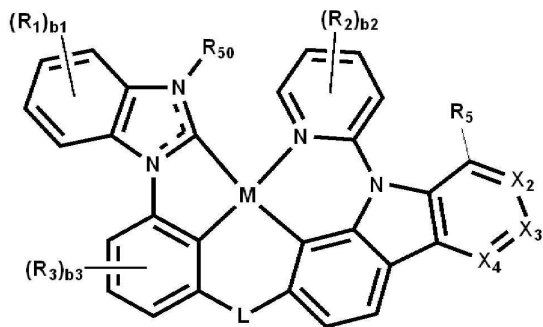
M, L,  $R_1$  내지  $R_4$ ,  $R_{50}$  및  $b_1$  내지  $b_3$ 은 상기 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 8

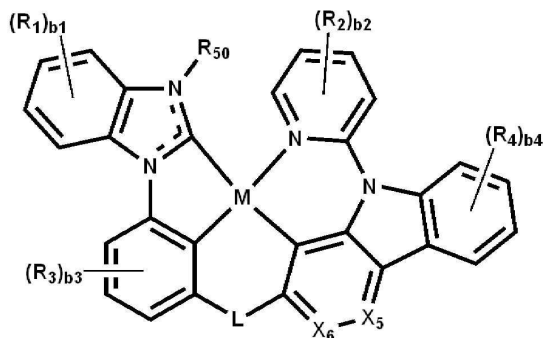
제 6항에 있어서,

상기 화학식 3은 하기 화학식 3-2 또는 화학식 3-3으로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 3-2]



[화학식 3-3]



상기 화학식 3-2에서,

$X_2$  내지  $X_4$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는  $CR_4$ 이고,

$R_5$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이고,

상기 화학식 3-3에서,

$X_5$  및  $X_6$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는  $CR_6$ 이고,

b<sub>4</sub>는 1 이상 4 이하의 정수이고,

R<sub>6</sub>은 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이고,

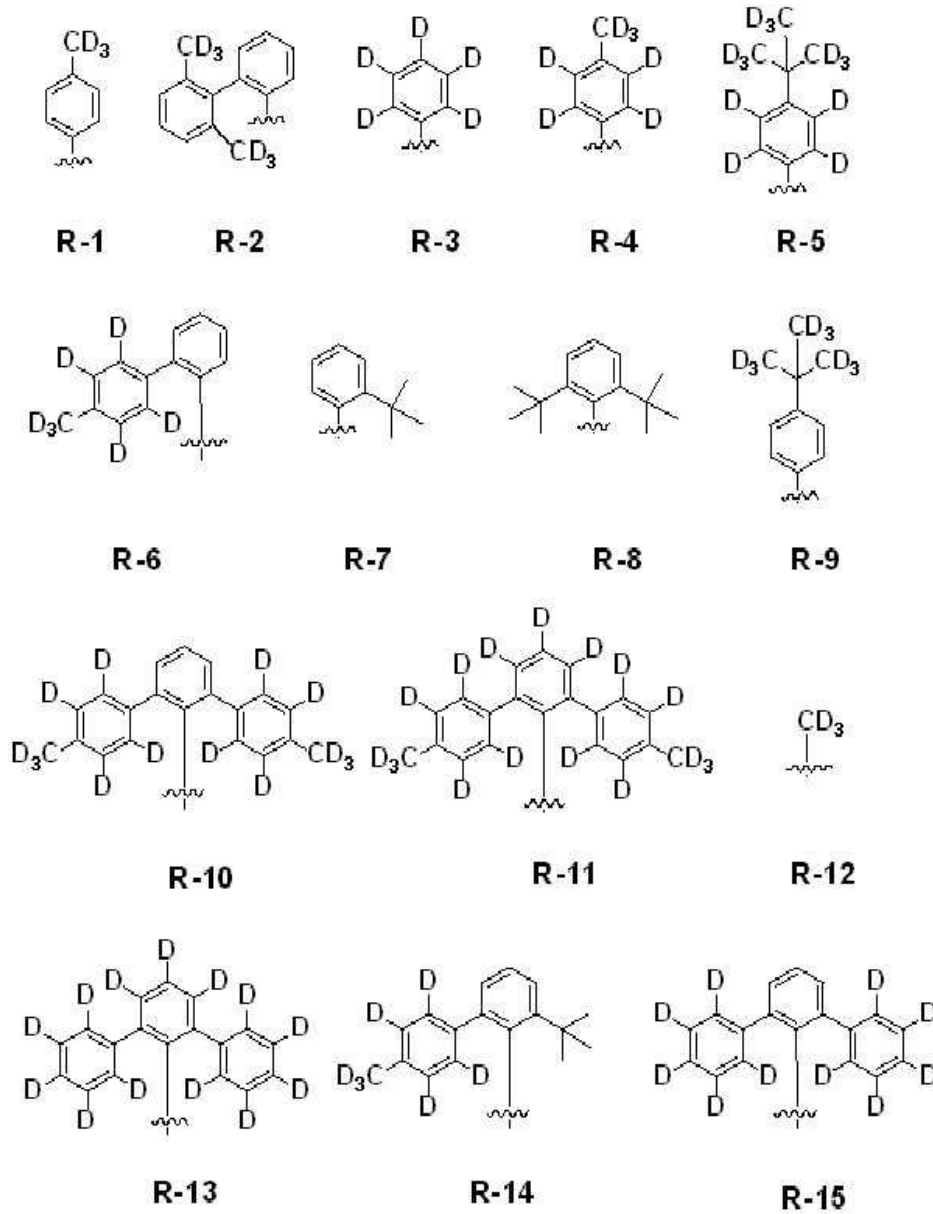
M, L, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>, 및 R<sub>50</sub>은 상기 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 9**

제 6항에 있어서

상기 R<sub>50</sub>은 하기 화합물군 R의 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 R]



**청구항 10**

제 9항에 있어서,

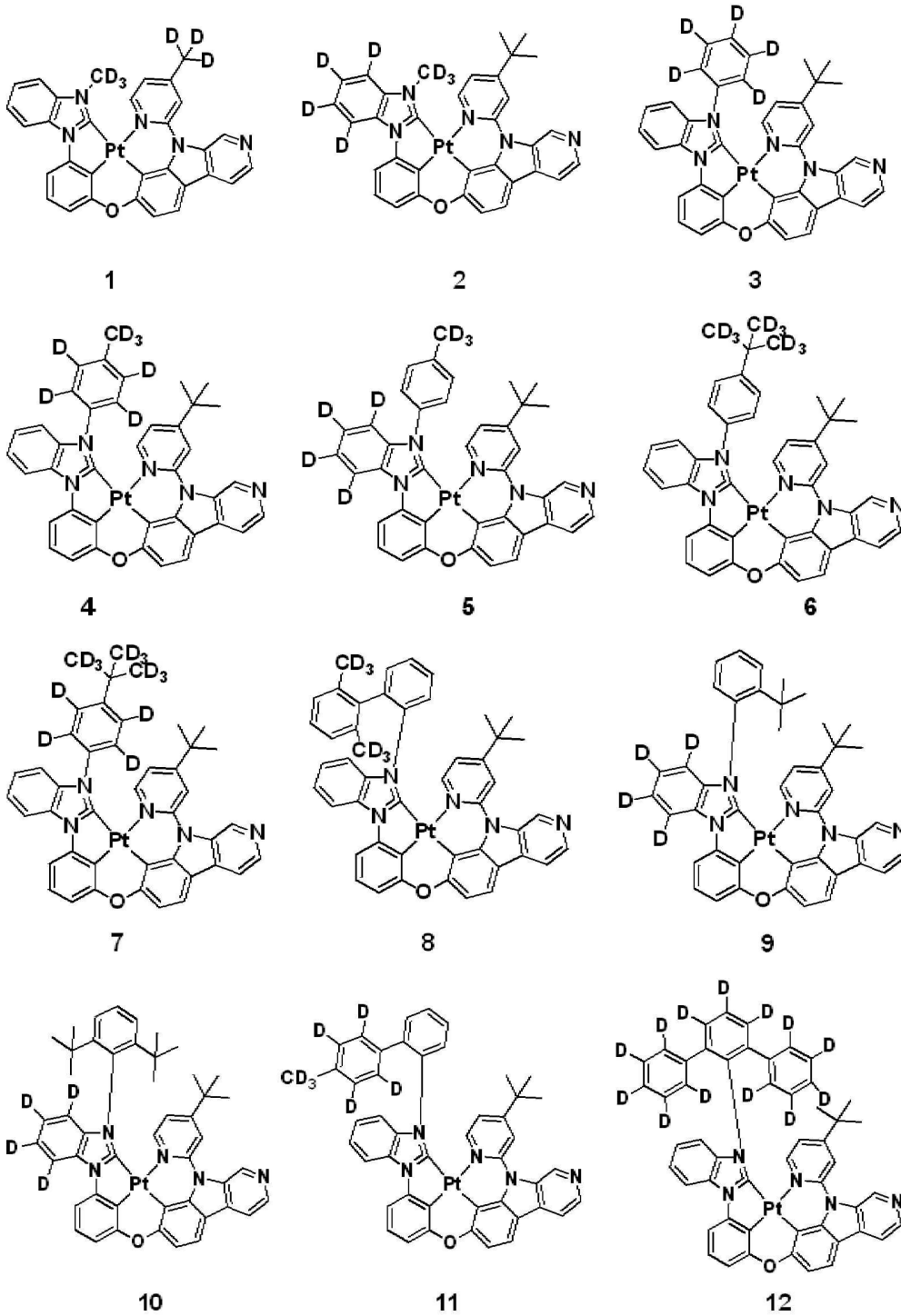
상기 R<sub>50</sub>이 화합물 R-7 또는 R-8인 경우, R<sub>1</sub>은 적어도 하나의 중수소 원자를 포함하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 11**

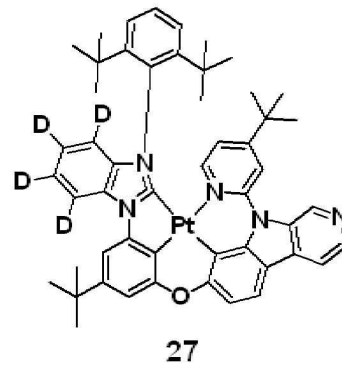
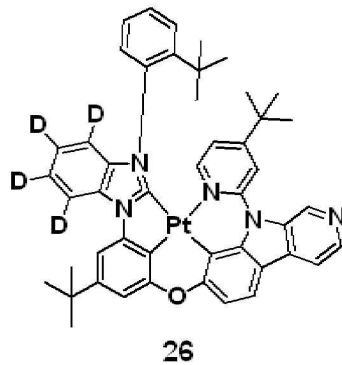
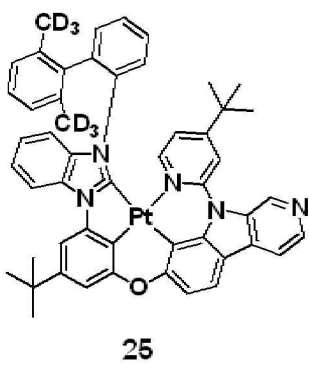
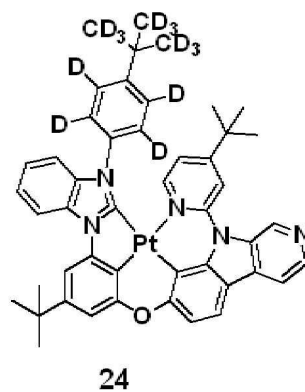
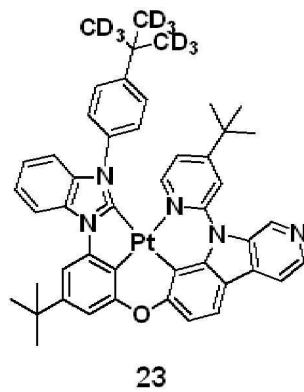
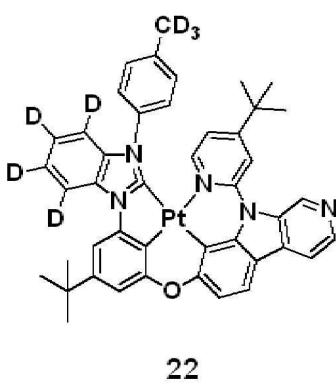
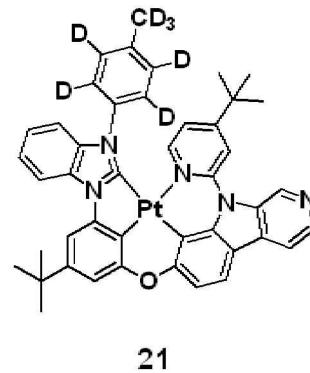
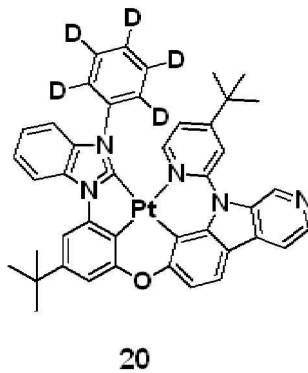
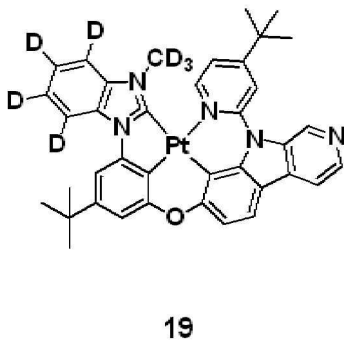
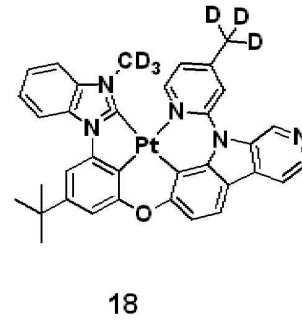
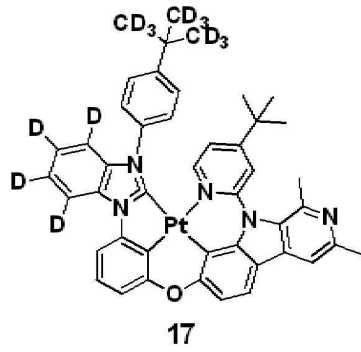
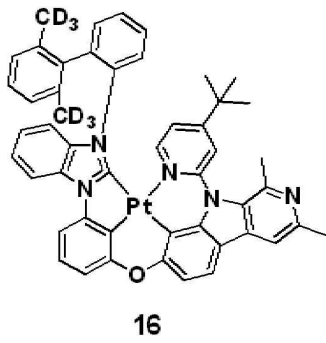
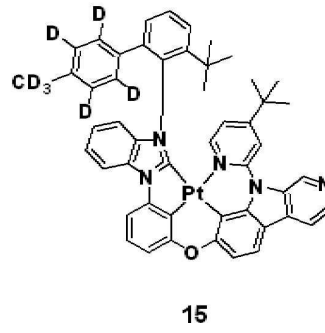
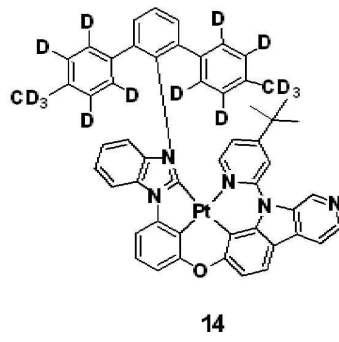
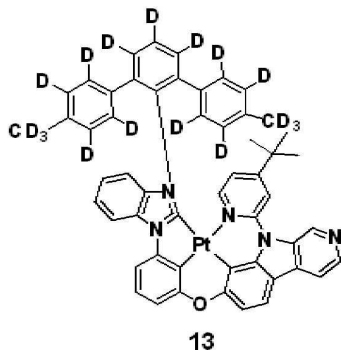
제 1항에 있어서,

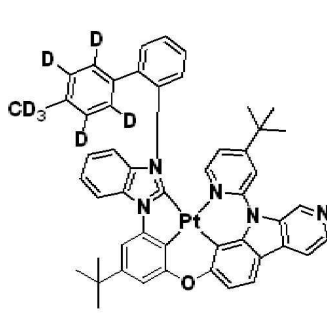
상기 발광층은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나를 포함하는 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]

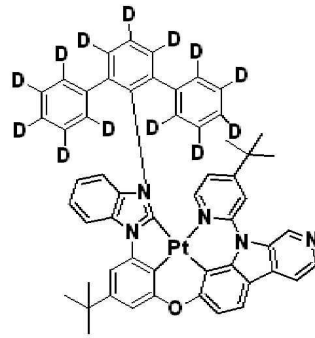




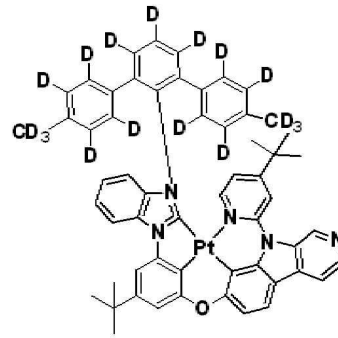




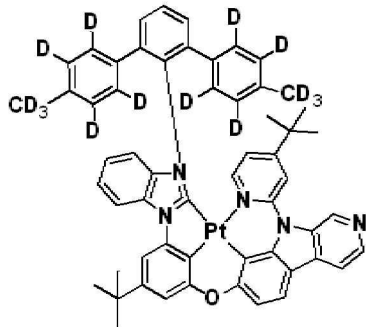
28



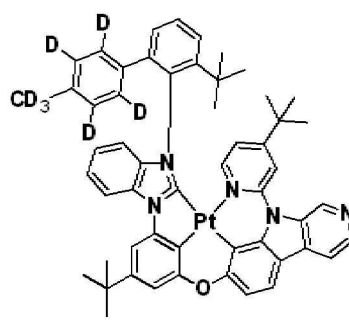
29



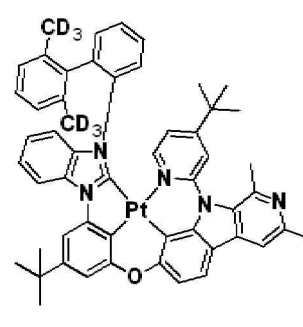
30



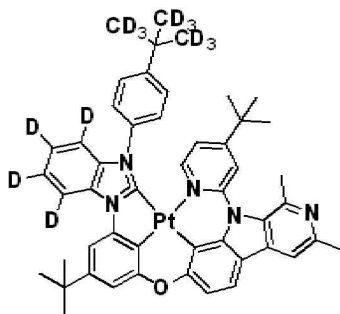
31



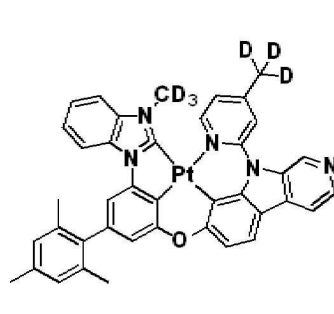
32



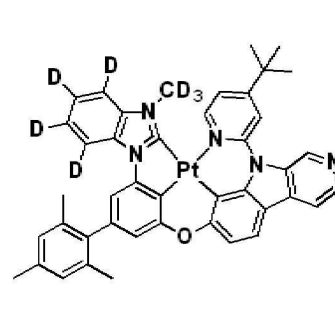
33



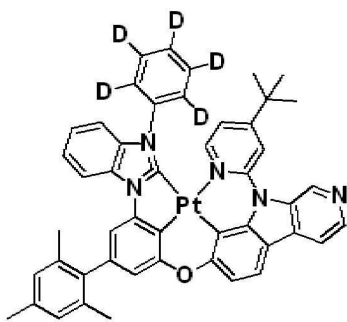
34



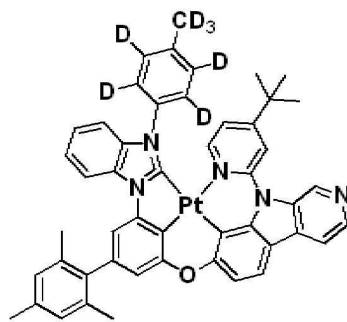
35



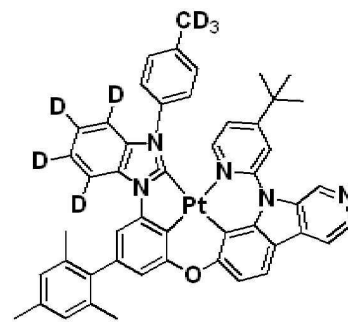
36



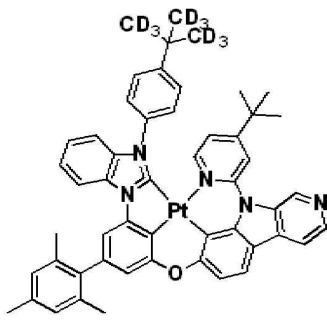
37



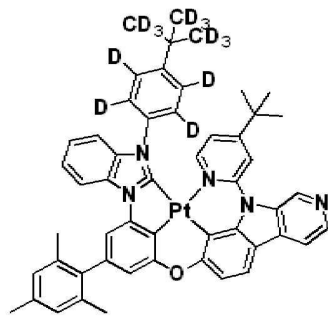
38



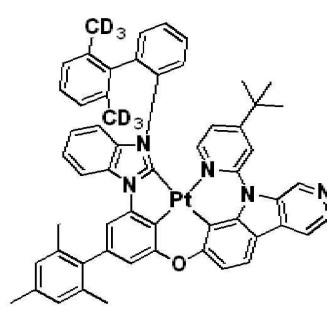
39



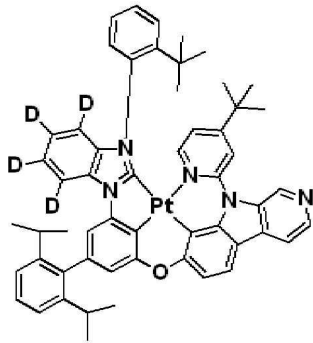
40



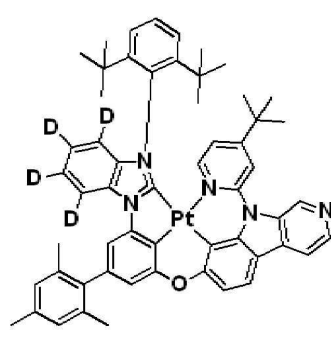
41



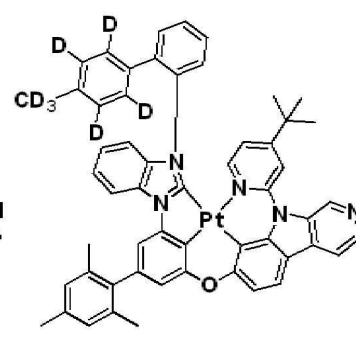
42



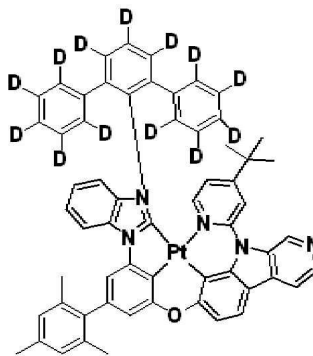
43



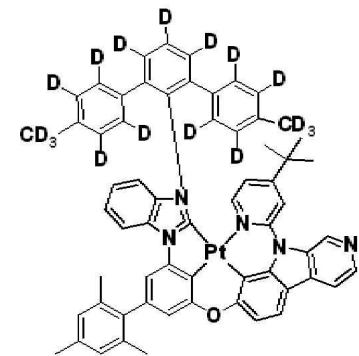
44



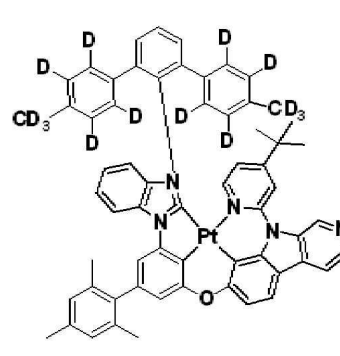
45



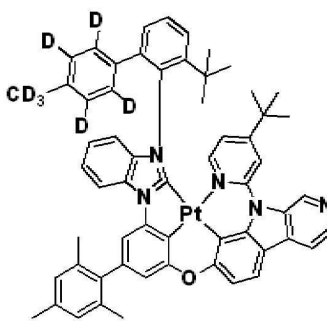
46



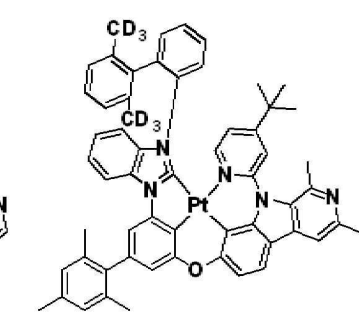
47



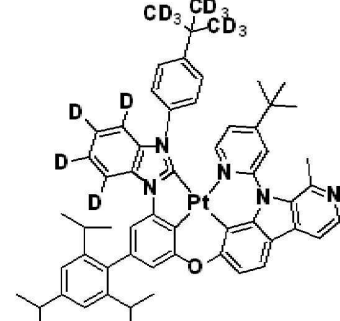
48



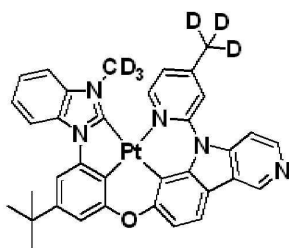
49



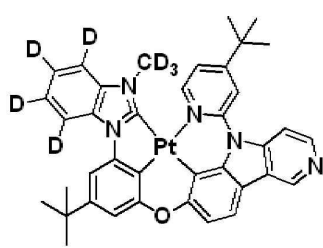
50



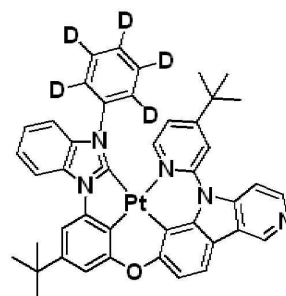
51



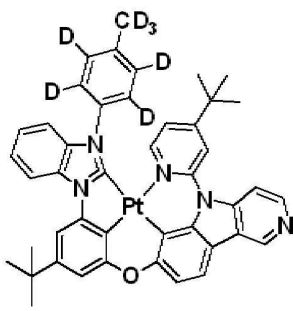
52



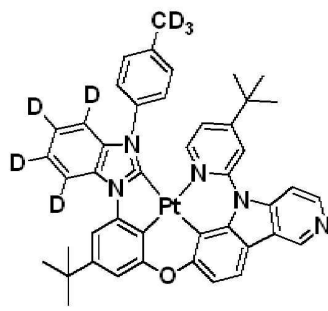
53



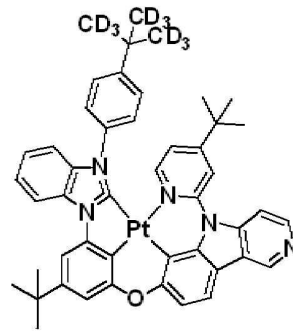
54



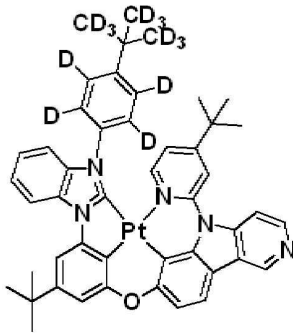
55



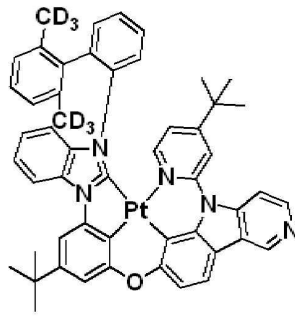
56



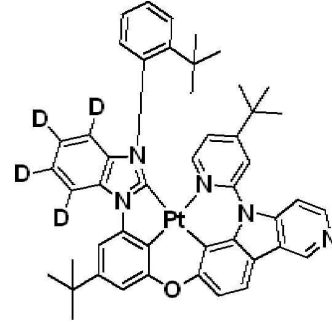
57



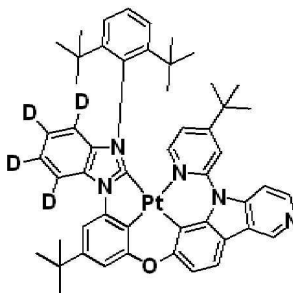
58



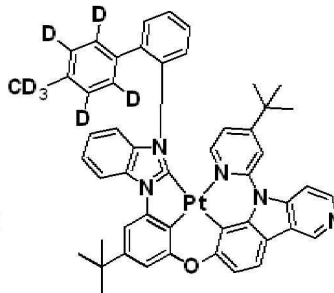
59



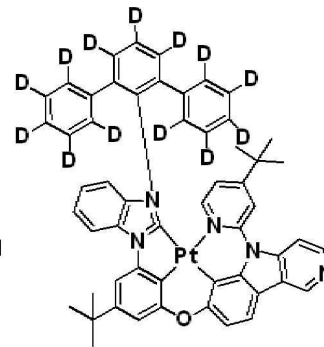
60



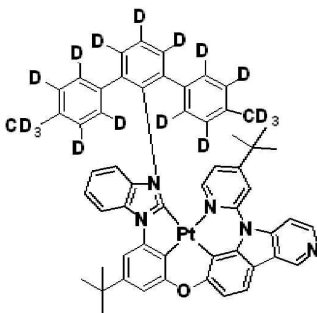
61



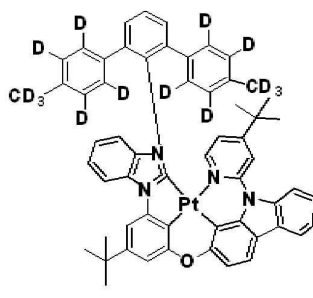
62



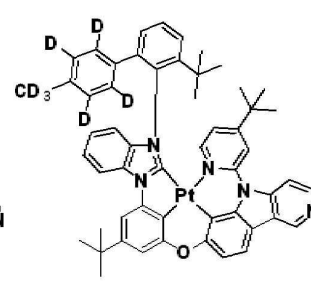
63



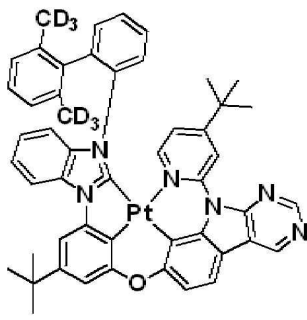
64



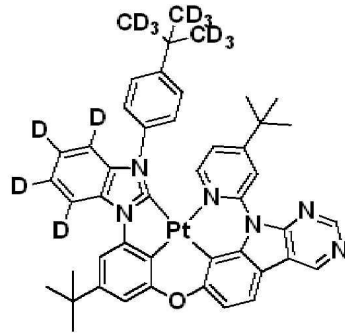
65



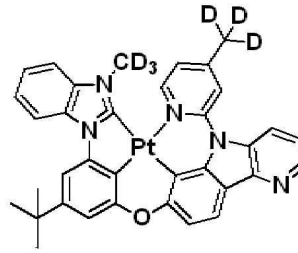
66



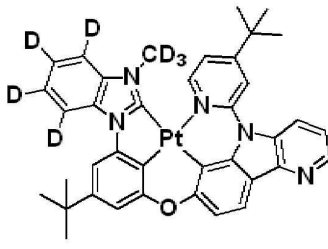
67



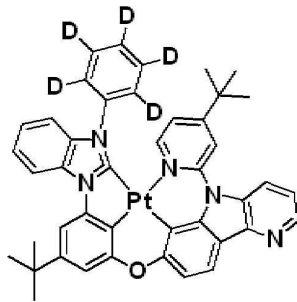
68



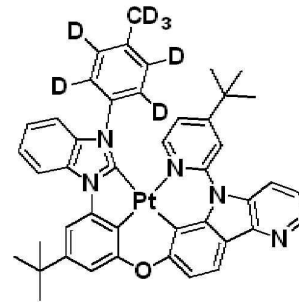
69



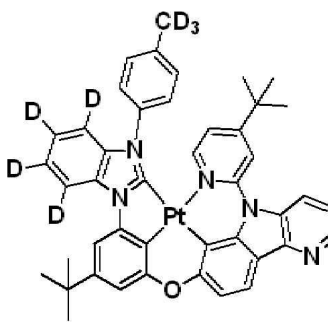
70



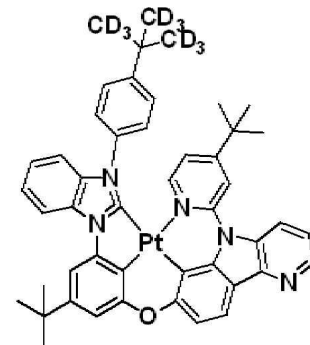
71



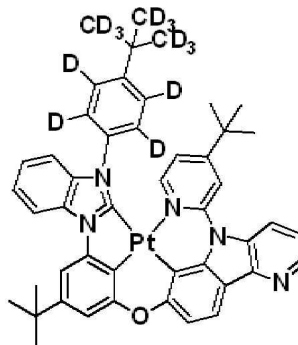
72



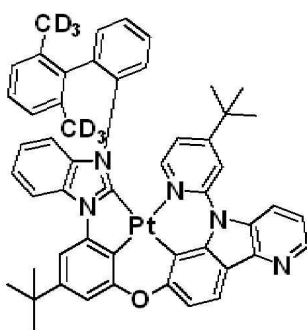
73



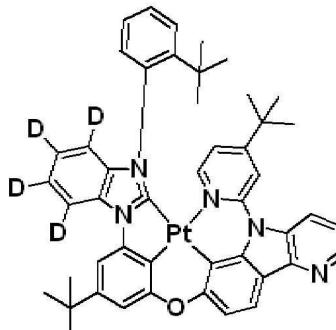
74



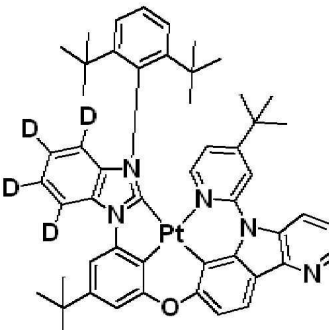
75



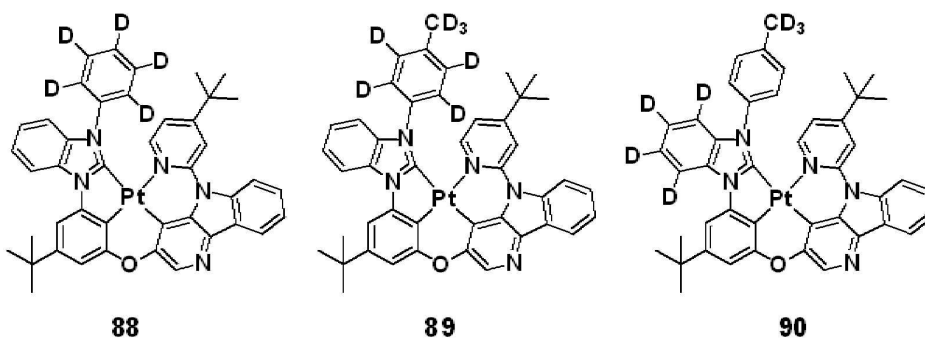
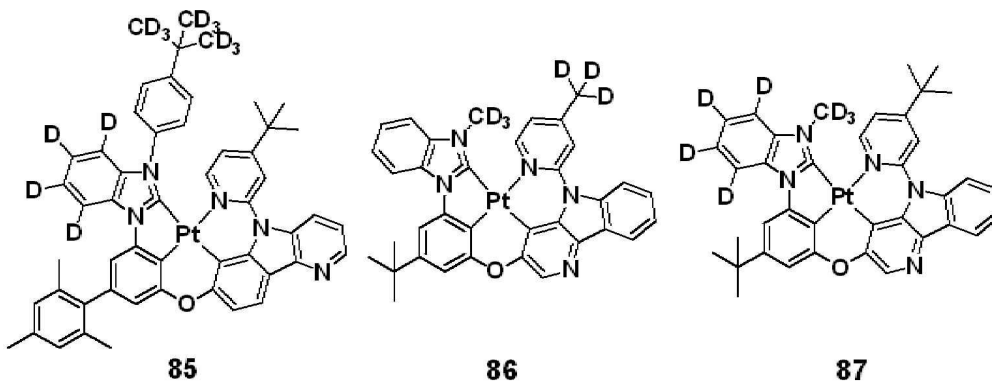
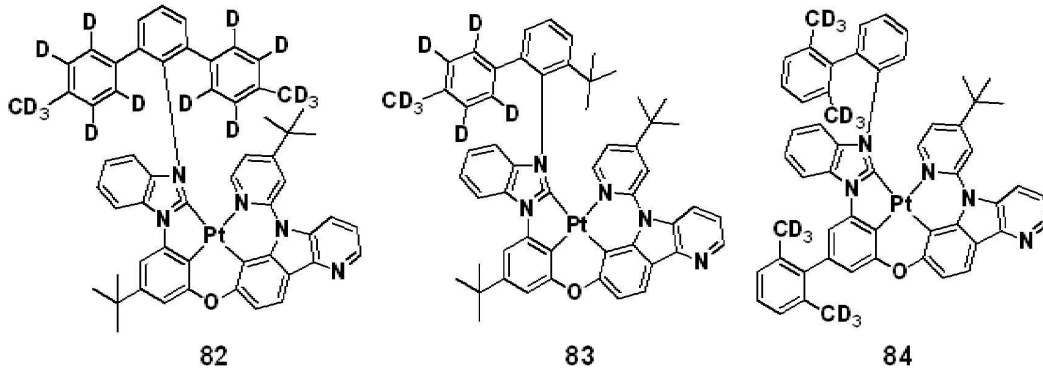
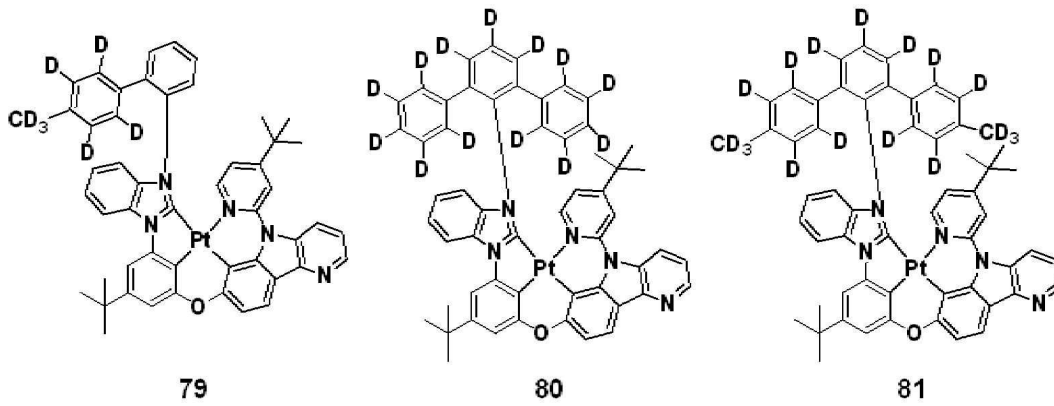
76

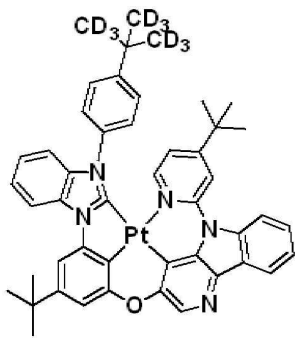


77

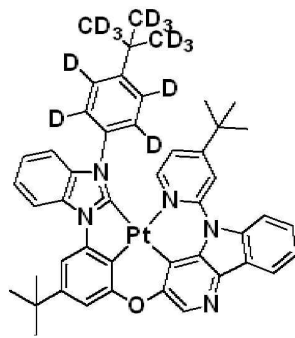


78

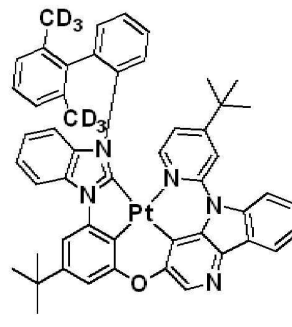




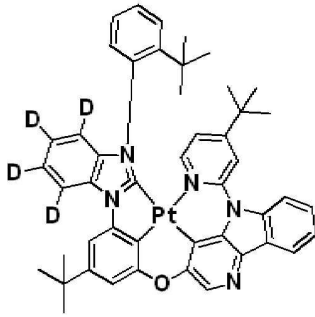
91



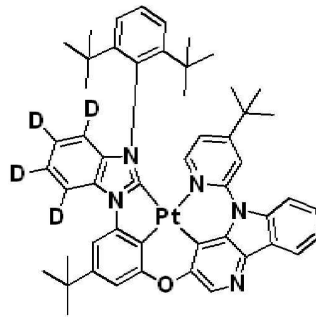
92



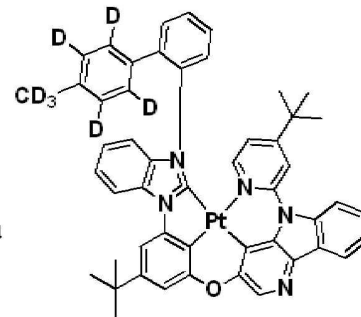
93



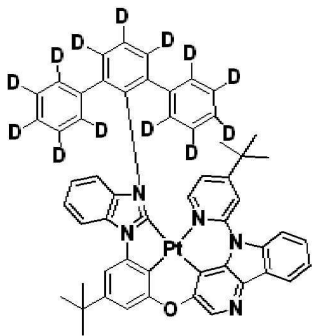
94



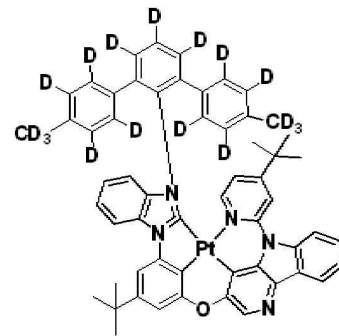
95



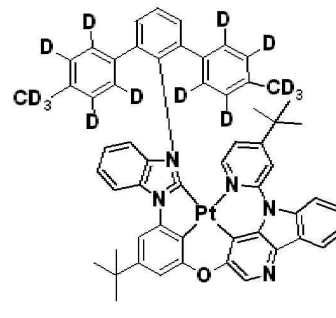
96



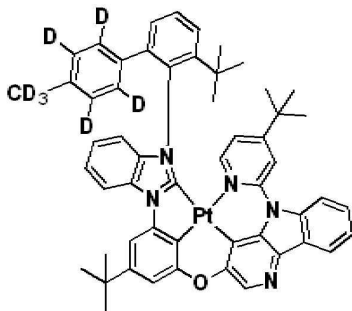
97



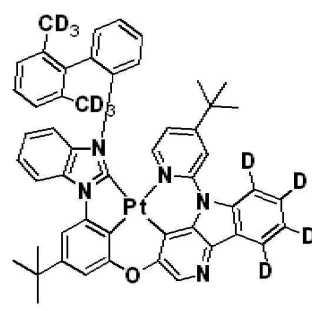
98



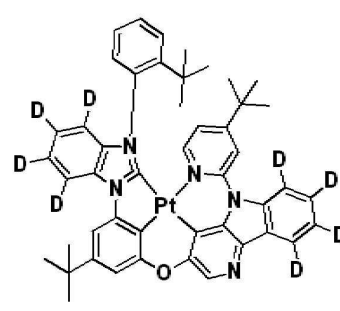
99



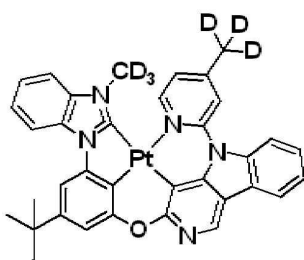
100



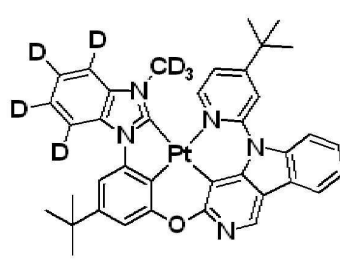
101



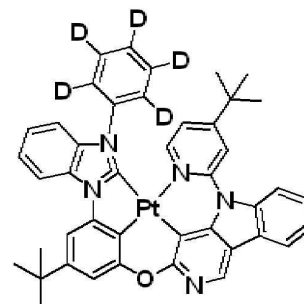
102



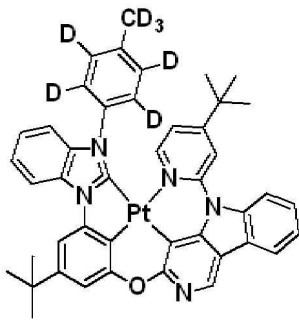
103



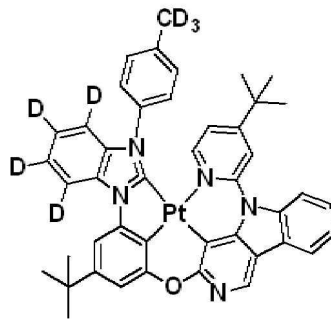
104



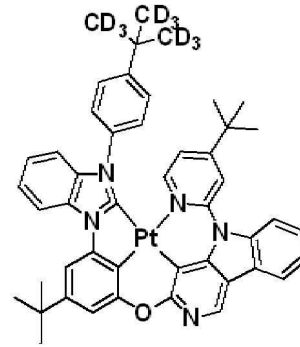
105



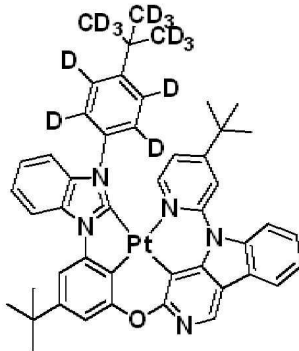
106



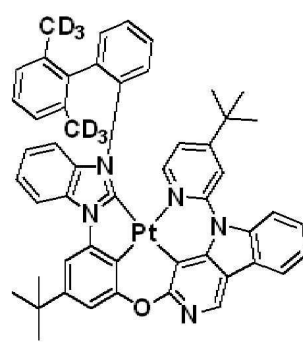
107



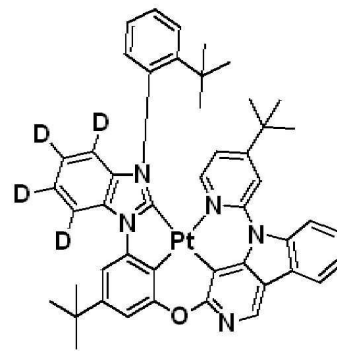
108



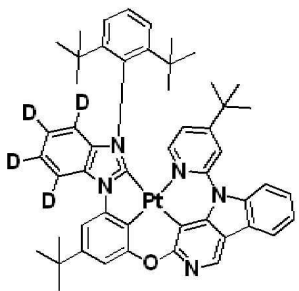
109



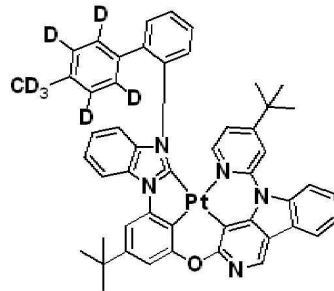
110



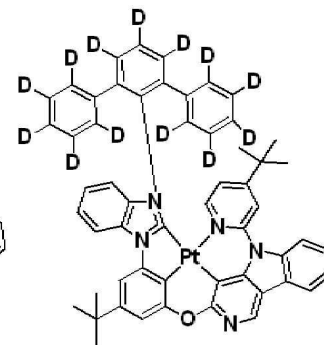
111



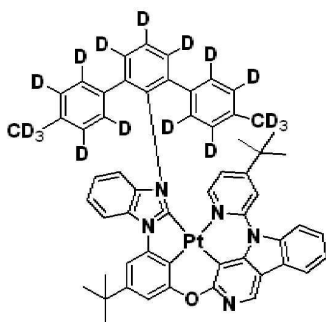
112



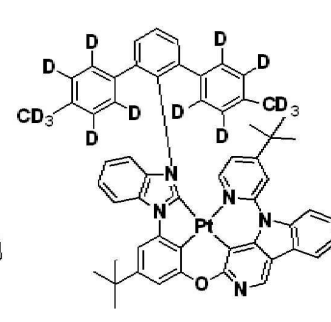
113



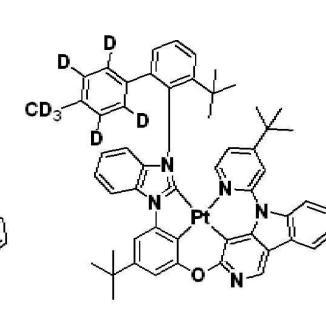
114



115

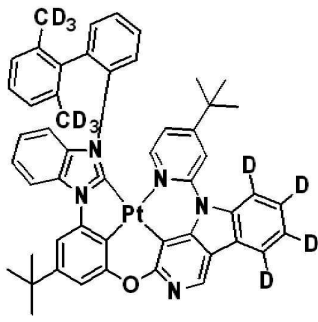


116

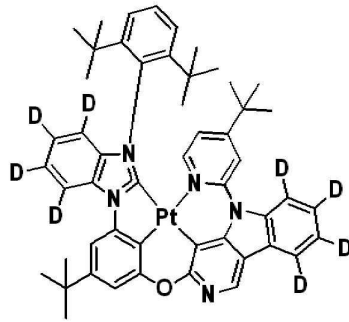


117

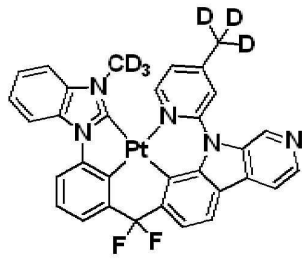




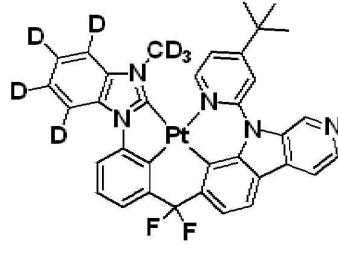
118



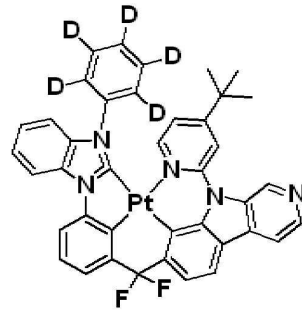
119



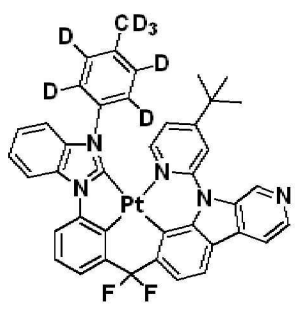
120



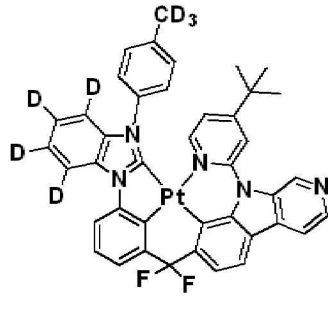
121



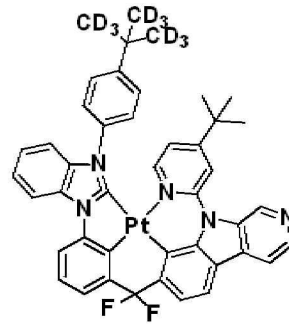
122



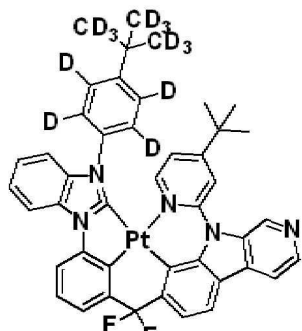
123



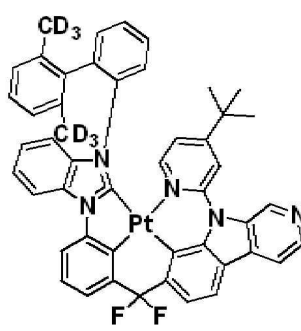
124



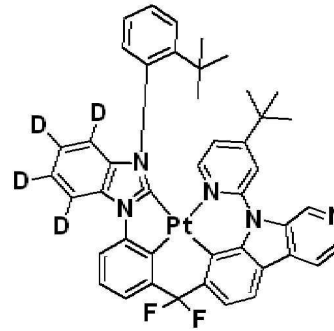
125



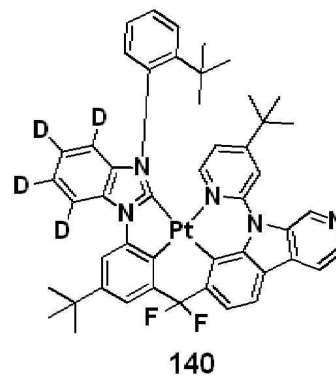
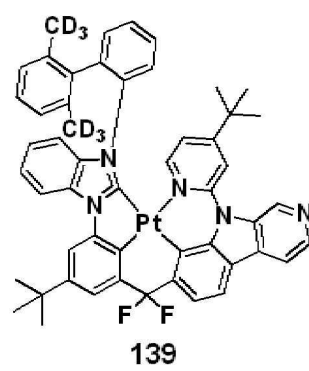
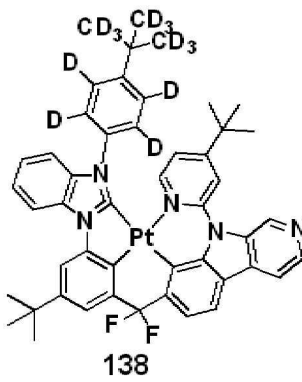
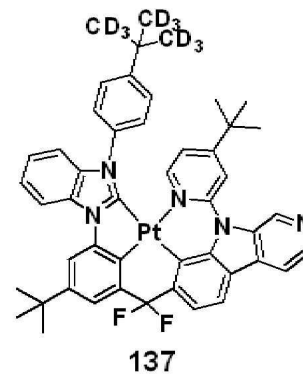
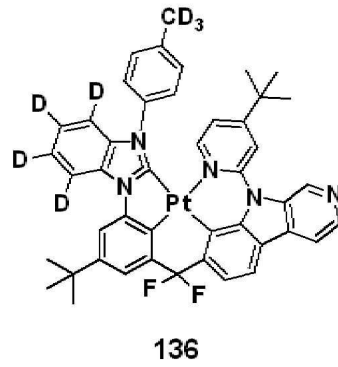
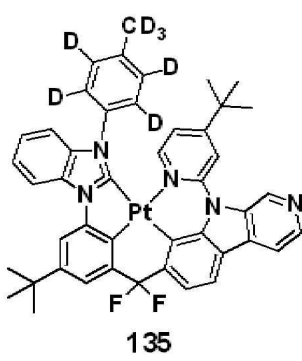
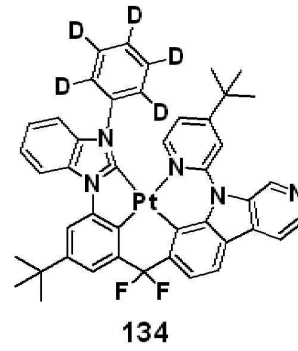
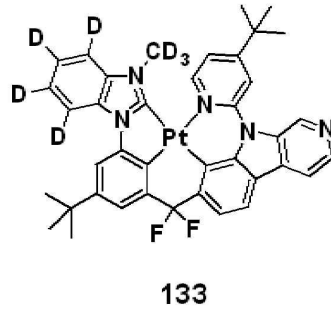
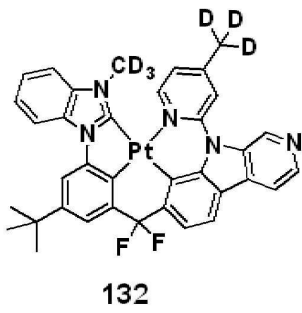
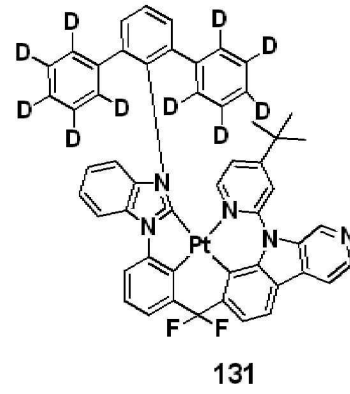
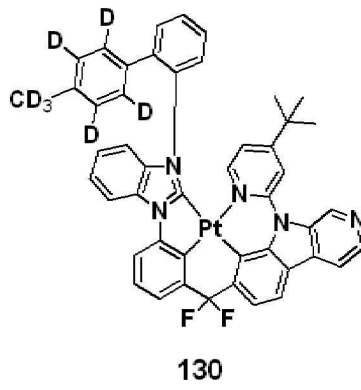
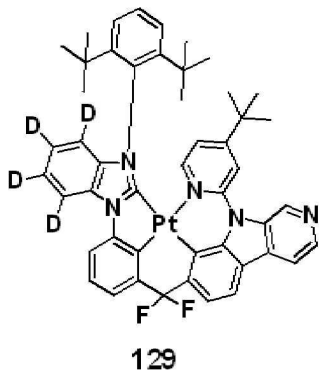
126

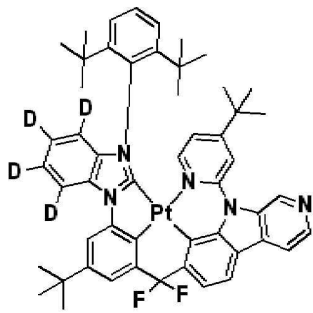


127

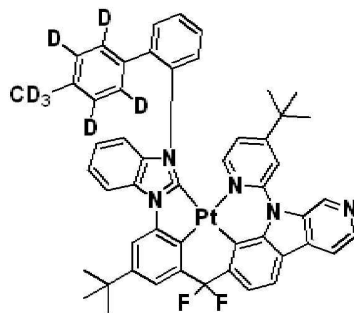


128

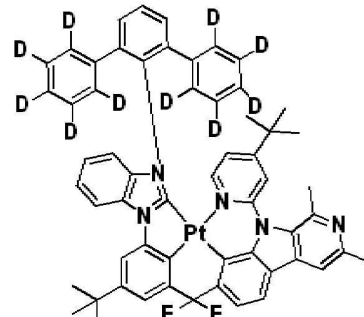




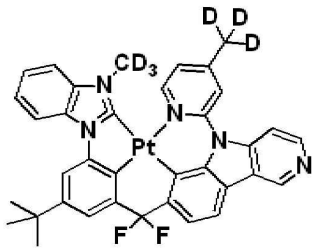
141



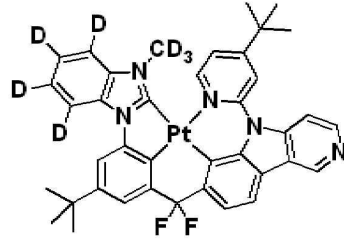
142



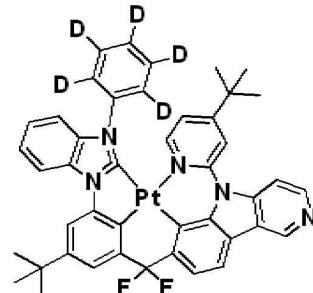
143



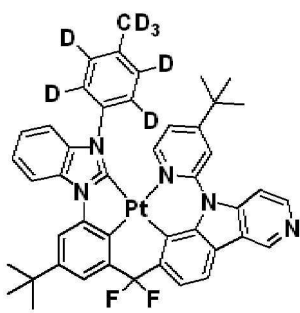
144



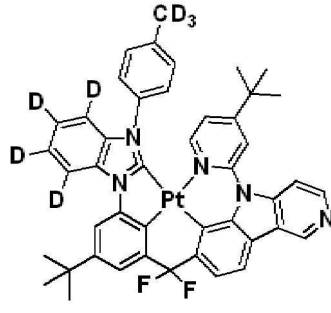
145



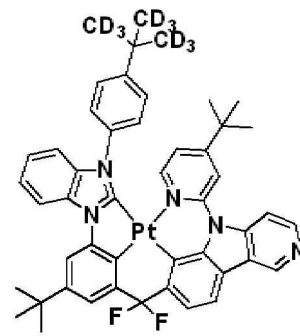
146



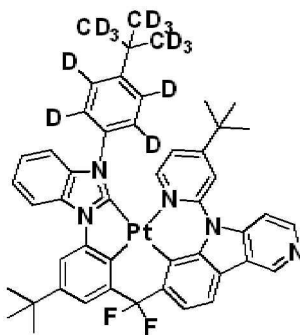
147



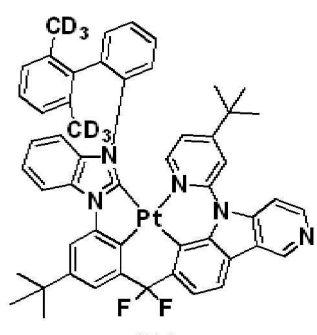
148



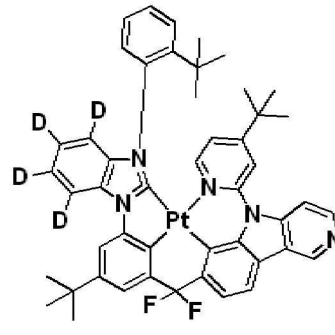
149



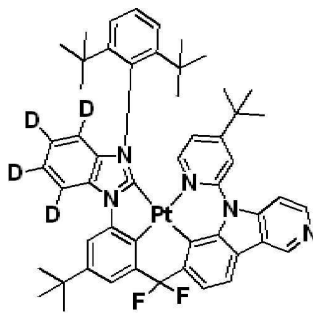
150



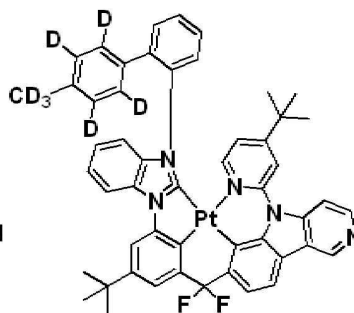
151



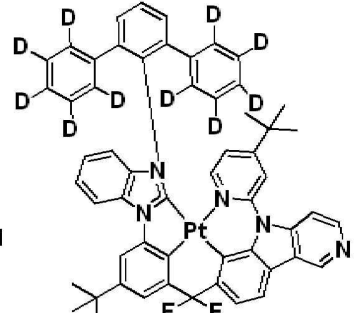
152



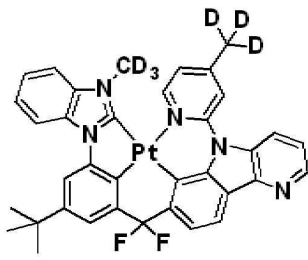
153



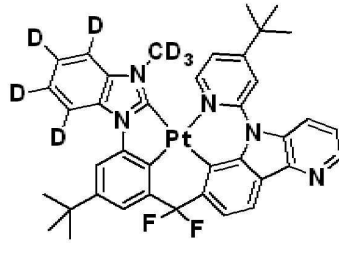
154



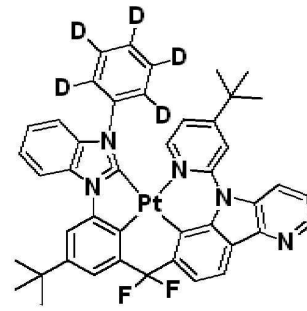
155



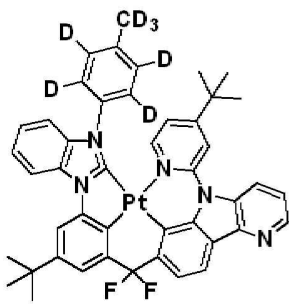
156



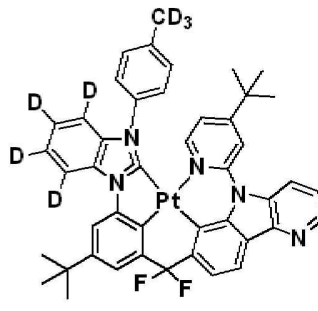
157



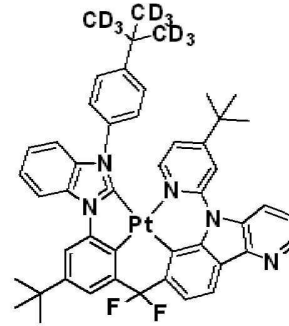
158



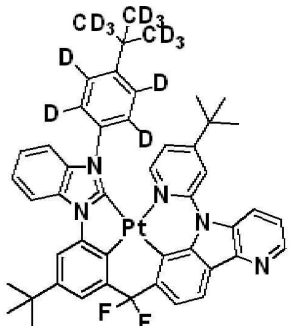
159



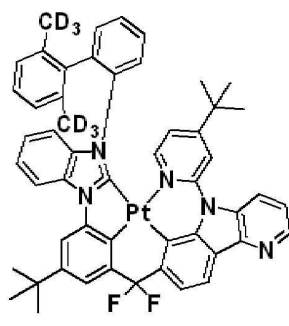
160



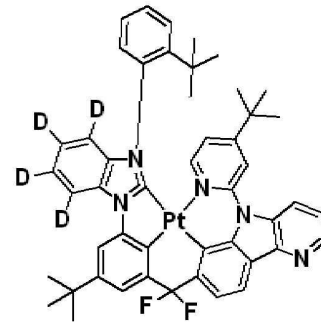
161



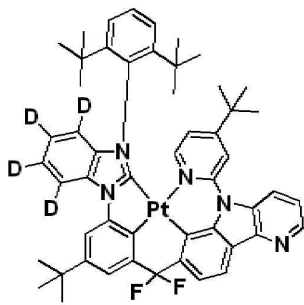
162



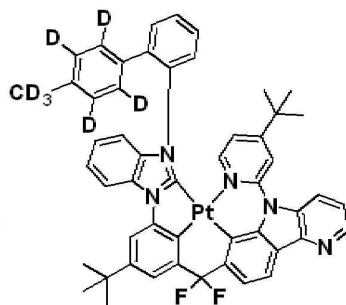
163



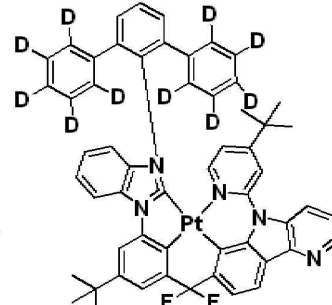
164



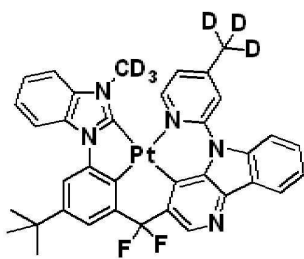
165



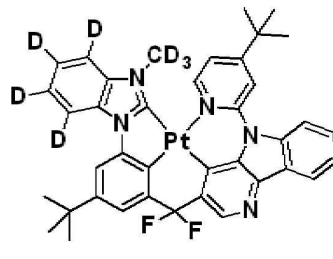
166



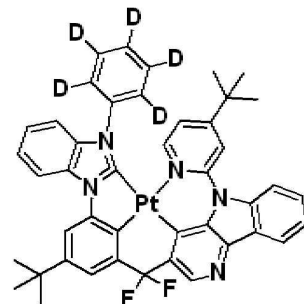
167



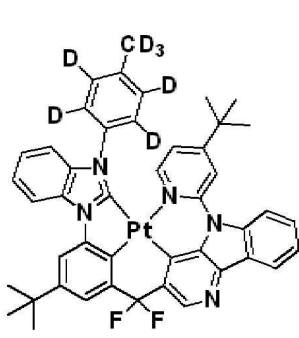
168



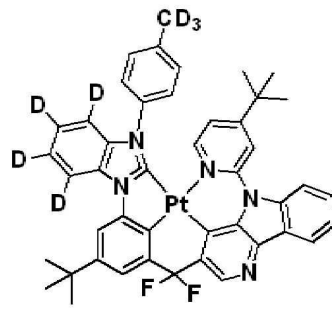
169



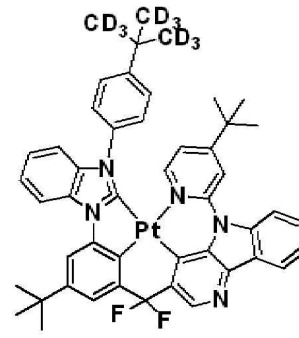
170



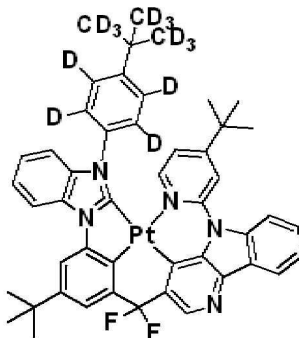
171



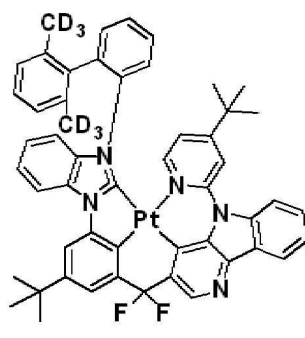
172



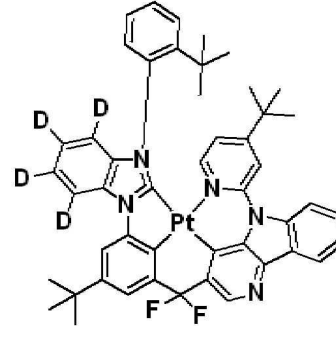
173



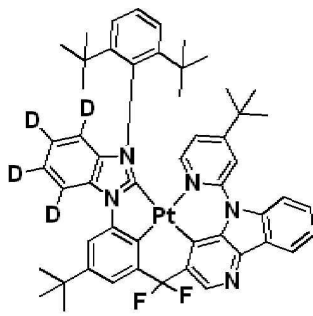
174



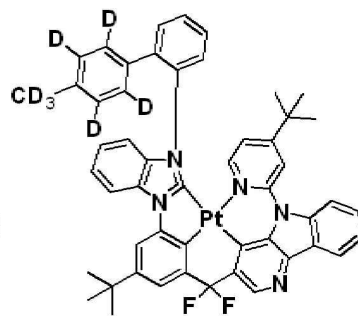
175



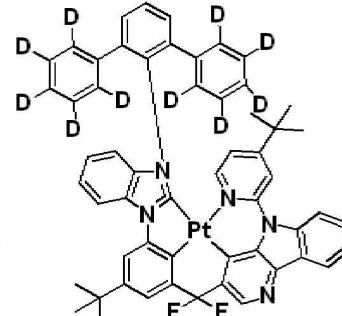
176



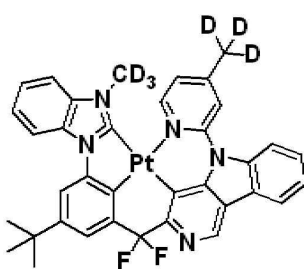
177



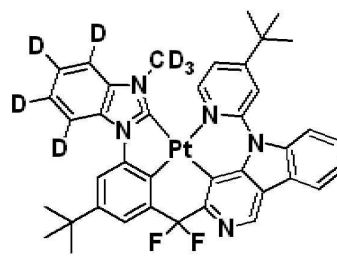
178



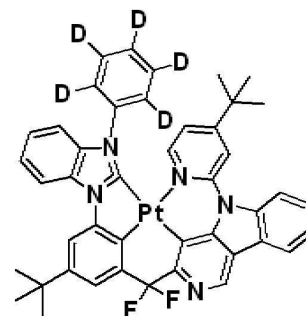
179



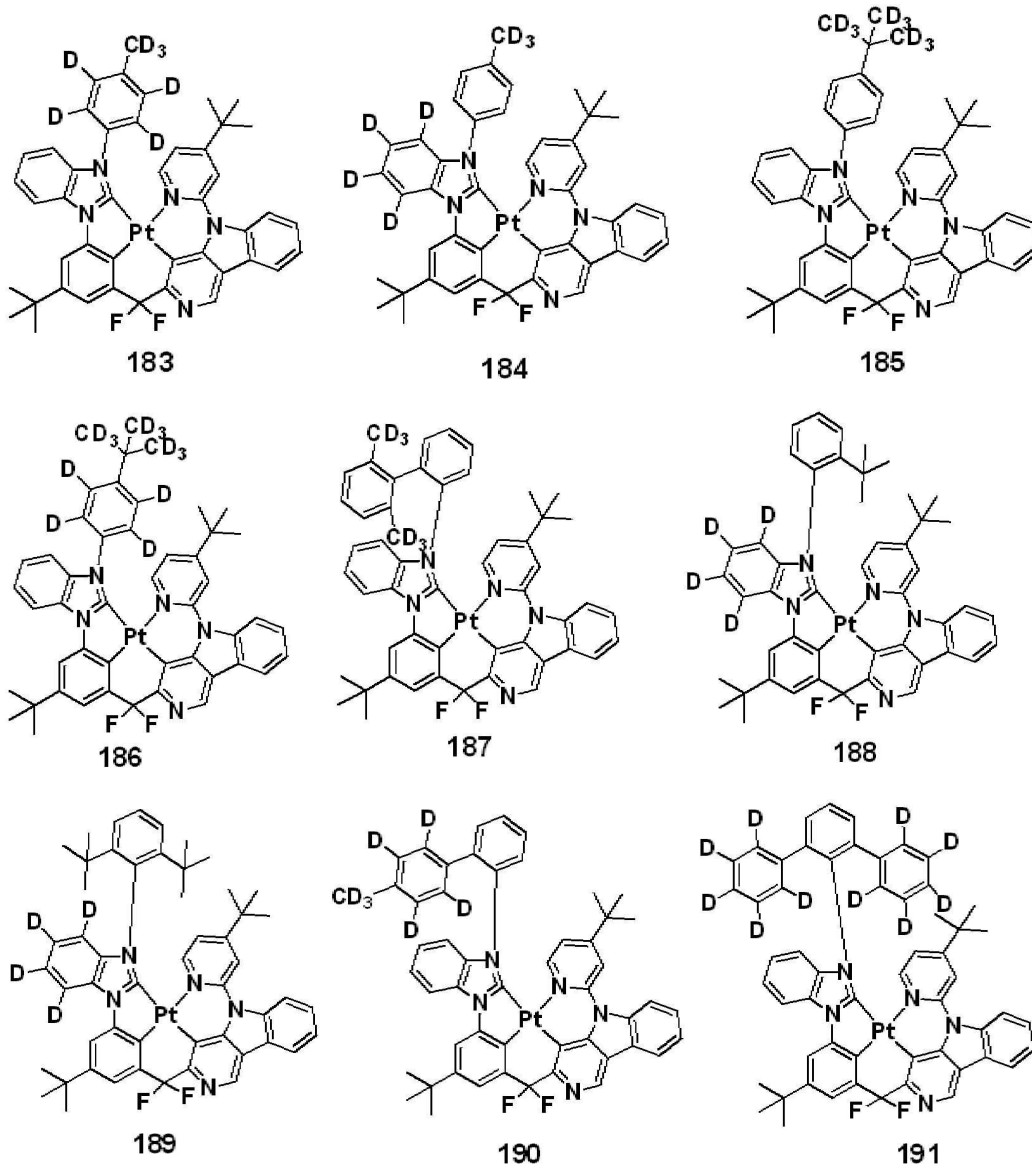
180



181



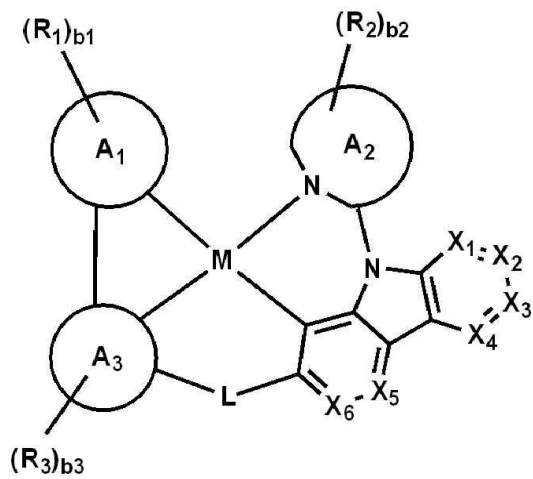
182



청구항 12

하기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

M은 전이 금속이고,

$X_1$  내지  $X_6$  중 선택되는 하나 또는 둘이 N이고, 나머지는 CR<sub>i</sub>이고,

$X_1$ 이 N인 경우,  $X_2$  내지  $X_6$  중 어느 하나는 N이고,

R<sub>i</sub>는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이고,

A<sub>1</sub> 내지 A<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 1 이상 60 이하의 헤테로 고리이고,

b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 1 이상 4 이하의 정수이고,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 중수소 원자를 포함하고, 나머지는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 60 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 60 이하의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 60 이하의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 60 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 1 이상 10 이하의 헤테로 고리기이고,

L은 직접 결합, O, S, -CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>-, -CR<sub>13</sub>=CR<sub>14</sub>-, -C≡C-, -C(=O)-, -C(=S)-, -BR<sub>15</sub>-, -NR<sub>16</sub>-, -PR<sub>17</sub>R<sub>18</sub>-, 또는 -GeR<sub>19</sub>R<sub>20</sub>- 이고,

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>20</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 30 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

### 청구항 13

제 12항에 있어서,

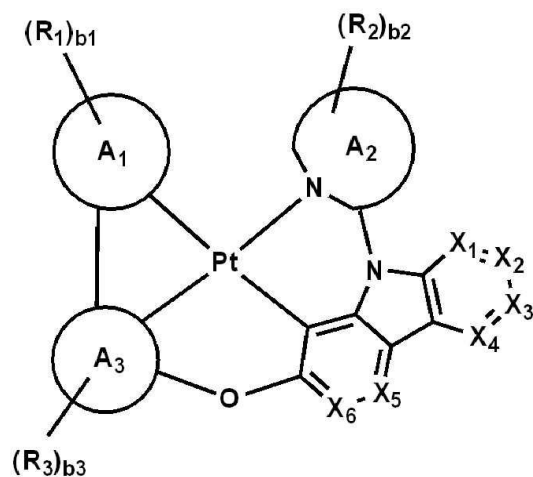
상기 M은 Pt, Pd, Cu, 또는 Os인 유기 금속 화합물.

### 청구항 14

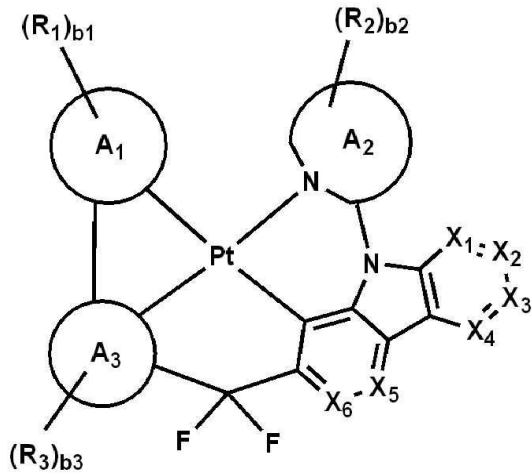
제 12항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서,

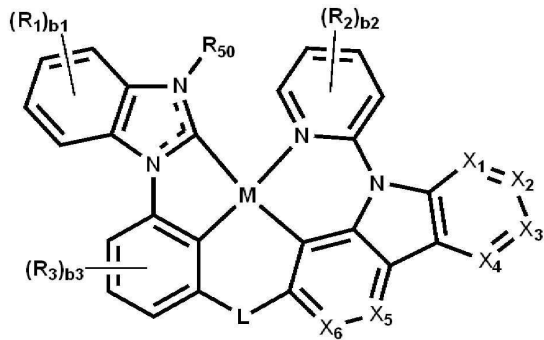
A<sub>1</sub> 내지 A<sub>3</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 15**

제 12항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시되는 유기 금속 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서

R<sub>50</sub>은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 30 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,

M, L, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

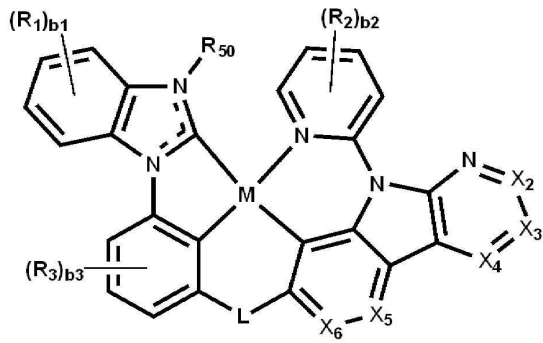
**청구항 16**

제 15항에 있어서,

상기 화학식 3은 하기 화학식 3-1로 표시되는 유기 금속 화합물:



[화학식 3-1]



상기 화학식 3-1에서

$X_2$  내지  $X_6$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는  $CR_4$ 이고,

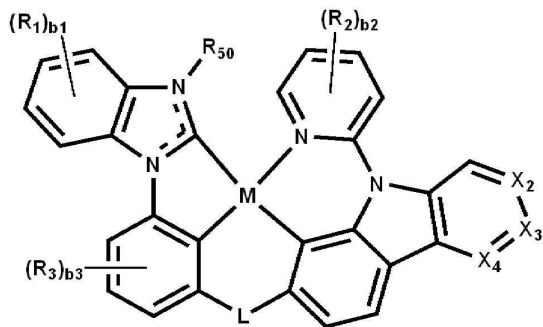
M, L,  $R_1$  내지  $R_4$ ,  $R_{50}$  및  $b_1$  내지  $b_3$ 은 상기 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 17**

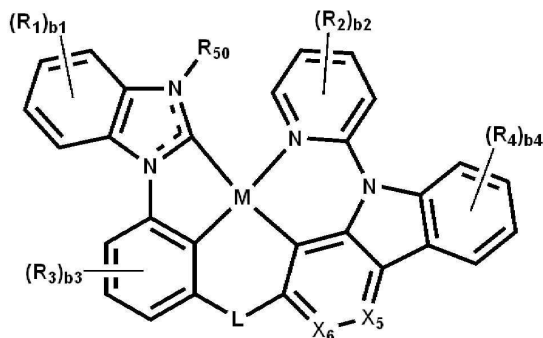
제 15항에 있어서,

상기 화학식 3은 하기 화학식 3-2 또는 화학식 3-3으로 표시되는 유기 금속 화합물:

[화학식 3-2]



[화학식 3-3]



상기 화학식 3-2에서,

$X_2$  내지  $X_4$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는  $CR_4$ 이고,

상기 화학식 3-3에서,

$X_5$  및  $X_6$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는  $CR_6$ 이고,

$b_4$ 는 1 이상 4 이하의 정수이고,

R<sub>5</sub>는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이고,

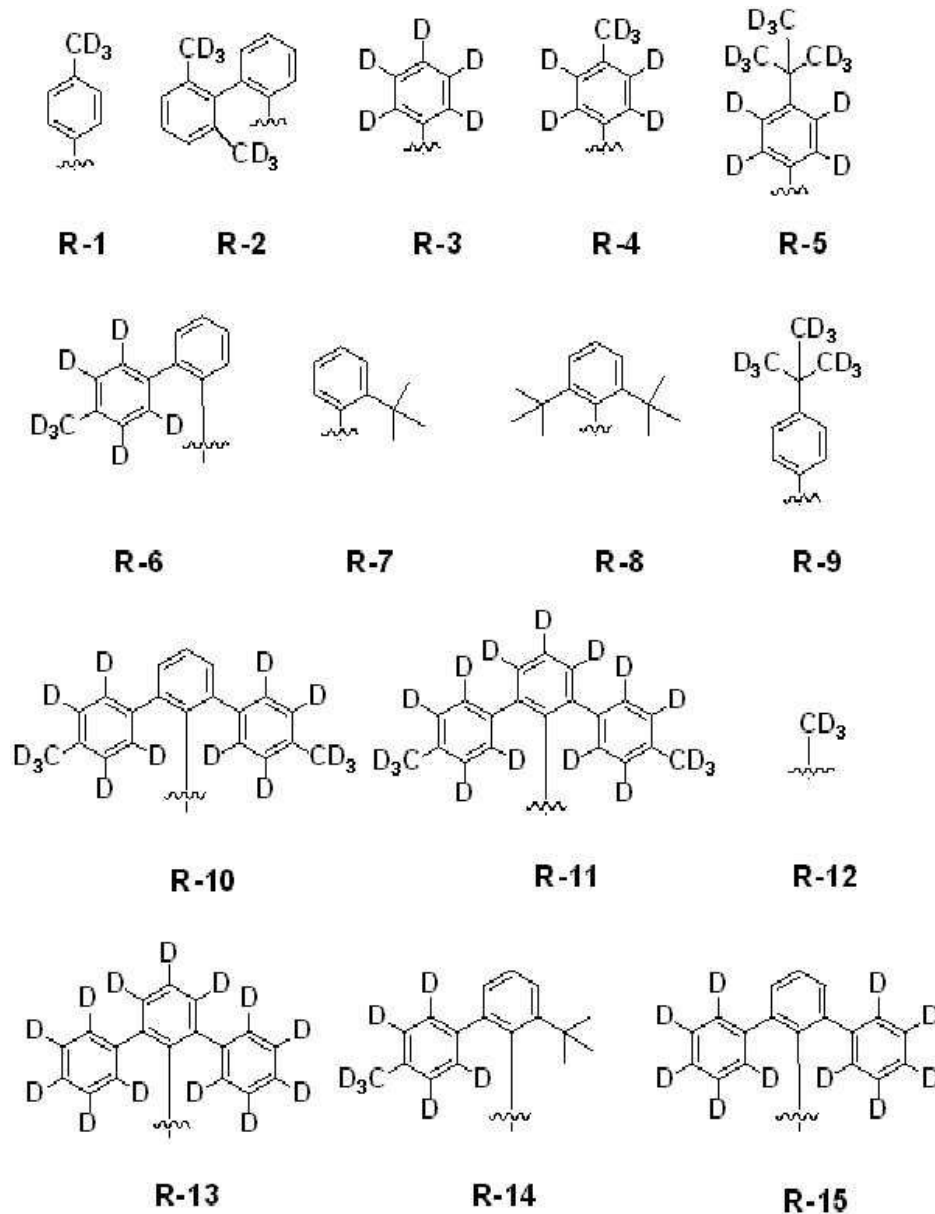
M, L, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>, 및 R<sub>50</sub>은 상기 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 18**

제 15항에 있어서,

상기 R<sub>50</sub>은 하기 화합물군 R의 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 유기 금속 화합물:

[화합물군 R]



**청구항 19**

제 18항에 있어서,

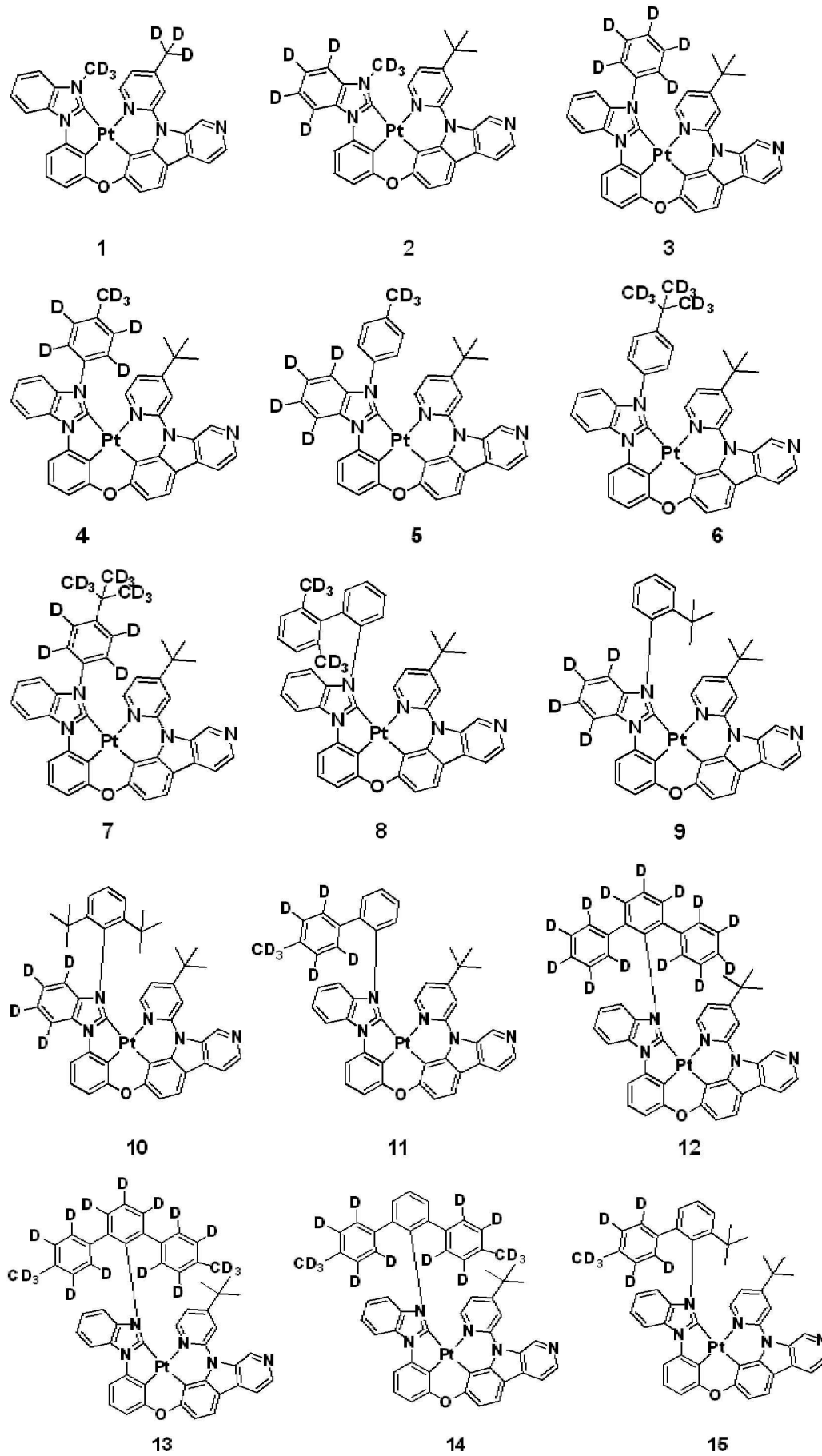
상기 R<sub>50</sub>이 화합물 R-7 또는 R-8인 경우, R<sub>1</sub>은 적어도 하나의 중수소 원자를 포함하는 유기 금속 화합물.

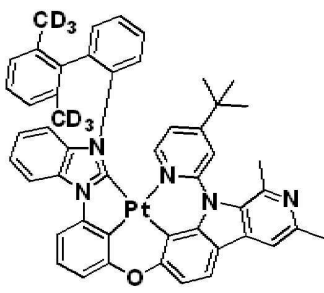
**청구항 20**

제 12항에 있어서,

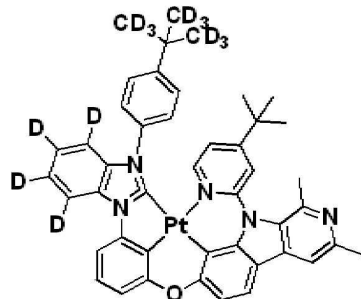
상기 화학식 1은 하기 화합물군 1의 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 유기 금속 화합물:

[화합물군 1]

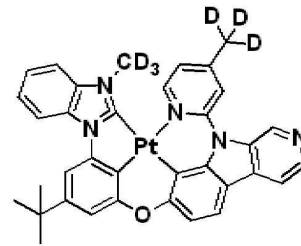




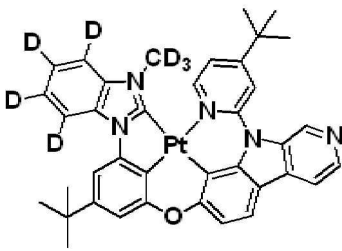
16



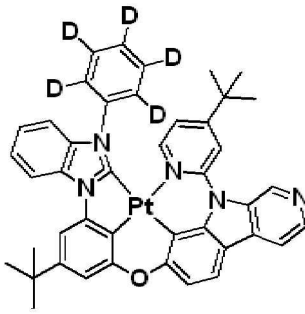
17



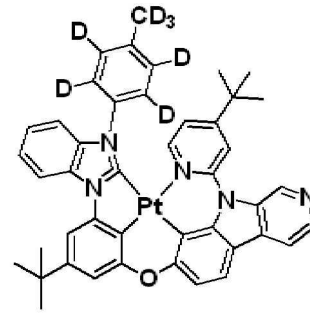
18



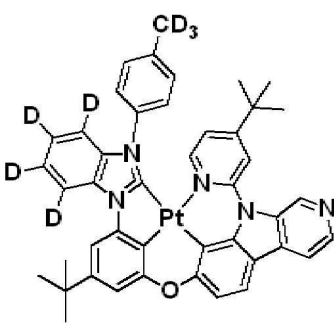
19



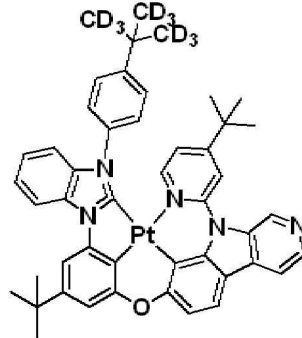
20



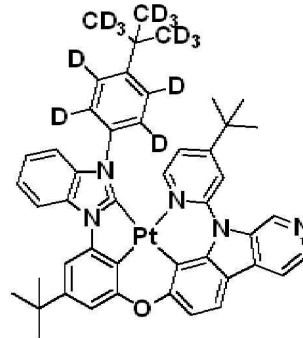
21



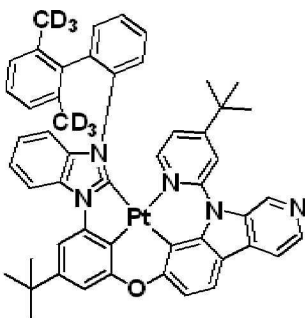
22



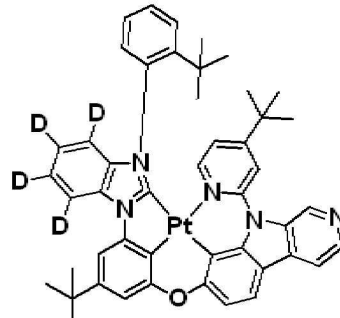
23



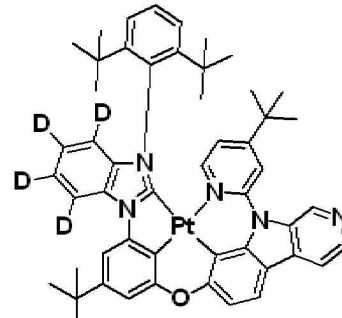
24



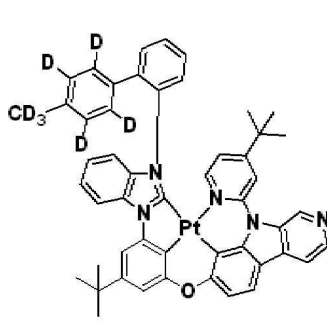
25



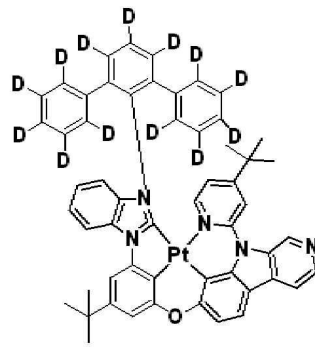
26



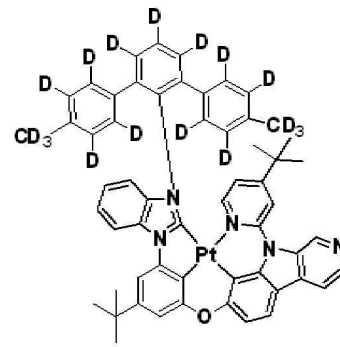
27



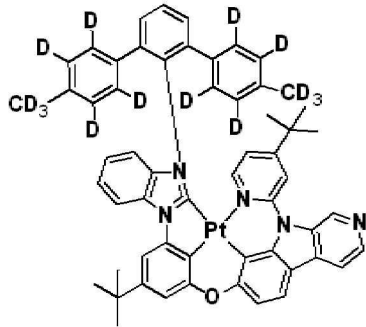
28



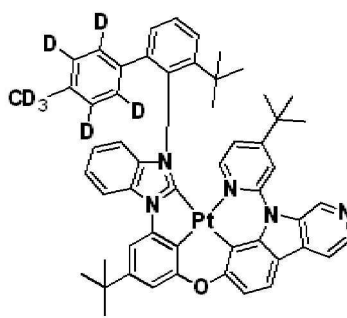
29



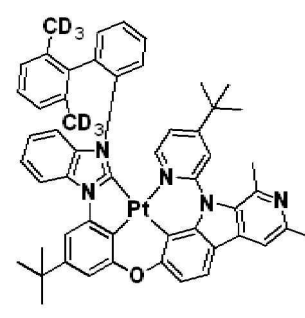
30



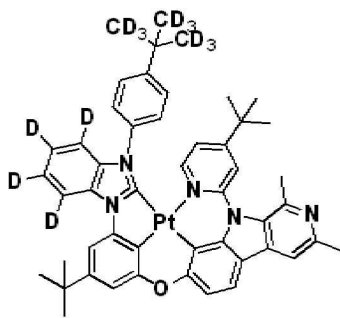
31



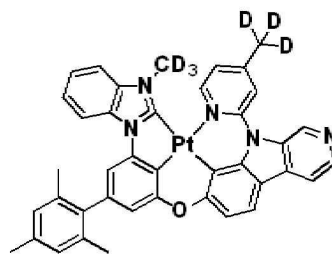
32



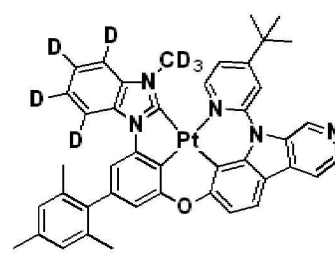
33



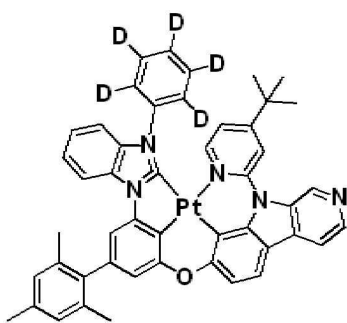
34



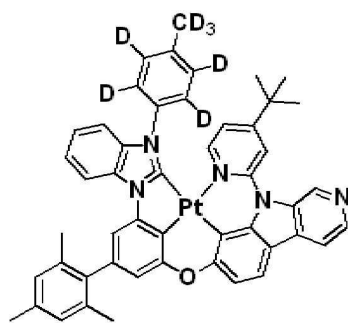
35



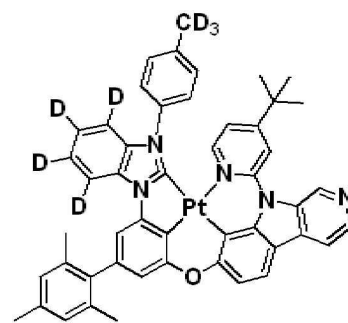
36



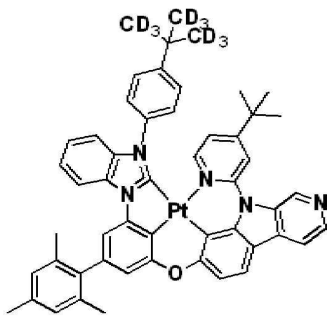
37



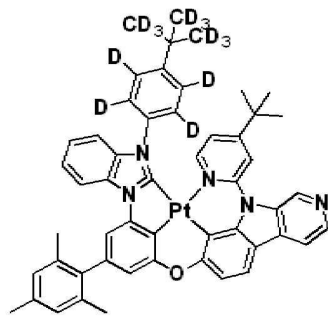
38



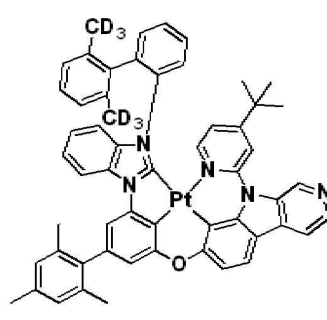
39



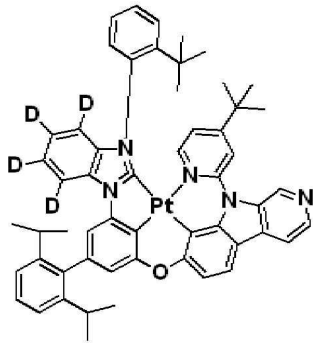
40



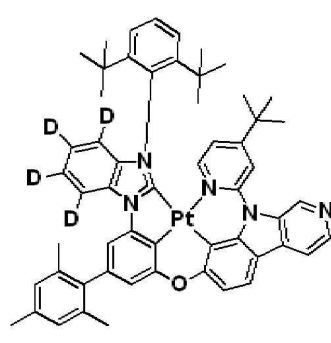
41



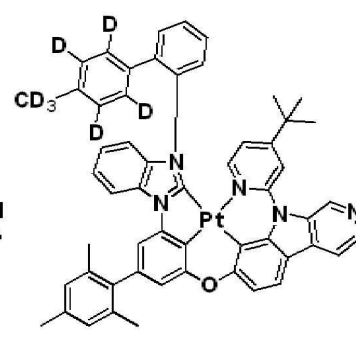
42



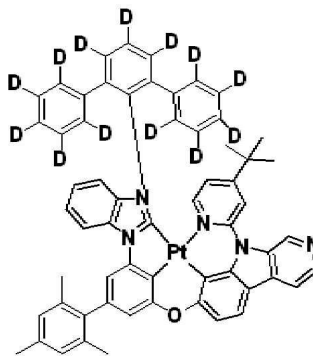
43



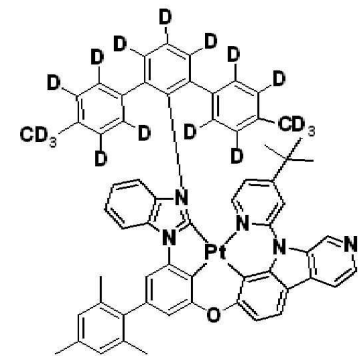
44



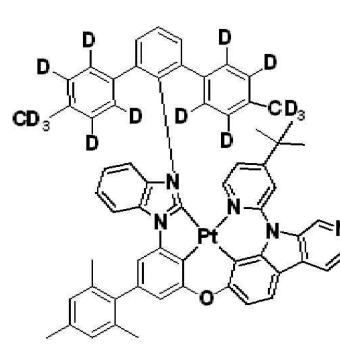
45



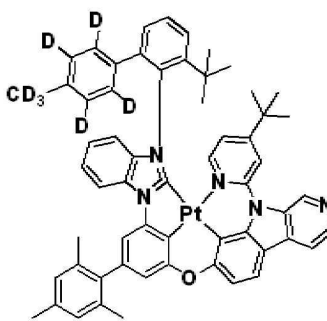
46



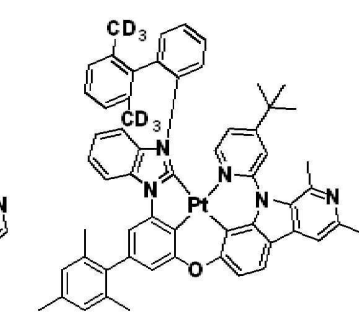
47



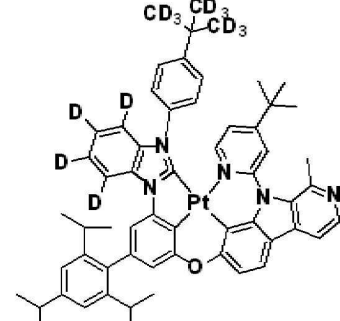
48



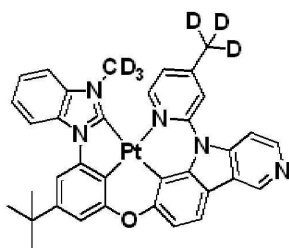
49



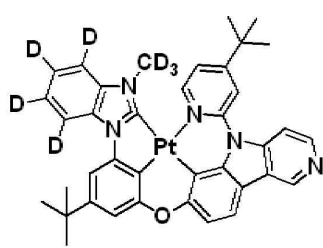
50



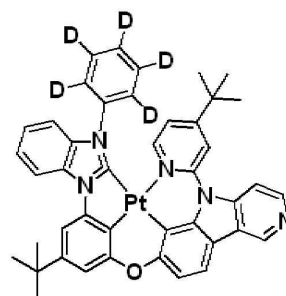
51



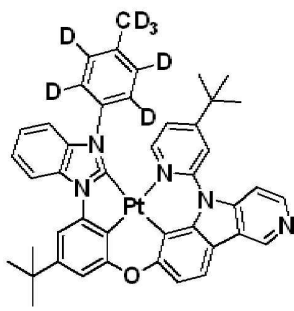
52



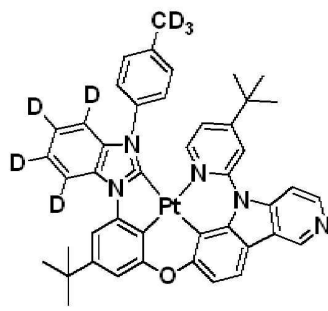
53



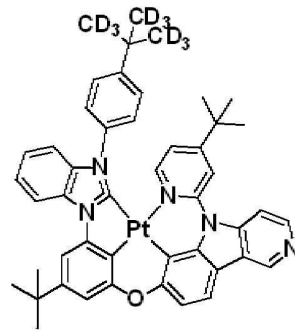
54



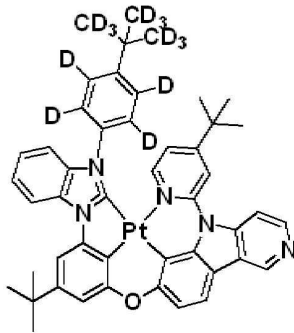
55



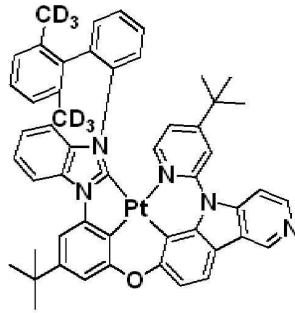
56



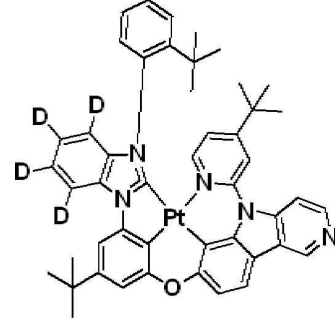
57



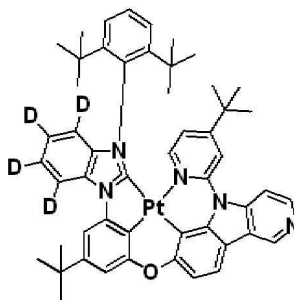
58



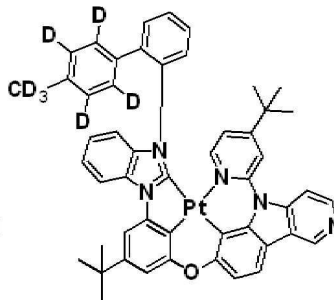
59



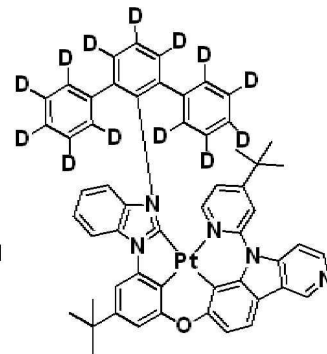
60



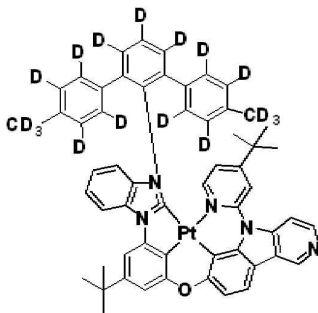
61



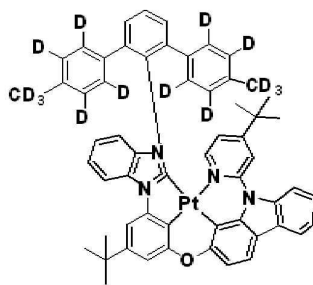
62



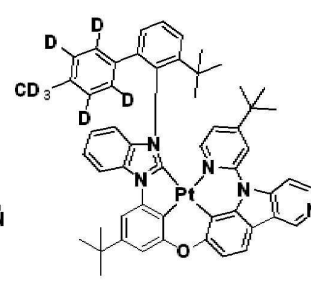
63



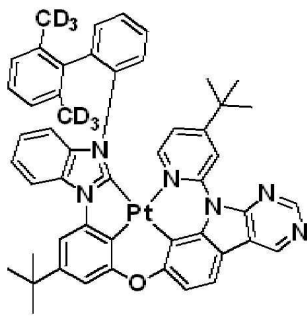
64



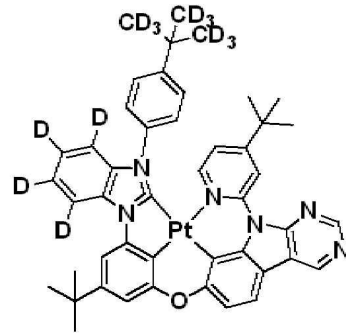
65



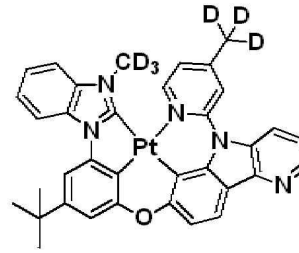
66



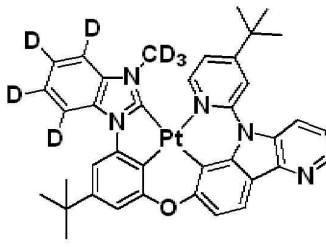
67



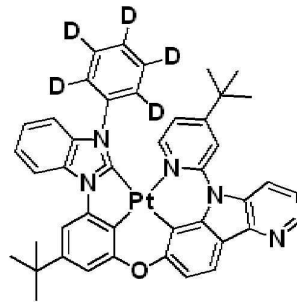
68



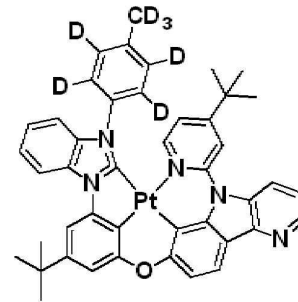
69



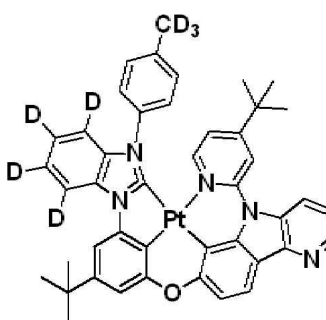
70



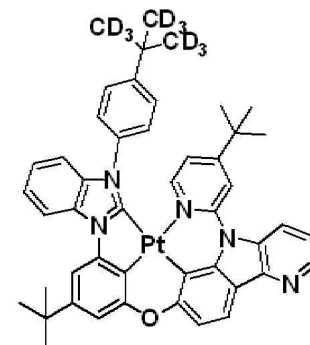
71



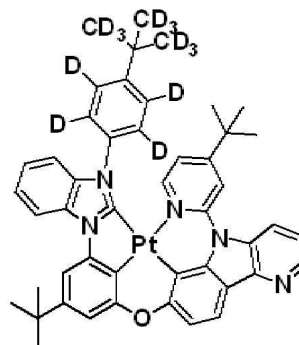
72



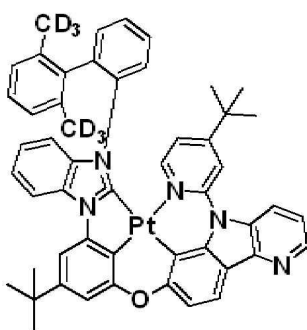
73



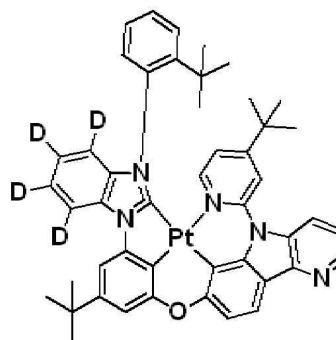
74



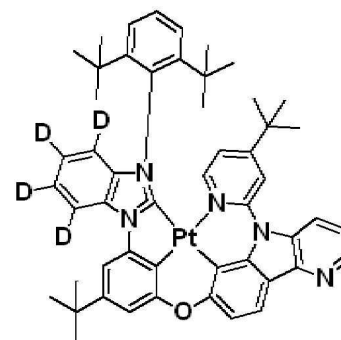
75



76

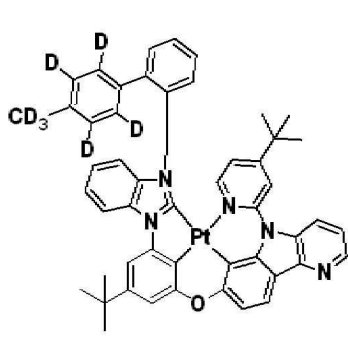


77

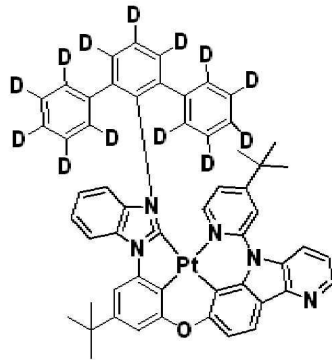


78

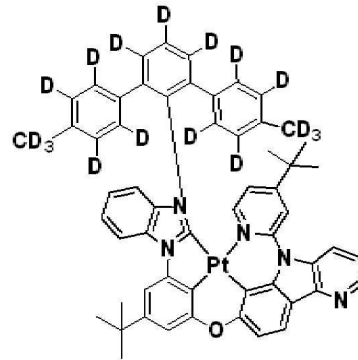




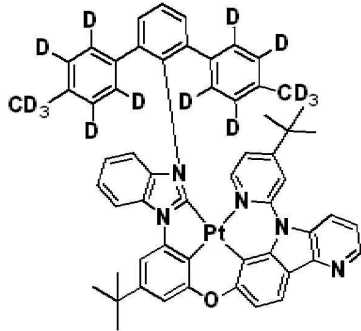
79



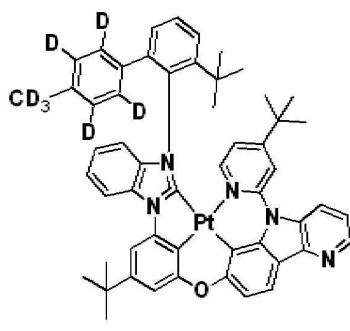
80



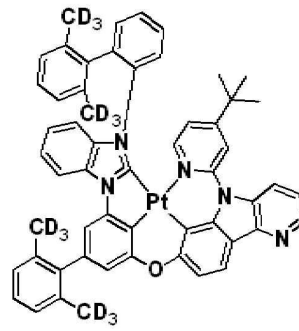
81



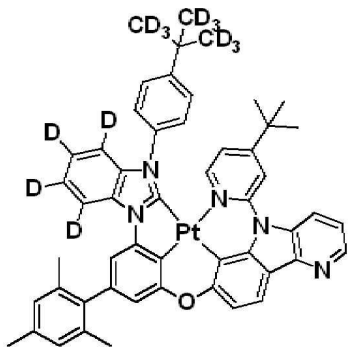
82



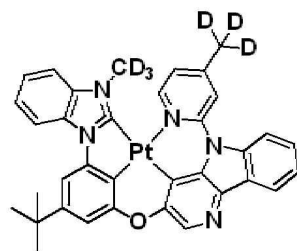
83



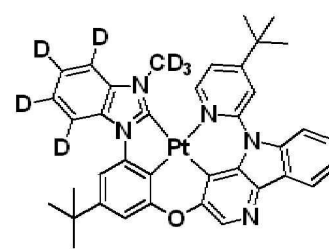
84



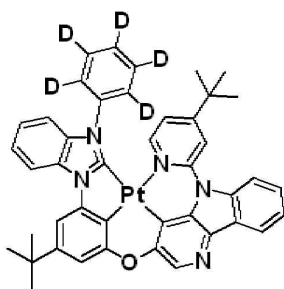
85



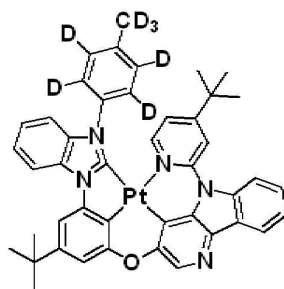
86



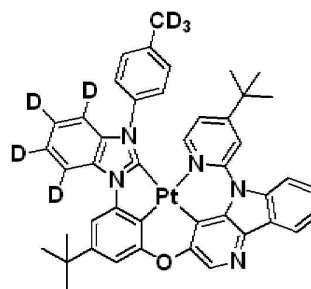
87



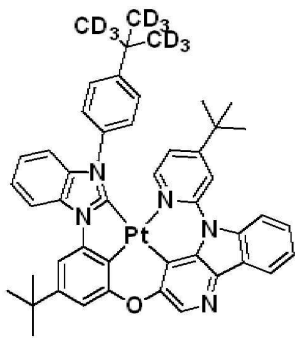
88



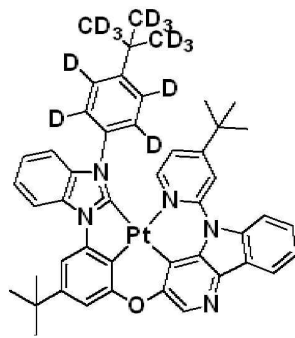
89



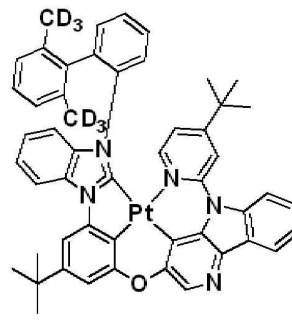
90



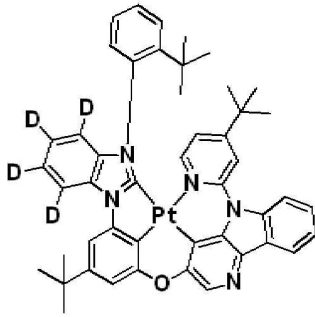
91



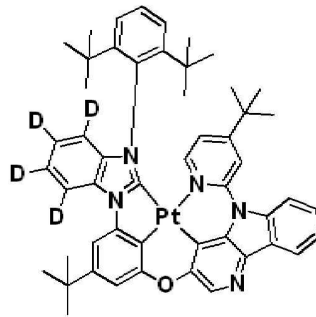
92



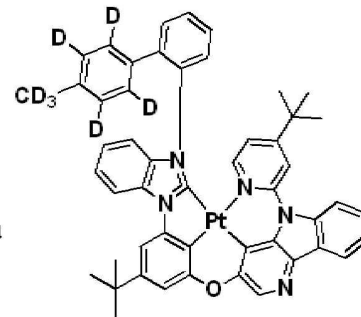
93



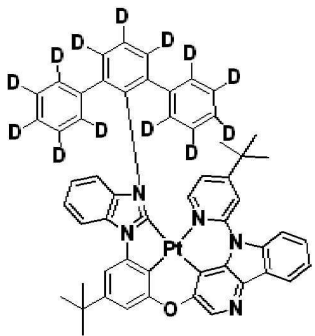
94



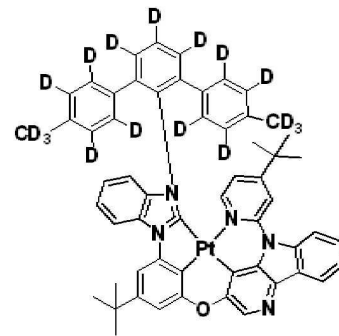
95



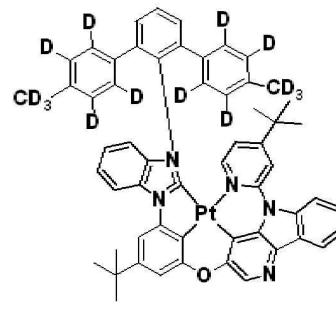
96



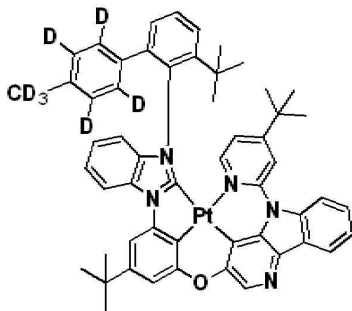
97



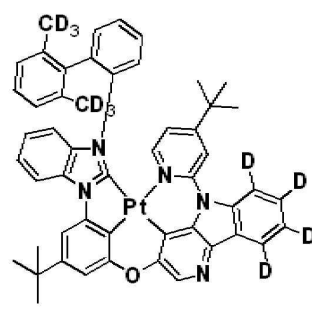
98



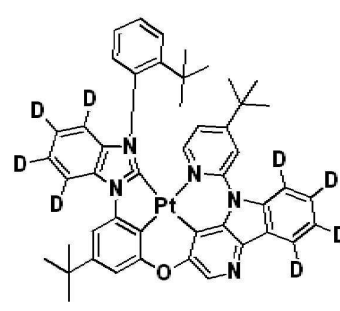
99



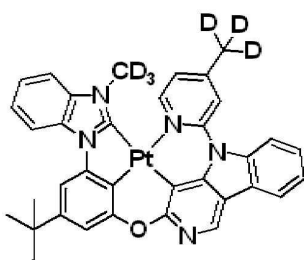
100



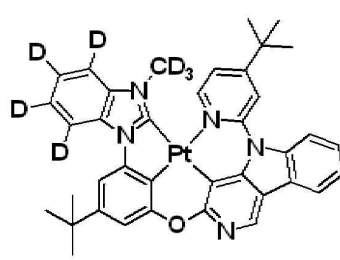
101



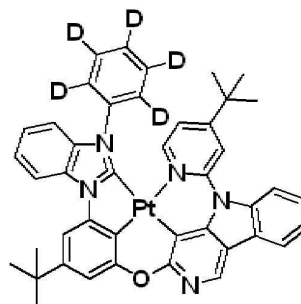
102



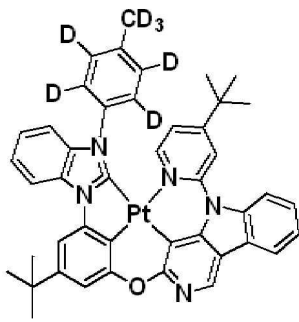
103



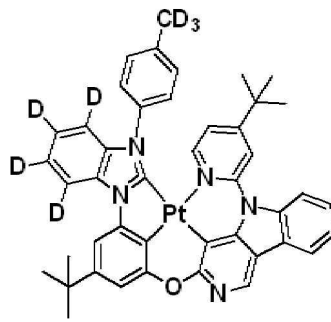
104



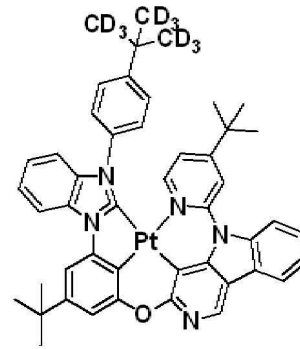
105



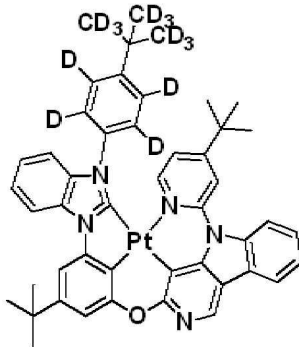
106



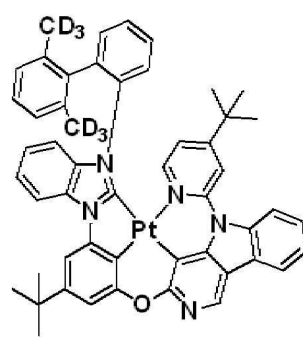
107



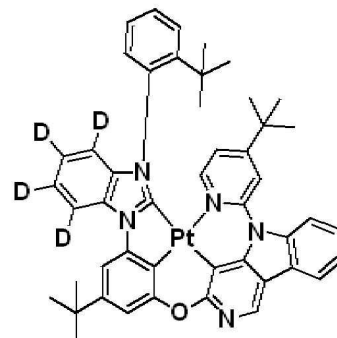
108



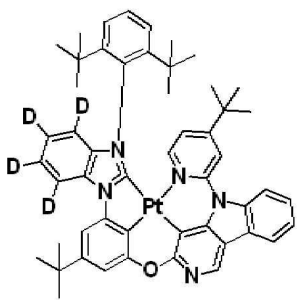
109



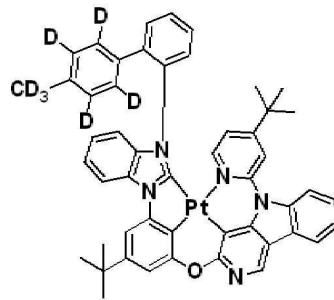
110



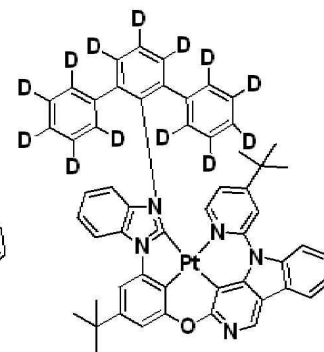
111



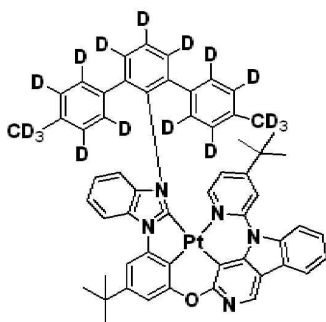
112



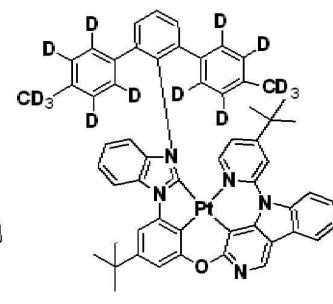
113



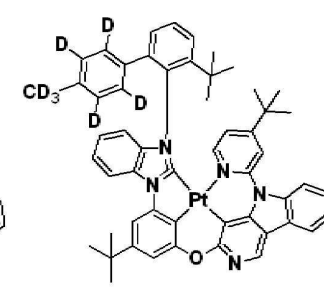
114



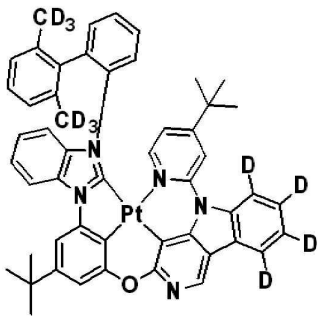
115



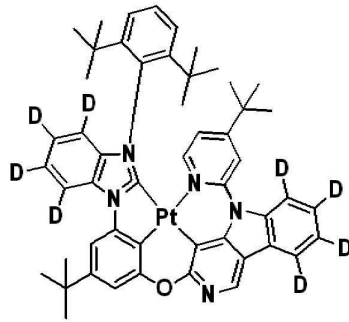
116



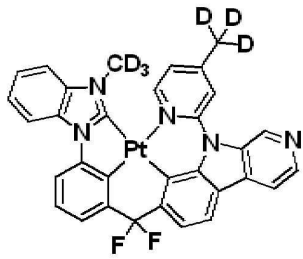
117



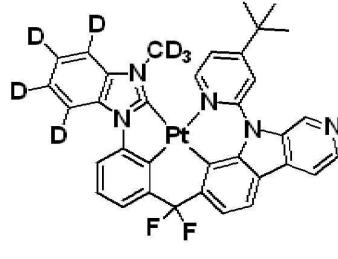
118



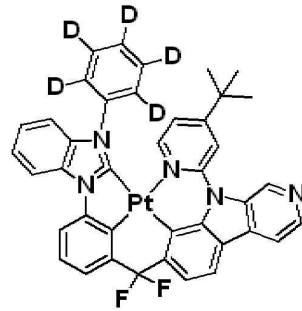
119



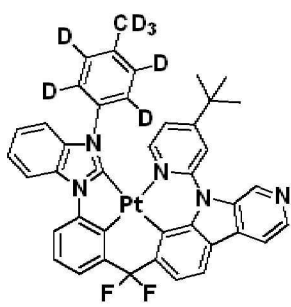
120



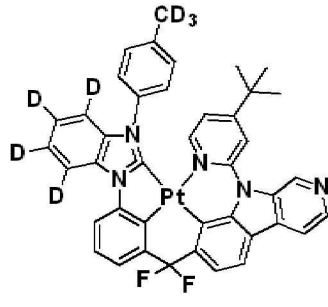
121



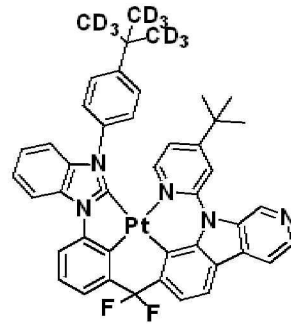
122



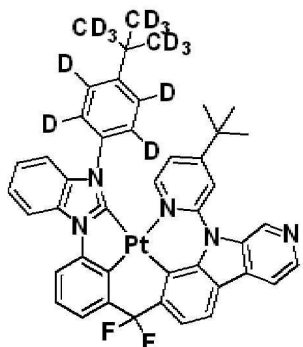
123



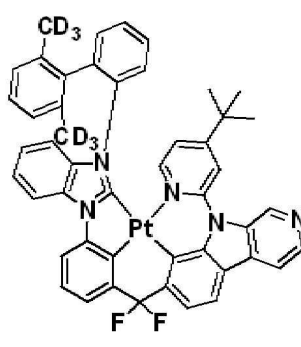
124



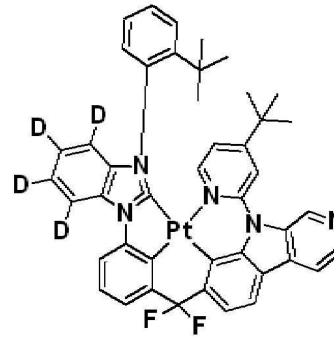
125



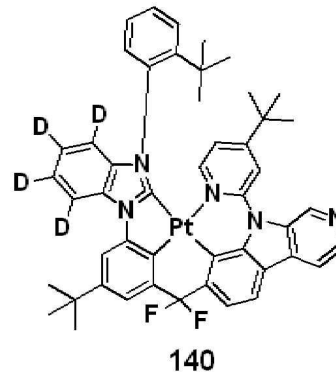
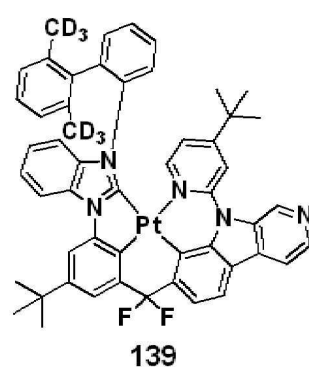
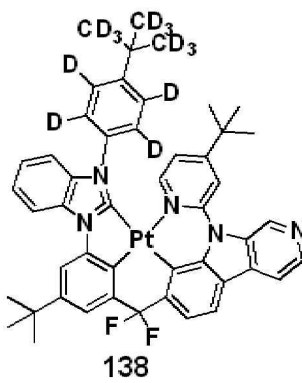
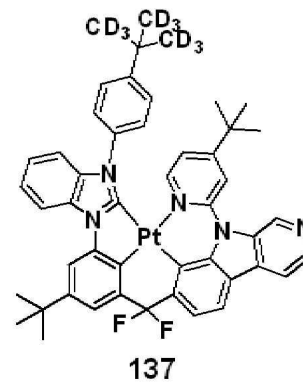
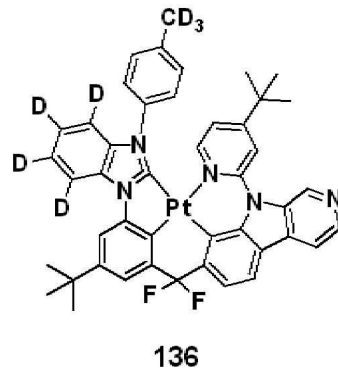
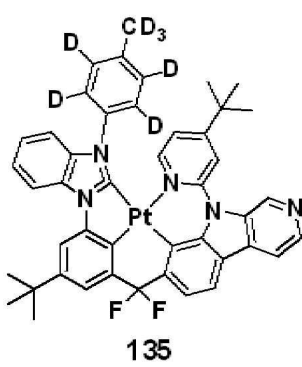
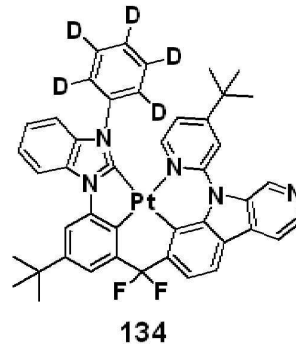
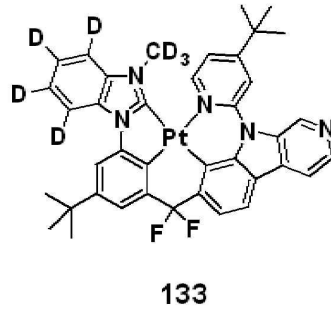
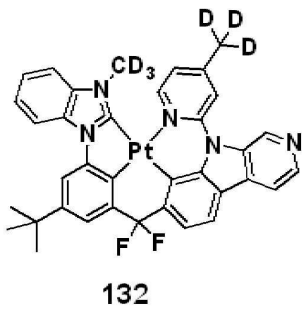
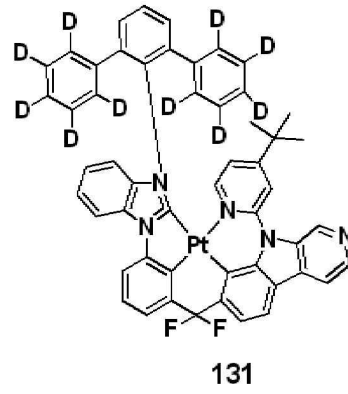
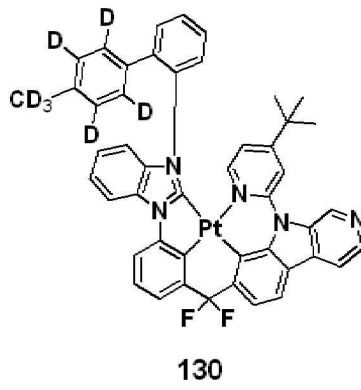
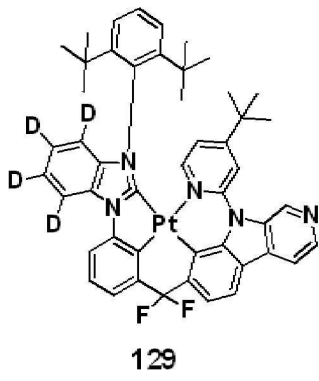
126

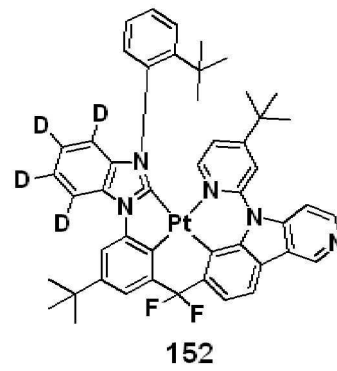
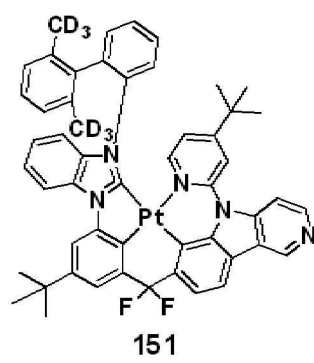
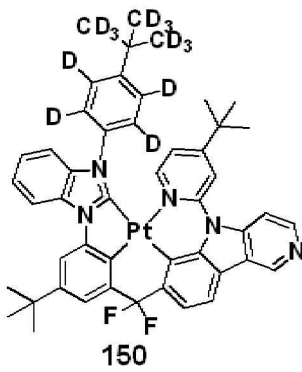
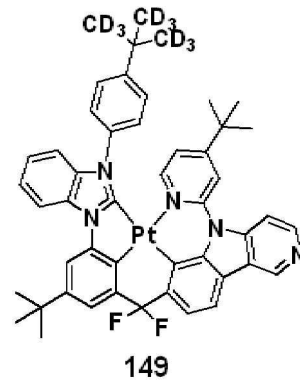
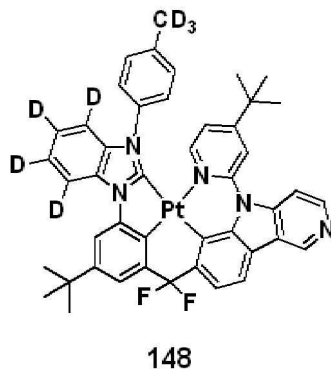
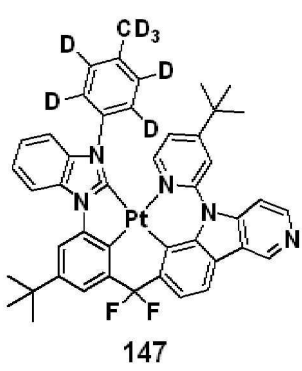
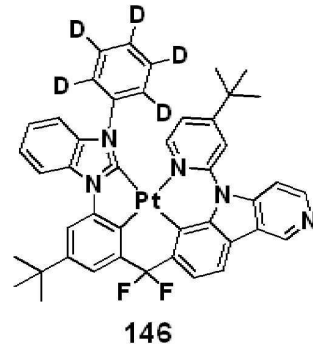
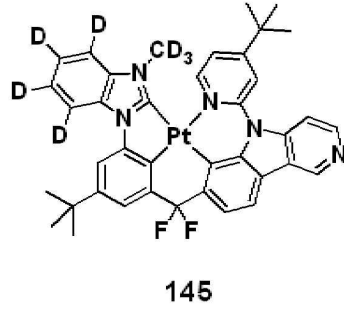
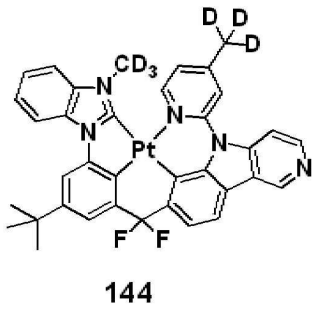
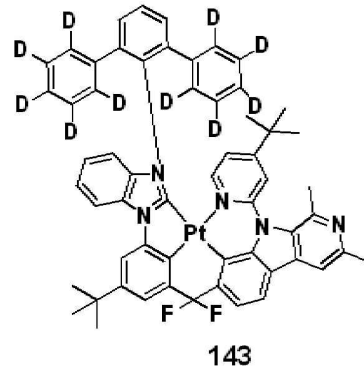
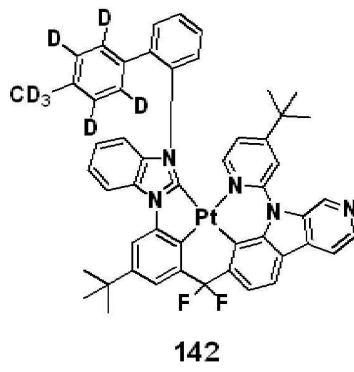
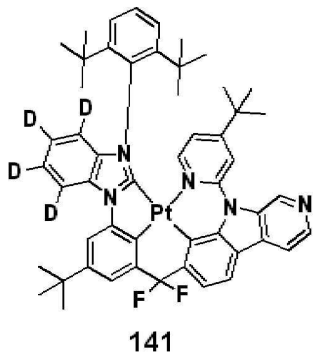


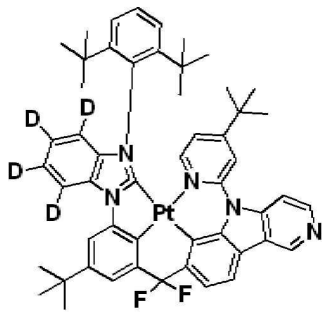
127



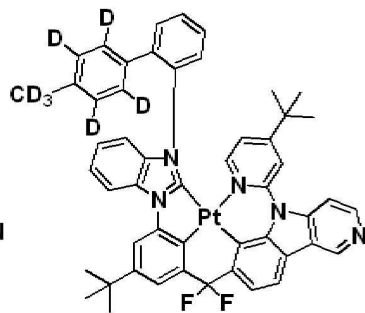
128



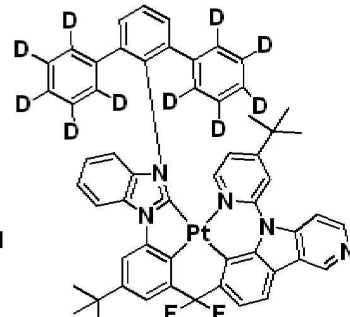




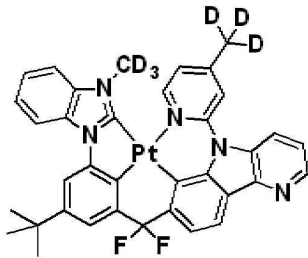
153



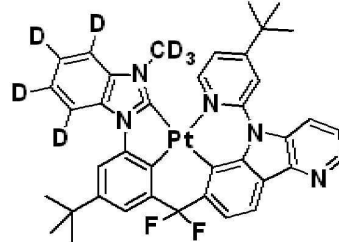
154



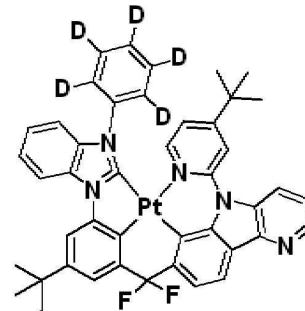
155



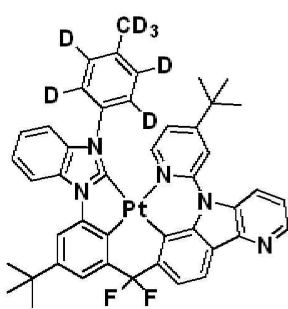
156



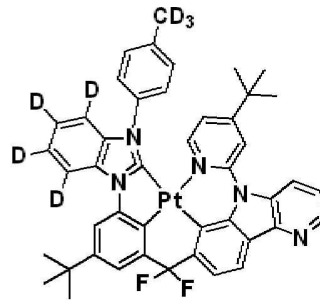
157



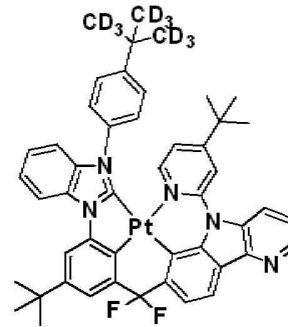
158



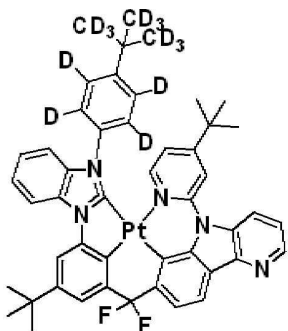
159



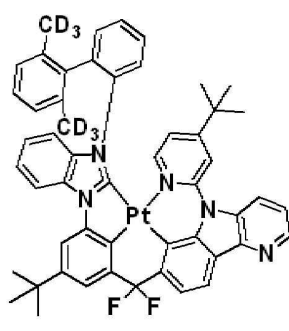
160



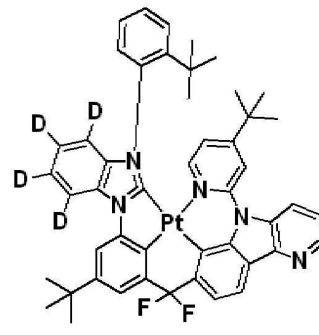
161



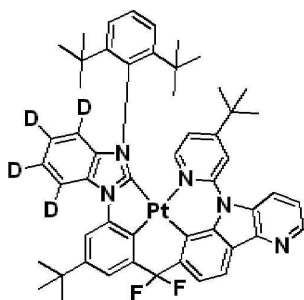
162



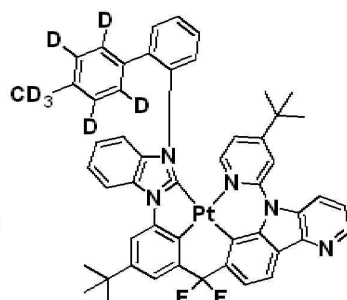
163



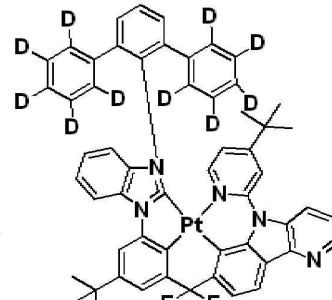
164



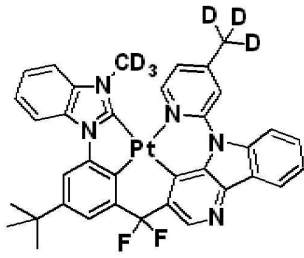
165



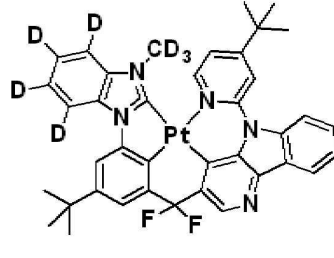
166



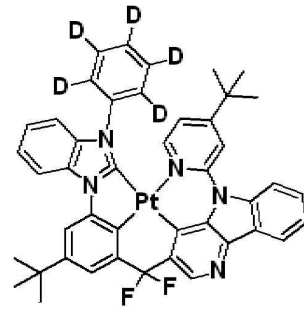
167



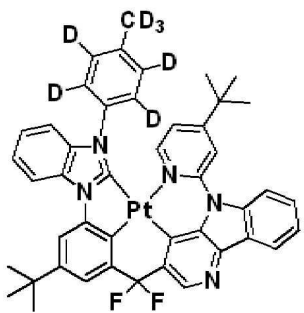
168



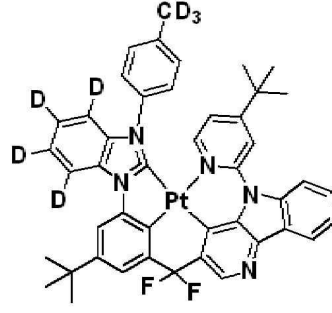
169



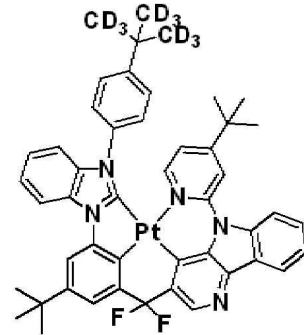
170



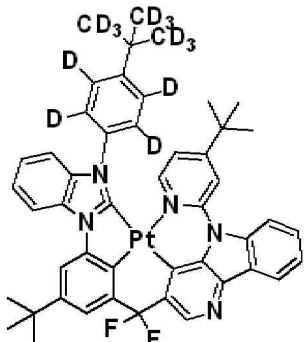
171



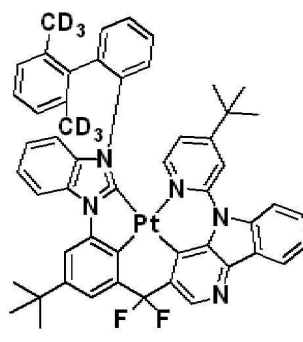
172



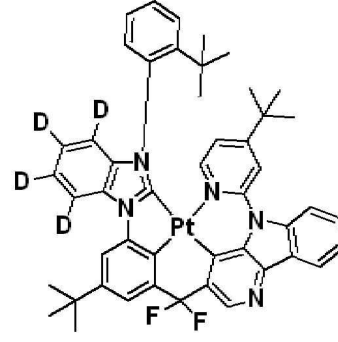
173



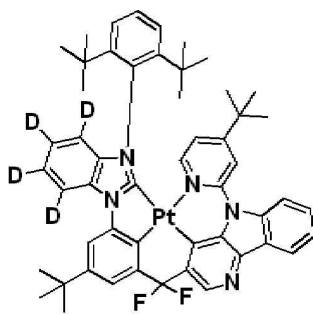
174



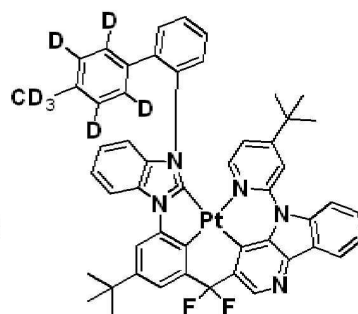
175



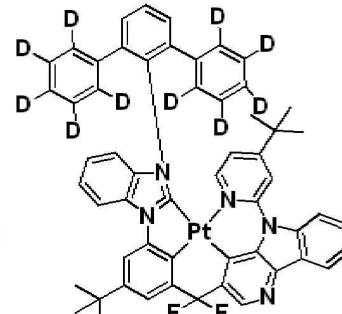
176



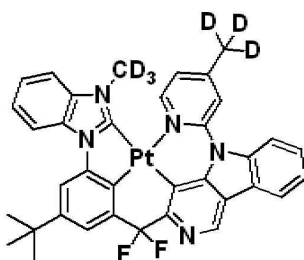
177



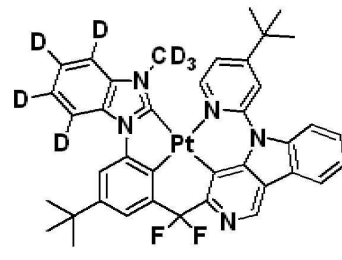
178



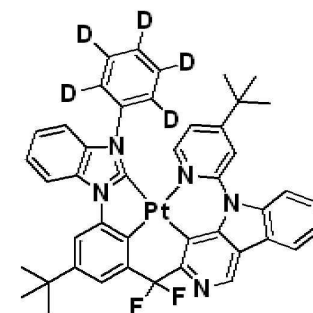
179



180

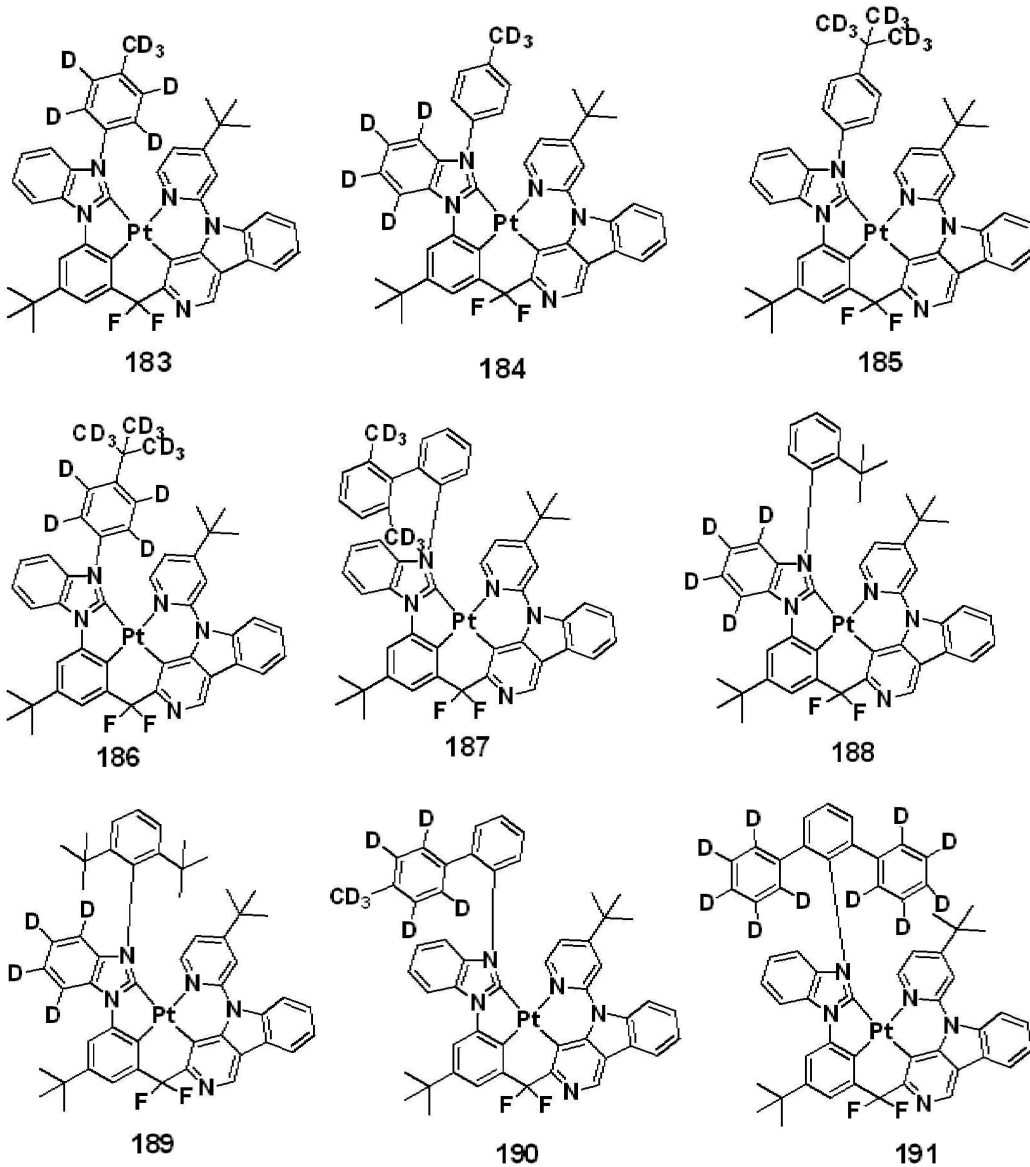


181



182





### 발명의 설명

#### 기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 유기 금속 화합물에 관한 것이다.

#### 배경 기술

[0002] 최근, 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 표시 장치(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 왕성하게 이루어져 왔다. 유기 전계 발광 표시 장치는 액정 표시 장치 등과는 다르고, 제1 전극 및 제2 전극으로부터 주입된 정공 및 전자를 발광층에 있어서 재결합시킴으로써, 발광층에 있어서 유기 화합물을 포함하는 발광 재료를 발광시켜서 표시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

[0003] 유기 전계 발광 소자를 표시 장치에 응용함에 있어서는, 유기 전계 발광 소자의 저 구동 전압화, 고 발광 효율화 및 장수명화가 요구되고 있으며, 이를 안정적으로 구현할 수 있는 유기 전계 발광 소자용 재료 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

[0004] 한편, 발광층 재료의 개발에 있어서 도펀트 재료로 사용되는 유기 금속 화합물에 대한 개발이 지속되고 있으나, 청색 발광 영역에서 높은 효율을 나타내는 도펀트 재료에 대한 개발이 여전히 요구되고 있다.

**발명의 내용**

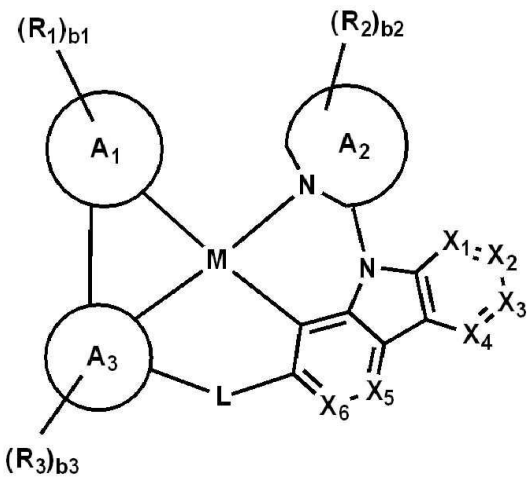
**해결하려는 과제**

- [0005] 본 발명의 목적은 우수한 발광 효율 및 장수명 특성을 갖는 유기 금속 화합물을 제공하는 것이다.
- [0006] 또한, 본 발명의 목적은 유기 금속 화합물을 발광층에 포함하여 고효율 및 장수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

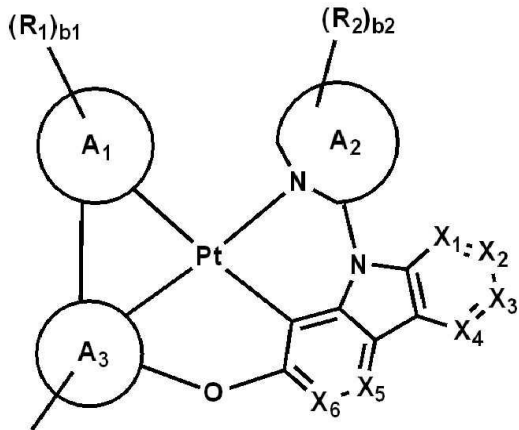
- [0007] 일 실시예는 제1 전극; 상기 제1 전극 상에 배치된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 배치된 발광층; 을 포함하고, 상기 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0008] [화학식 1]



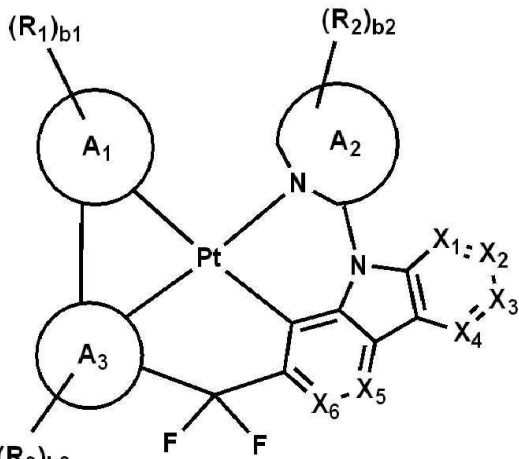
- [0009] (R<sub>3</sub>)<sub>b3</sub>
- [0010] 상기 화학식 1에서, M은 전이 금속이고, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 선택되는 하나 또는 둘이 N이고, 나머지는 CR<sub>4</sub>이고, X<sub>1</sub>이 N인 경우, X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 어느 하나는 N이고, R<sub>1</sub>는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이고, A<sub>1</sub> 내지 A<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 1 이상 60 이하의 헤테로 고리이고, b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 1 이상 4 이하의 정수이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 60 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 60 이하의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 60 이하의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 60 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 1 이상 10 이하의 헤테로 고리기이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 중수소 원자 또는 CD<sub>3</sub>이거나, 또는 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 중수소 원자 또는 CD<sub>3</sub>으로 치환된 것이고, L은 직접 결합, O, S, -CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>-, -CR<sub>13</sub>=CR<sub>14</sub>-, -C≡C-, -C(=O)-, -C(=S)-, -BR<sub>15</sub>-, -NR<sub>16</sub>-, -PR<sub>17</sub>R<sub>18</sub>-, 또는 -GeR<sub>19</sub>R<sub>20</sub>- 이고, R<sub>11</sub> 내지 R<sub>20</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 30 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.
- [0011] 상기 M은 Pt, Pd, Cu, 또는 Os일 수 있다.
- [0012] 상기 발광층은 인광 발광할 수 있다.
- [0013] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 포함할 수 있다.
- [0014] 상기 화학식 1은 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시될 수 있다.

[0015] [화학식 2-1]



[0016] (R3)b3

[0017] [화학식 2-2]

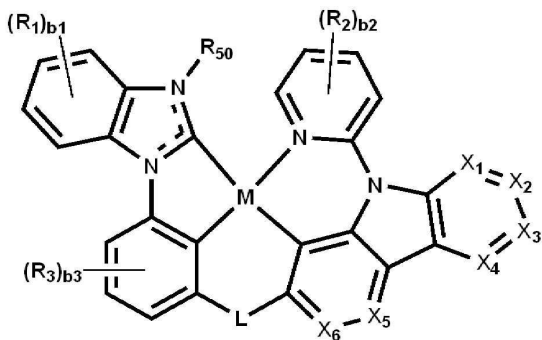


[0018] (R3)b3

[0019] 상기 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서, A<sub>1</sub> 내지 A<sub>3</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0020] 상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[0021] [화학식 3]

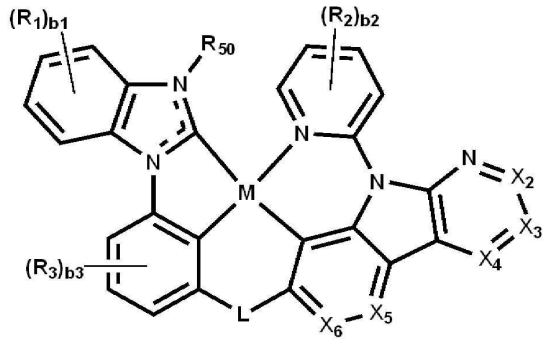


[0022]

[0023] 상기 화학식 3에서 R<sub>50</sub>은 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 30 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고, M, L, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0024] 상기 화학식 3은 하기 화학식 3-1로 표시될 수 있다.

[0025] [화학식 3-1]

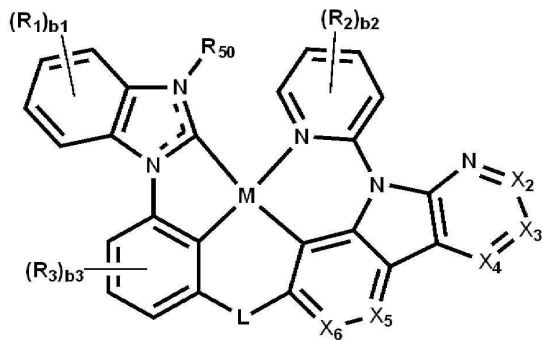


[0026]

[0027] 상기 화학식 3-1에서, X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 어느 하나는 N이고, 나머지는 CR<sub>4</sub>이고, M, L, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, R<sub>50</sub> 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 상기 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

[0028] 상기 화학식 3은 하기 화학식 3-1로 표시될 수 있다.

[0029] [화학식 3-1]

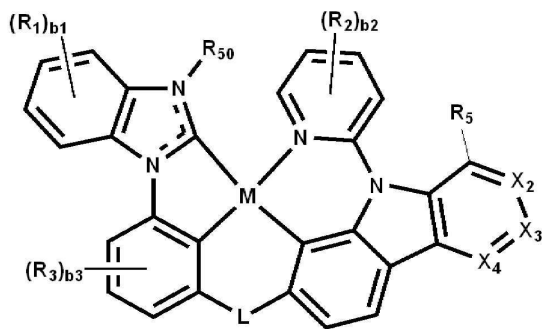


[0030]

[0031] 상기 화학식 3-1에서, X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 어느 하나는 N이고, 나머지는 CR<sub>4</sub>이고, M, L, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, R<sub>50</sub> 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 상기 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

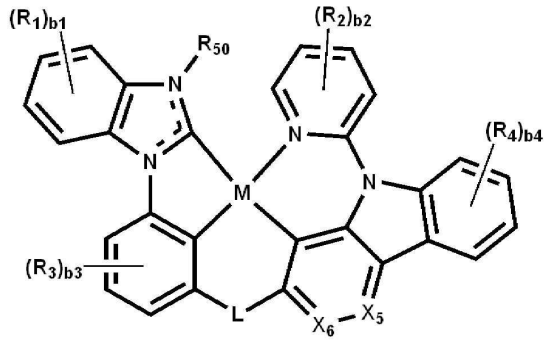
[0032] 상기 화학식 3은 하기 화학식 3-2 또는 화학식 3-3으로 표시될 수 있다.

[0033] [화학식 3-2]



[0034]

[0035] [화학식 3-3]

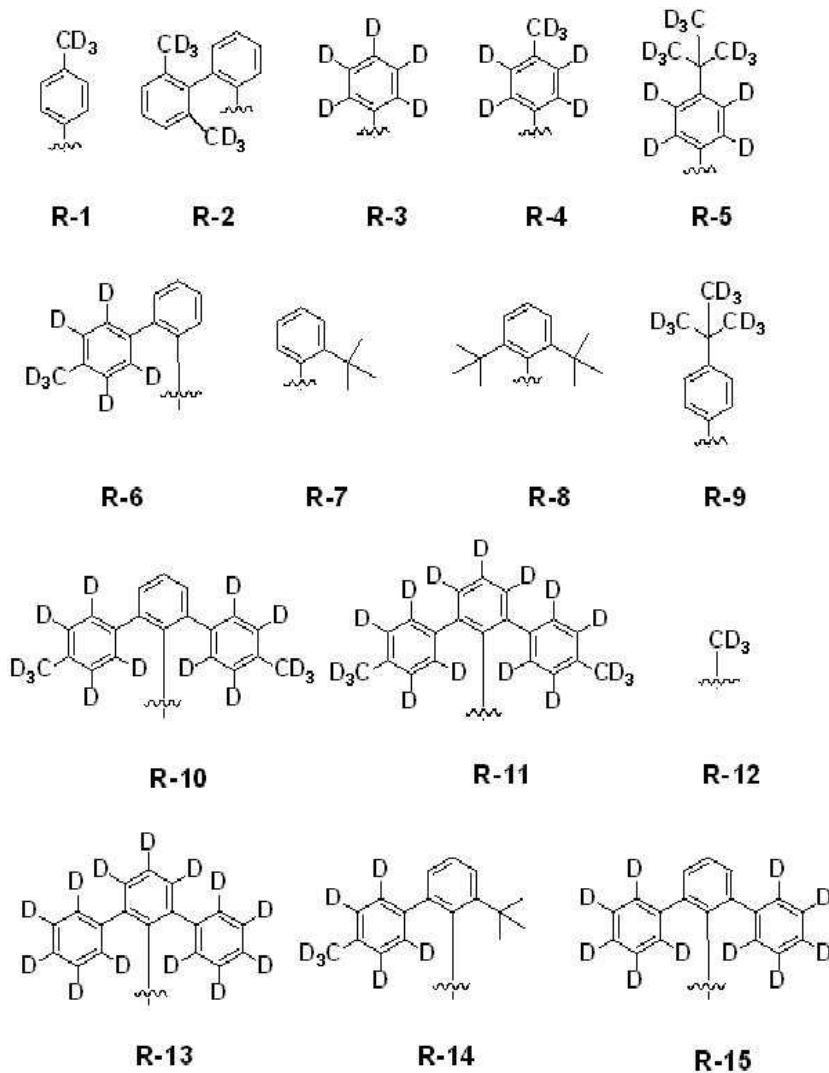


[0036]

[0037] 상기 화학식 3-2에서,  $X_2$  내지  $X_4$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는  $CR_4$ 이고,  $R_5$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이고, 상기 화학식 3-3에서,  $X_5$  및  $X_6$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는  $CR_6$ 이고,  $b_4$ 는 1 이상 4 이하의 정수이고,  $R_6$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이고, M, L,  $R_1$  내지  $R_4$ ,  $b_1$  내지  $b_3$ , 및  $R_{50}$ 은 상기 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

[0038] 상기  $R_{50}$ 은 하기 화합물군 R의 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0039] [화합물군 R]



[0040]

[0041] 상기 R<sub>50</sub>이 화합물 R-7 또는 R-8인 경우, R<sub>1</sub>은 적어도 하나의 중수소 원자를 포함할 수 있다.

[0042] 일 실시예는 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 제공한다.

**발명의 효과**

[0043] 일 실시예의 유기 금속 화합물은 카블린기 및 중수소 원자를 포함하여 유기 전계 발광 소자의 고효율 및 장수명 특성에 기여할 수 있다.

[0044] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 카블린기 및 중수소 원자를 포함하는 유기 금속 화합물을 포함하여 고효율 및 장수명의 소자 특성을 나타낼 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0045] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0046] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

[0047] 본 명세서에서, 어떤 구성요소(또는 영역, 층, 부분 등)가 다른 구성요소 "상에 있다", "연결 된다", 또는 "결합된다"고 언급되는 경우에 그것은 다른 구성요소 상에 직접 배치/연결/결합될 수 있거나 또는 그들 사이에 제3의 구성요소가 배치될 수도 있다는 것을 의미한다.

[0048] 동일한 도면부호는 동일한 구성요소를 지칭한다. 또한, 도면들에 있어서, 구성요소들의 두께, 비율, 및 치수는 기술적 내용의 효과적인 설명을 위해 과장된 것이다.

[0049] "및/또는"은 연관된 구성들이 정의할 수 있는 하나 이상의 조합을 모두 포함한다.

[0050] 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.

[0051] 또한, "아래에", "하측에", "위에", "상측에" 등의 용어는 도면에 도시된 구성들의 연관관계를 설명하기 위해 사용된다. 상기 용어들은 상대적인 개념으로, 도면에 표시된 방향을 기준으로 설명된다.

[0052] 다르게 정의되지 않는 한, 본 명세서에서 사용된 모든 용어 (기술 용어 및 과학 용어 포함)는 본 발명이 속하는 기술 분야의 당업자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 갖는다. 또한, 일반적으로 사용되는 사전에서 정의된 용어와 같은 용어는 관련 기술의 맥락에서 의미와 일치하는 의미를 갖는 것으로 해석되어야 하고, 이상적인 또는 지나치게 형식적인 의미로 해석되지 않는 한, 명시적으로 여기에서 정의된다.

[0053] "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[0054] 이하, 도면들을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자 및 이에 포함된 일 실시예의 유기 금속 화합물에 대하여 설명한다.

[0055] 도 1 내지 도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 1 내지 도 4를 참조하면, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)은 서로 마주하고 배치되며, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에는 발광층(EML)이 배치될 수 있다.

- [0056] 또한, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 발광층(EML) 이외에 복수의 기능층들을 더 포함한다. 복수의 기능층들은 정공 수송 영역(HTR) 및 전자 수송 영역(ETR)을 포함할 수 있다. 즉, 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 순차적으로 적층된 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR), 및 제2 전극(EL2)을 포함할 수 있다. 또한 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 제2 전극(EL2) 상에 배치된 캡핑층(CPL)을 포함할 수 있다.
- [0057] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 발광층(EML)에 후술하는 일 실시예의 유기 금속 화합물을 포함할 수 있다.
- [0058] 한편, 도 2는 도 1과 비교하여, 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL) 및 전자 수송층(ETL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 또한, 도 3은 도 1과 비교하여 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 및 전자 저지층(EBL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL), 전자 수송층(ETL), 및 정공 저지층(HBL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 도 4는 도 2와 비교하여 제2 전극(EL2) 상에 배치된 캡핑층(CPL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다.
- [0059] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 금속 합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제1 전극(EL1)은 애노드(anode)일 수 있다. 또한, 제1 전극(EL1)은 화소 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등을 포함할 수 있다. 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다. 예를 들어, 제1 전극(EL1)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.
- [0060] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 버퍼층(미도시), 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 예를 들어, 약 50Å 내지 약 15000Å인 것일 수 있다.
- [0061] 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0062] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질 및 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층(미도시), 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층(미도시), 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0063] 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0064] 정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine) 화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4"-[tris(3-methylphenyl)phenylamino] triphenylamine), TDATA(4,4',4"-Tris(N,N'-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4"-tris{N-(2-naphthyl)-N-phenylamino}-triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS(Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate)), NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium

[Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.

- [0065] 정공 수송층(HTL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorene)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenyl-benzidine), TAPC(4,4' -Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl), mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene) 등을 더 포함할 수도 있다.
- [0066] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 50Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0067] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-7,7',8,8'-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0068] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층(미도시) 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층(미도시)은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층(미도시)에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.
- [0069] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)은 예를 들어 약 100Å 내지 약 1000Å 또는, 약 100Å 내지 약 300Å의 두께를 갖는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0070] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 후술하는 일 실시예의 유기 금속 화합물을 포함하는 것일 수 있다.
- [0071] 본 명세서에서, “치환 또는 비치환된” 은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 옥시기, 티오기, 설퍼닐기, 설포닐기, 카보닐기, 붕소기, 포스핀기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 알콕시기, 탄화수소 고리기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 비페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.
- [0072] 본 명세서에서, 할로겐 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0073] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 50 이하, 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 6 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2- 에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸



헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0074] 본 명세서에서 알케닐기는, 탄소수 2이상의 알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미한다. 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하 또는 2 이상 10 이하이다. 알케닐기의 예로는 비닐기, 1-부테닐기, 1-펜테닐기, 1,3-부타디에닐 아릴기, 스티레닐기, 스티릴비닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0075] 본 명세서에서 알키닐기는, 탄소수 2이상의 알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미한다. 알키닐기는 직쇄, 분지쇄, 또는 고리형일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하 또는 2 이상 10 이하이다. 알키닐기의 구체적인 예에는, 에티닐기, 프로피닐기, 등이 포함될 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0076] 본 명세서에서, 탄화수소 고리기는 지방족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기, 또는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기일 수 있다. 탄화수소 고리기의 고리 형성 탄소수 5 이상 60 이하, 5 이상 30 이하, 또는 5 이상 20 이하일 수 있다.

[0077] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 또는 6 이상 15 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 비페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀸크페닐기, 섹시페닐기, 트리페닐에닐기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0078] 본 명세서에서, 헤테로 고리기는 헤테로 원자로 B, O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 헤테로 고리기는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리기를 포함한다. 방향족 헤테로 고리기는 헤테로아릴기일 수 있다. 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리는 단환 또는 다환일 수 있다.

[0079] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 헤테로 원자로 B, O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 것일 수 있다. 헤테로아릴기가 헤테로 원자를 2개 이상 포함할 경우, 2개 이상의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로 고리 또는 다환식 헤테로 고리일 수 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하, 또는 2 이상 10 이하일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴놀살린기, 페녹사진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라지노 피라진기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨란기, 페난트롤린기, 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 페노티아진기, 디벤조실롤기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0080] 본 명세서에서, 실릴기는 알킬 실릴기 및 아릴 실릴기를 포함한다. 실릴기의 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

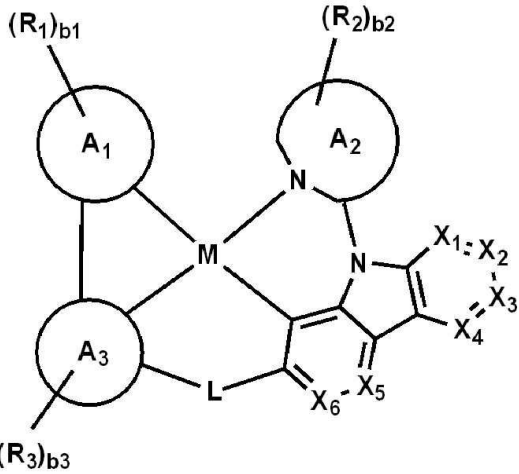
[0081] 본 명세서에서, 옥시기는 알콕시기 및 아릴 옥시기를 포함할 수 있다. 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 예를 들어 1 이상 20 이하 또는 1 이상 10 이하인 것일 수 있다. 옥시기의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, 부톡시, 펜틸옥시, 헥실옥시, 옥틸옥시, 노닐옥시, 데실옥시, 벤질옥시 등이 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0082] 본 명세서에서, 아민기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아민기는 알킬 아민기, 아릴 아민기, 또는 헤테로아릴 아민기를 포함할 수 있다. 아민기의 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 페닐아민기, 디페닐아민기, 나프틸아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0083] 한편, 본 명세서에서 " $\sum$ " 는 연결되는 위치를 의미한다.

[0084] 일 실시예에 따른 유기 금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시될 수 있다.

[0085] [화학식 1]



[0086] 화학식 1에서, M은 중심 금속 원자로, M은 전이 금속이다.

[0088] 화학식 1에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 선택되는 하나 또는 둘이 N(Nitrogen)이고, 나머지는 CR<sub>4</sub>이다. X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 하나를 선택하는 경우, X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 하나가 선택될 수 있다. 또한, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 둘을 선택하는 경우에는 X<sub>1</sub>이 선택되고 X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 하나가 선택되거나, X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 둘이 선택될 수 있다. 화학식 1에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 선택되는 하나 또는 둘이 N(Nitrogen)이고, 나머지는 CR<sub>4</sub>인 방향족 축합환은 카볼린(carboline)기일 수 있다.

[0089] X<sub>1</sub>이 N인 경우, X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub> 중 적어도 하나는 N이다. 즉, X<sub>1</sub>이 N이고, X<sub>2</sub> 내지 X<sub>6</sub>이 모두 CR<sub>4</sub>인 경우는 제외한다. R<sub>4</sub>는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기이다. 예를 들어, X<sub>1</sub>이 N인 경우, X<sub>3</sub>이 N이고, X<sub>2</sub>, X<sub>4</sub>, X<sub>5</sub> 및 X<sub>6</sub>은 CH일 수 있다.

[0090] A<sub>1</sub> 내지 A<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 5 이상 60 이하의 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 1 이상 60 이하의 헤테로 고리일 수 있다. 예를 들어, A<sub>1</sub> 및 A<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 고리형성 탄소수 5 이상 10 이하의 헤테로 아릴기이고, A<sub>3</sub>은 탄소수 5 이상 10 이하의 아릴기일 수 있다.

[0091] b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 1 이상 4 이하의 정수이다. b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>이 2 이상의 정수인 경우, 복수의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 모두 동일하거나 적어도 하나가 상이한 것일 수 있다. 예를 들어, b<sub>1</sub>이 2 이상의 정수인 경우, 복수의 R<sub>1</sub>은 모두 동일하거나, 적어도 하나의 R<sub>1</sub>은 나머지 R<sub>1</sub>과 상이할 수 있다.

[0092] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 60 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 60 이하의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 60 이하의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 60 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 1 이상 10 이하의 헤테로 고리기일 수 있다.

[0093] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 중수소 원자 또는 CD<sub>3</sub>이거나, 또는 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 중수소 원자 또는 CD<sub>3</sub>으로 치환된 것일 수 있다. "D"는 중수소 원자일 수 있다. 예를 들어, b<sub>1</sub>이 2 이상의 정수인 경우, 복수의 R<sub>1</sub>은 중수소 원자일 수 있다. 이와 달리, R<sub>1</sub>은 중수소 원자로 치환된 아릴기일 수 있다.

[0094] 예를 들어, R<sub>2</sub>는 t-부틸기 또는 3개의 중수소 원자로 치환된 메틸기일 수 있다. R<sub>3</sub>은 수소 원자, 또는 t-부틸기일 수 있다. 또한, R<sub>3</sub>은 알킬기로 치환된 페닐기를 포함하는 것으로, 알킬기는 메틸기, 이소프로필기, 및 중수소

원자로 치환된 메틸기 중 어느 하나일 수 있다. 하지만, 이는 예시적인 것이며, 실시예가 이에 한정되지 않는다.

[0095] L은 직접 결합(direct linkage), O, S,  $-CR_{11}R_{12}-$ ,  $-CR_{13}=CR_{14}-$ ,  $-C\equiv C-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=S)-$ ,  $-BR_{15}-$ ,  $-NR_{16}-$ ,  $-PR_{17}R_{18}-$ , 또는  $-GeR_{19}R_{20}-$  일 수 있다. 예를 들어, L은 산소 원자일 수 있다.

[0096]  $R_{11}$  내지  $R_{20}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 30 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다.

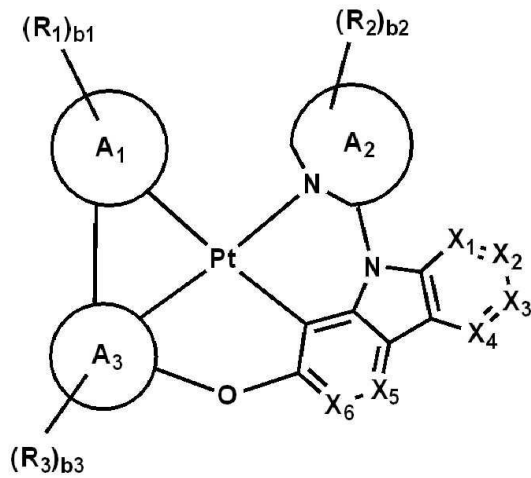
[0097] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 유기 금속 화합물은  $X_1$  내지  $X_6$  중 선택되는 하나 또는 둘이 질소 원자이고, 이에 따라 개선된 MLCT(Metal to Ligand Charge Transfer) 비율을 나타낼 수 있다. 일 실시예의 유기 금속 화합물은 높은 MLCT 비율을 나타냄으로써, 발광층 재료로 사용될 경우 유기 전계 발광 소자의 효율 향상에 기여할 수 있다. 한편 본 명세서에서 설명된 MLCT 비율은  $^3MLCT$ (triplet Metal to Ligand Charge Transfer) 비율을 지칭하는 것으로, 금속 원자에서 리간드로 100% 전하 이동되는 경우를 기준으로 할 때의 상대적인 비율을 나타낸 것이다.

[0098] 또한, 일 실시예의 유기 금속 화합물은 중수소 원자를 치환기로 포함함으로써, 발광층 재료로 사용될 경우 수명 및 효율이 향상된 소자 특성을 나타낼 수 있다.

[0099] 화학식 1에서, M은 4배위 리간드와 결합하는 금속 원자일 수 있다. M은 Pt(백금), Pd(팔라듐), Cu(구리), 또는 Os(오스뮴) 등의 금속 원자일 수 있으며, 구체적으로 M은 Pt일 수 있다.

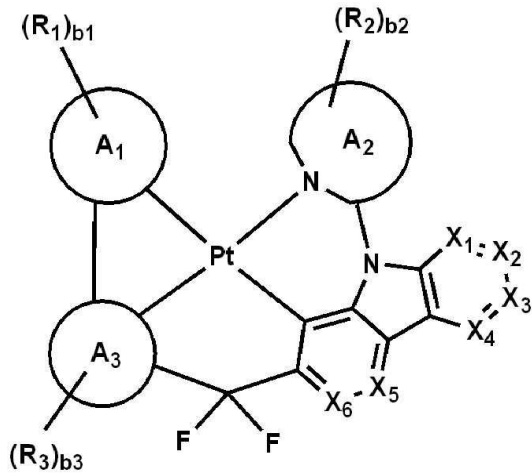
[0100] 한편, 화학식 1은 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시될 수 있다. 화학식 2-1은 화학식 1에서 금속 원자 M이 Pt이고, L이 O인 유기 금속 화합물에 해당한다. 화학식 2-2는 화학식 1에서 금속 원자 M이 Pt이고, L이  $-CR_{11}R_{12}-$  에서  $R_{11}R_{12}$ 가 모두 플루오린(fluorine)원자인 유기 금속 화합물에 해당한다.

[0101] [화학식 2-1]



[0102]

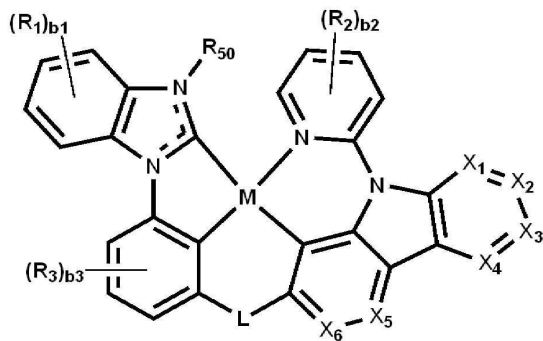
[0103] [화학식 2-2]



[0104]

[0105] 화학식 2-1 및 화학식 2-2에서,  $X_1$  내지  $X_6$ ,  $R_1$  내지  $R_3$ , 및  $b_1$  내지  $b_3$ 에 대해서는 화학식 1에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다. 또한, 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다. 화학식 3은 화학식 1에서  $A_1$  내지  $A_3$ 이 방향족 고리인 경우를 나타낸 것이다.  $A_1$ 은 이미다졸(imidazole),  $A_2$ 는 피리딘(pyridine),  $A_3$ 은 아릴기인 경우를 나타낸 것이다.

[0106] [화학식 3]



[0107]

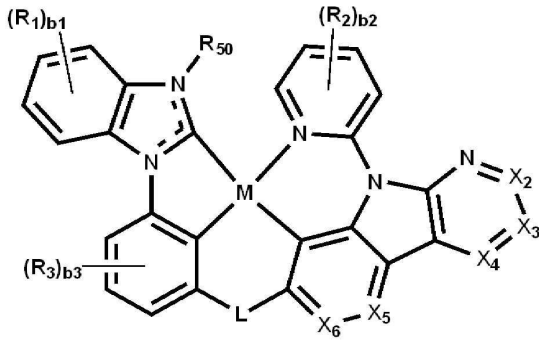
[0108] 화학식 3에서  $R_{50}$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 30 이하의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다.

[0109] 예를 들어,  $R_{50}$ 은 중수소 원자 및 방향족 고리기 중 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.  $R_{50}$ 은 중수소 원자로 치환된 메틸기, 중수소 원자로 치환된 아릴기일 수 있다.  $R_{50}$ 은 1개 내지 2개의 이소프로필기로 치환된 페닐기 또는 1개 내지 2개의 페닐기로 치환된 페닐기일 수 있다. 1개 내지 2개의 페닐기는 중수소 원자를 치환기로 포함하고, 페닐기의 모든 수소가 중수소 원자로 치환된 것일 수 있다. 하지만, 이는 예시적인 것이며, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0110] 화학식 3에서 M, L,  $X_1$  내지  $X_6$ ,  $R_1$  내지  $R_3$ , 및  $b_1$  내지  $b_3$ 에 대해서는 화학식 1에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

[0111] 화학식 3은 하기 화학식 3-1로 표시되는 것일 수 있다. 화학식 3에서  $X_1$  내지  $X_6$  중 선택되는 둘이 N인 경우를 나타낸 것이다.

[0112] [화학식 3-1]



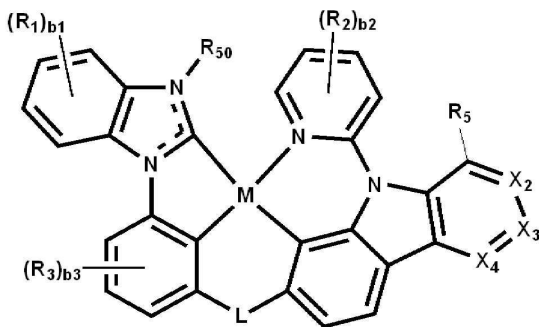
[0113]

[0114] 화학식 3-1에서  $X_1$ 은 N이고,  $X_2$  내지  $X_6$  중 어느 하나가 N이고, 나머지는 CR<sub>4</sub>일 수 있다. 예를 들어,  $X_1$  및  $X_3$ 이 N이고,  $X_2$ ,  $X_4$ ,  $X_5$  및  $X_6$ 이 CH일 수 있다.

[0115] 화학식 3-1에서 M, L, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, R<sub>50</sub> 및 b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>에 대해서는 화학식 3에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

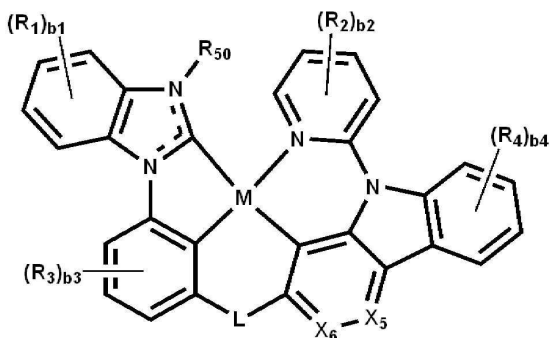
[0116] 또한, 화학식 3은 하기 화학식 3-2 또는 화학식 3-3으로 표시되는 것일 수 있다. 화학식 3-1과 달리  $X_1$  내지  $X_6$  중 선택되는 하나가 N인 경우를 나타낸 것으로, 화학식 3-2 및 화학식 3-3은  $X_1$ 이 CR<sub>5</sub>이고,  $X_2$  내지  $X_6$  중 어느 하나가 N이고 나머지는 CR<sub>4</sub>인 경우를 나타낸 것이다.

[0117] [화학식 3-2]



[0118]

[0119] [화학식 3-3]



[0120]

[0121] 화학식 3-2에서,  $X_2$  내지  $X_4$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는 CR<sub>4</sub>일 수 있다. 예를 들어,  $X_2$ 는 N,  $X_3$  및  $X_4$ 는 CR<sub>4</sub>일 수 있다. R<sub>5</sub>는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. 예를 들어, R<sub>4</sub> 및 R<sub>5</sub>는 메틸기로 동일한 것일 수 있다.

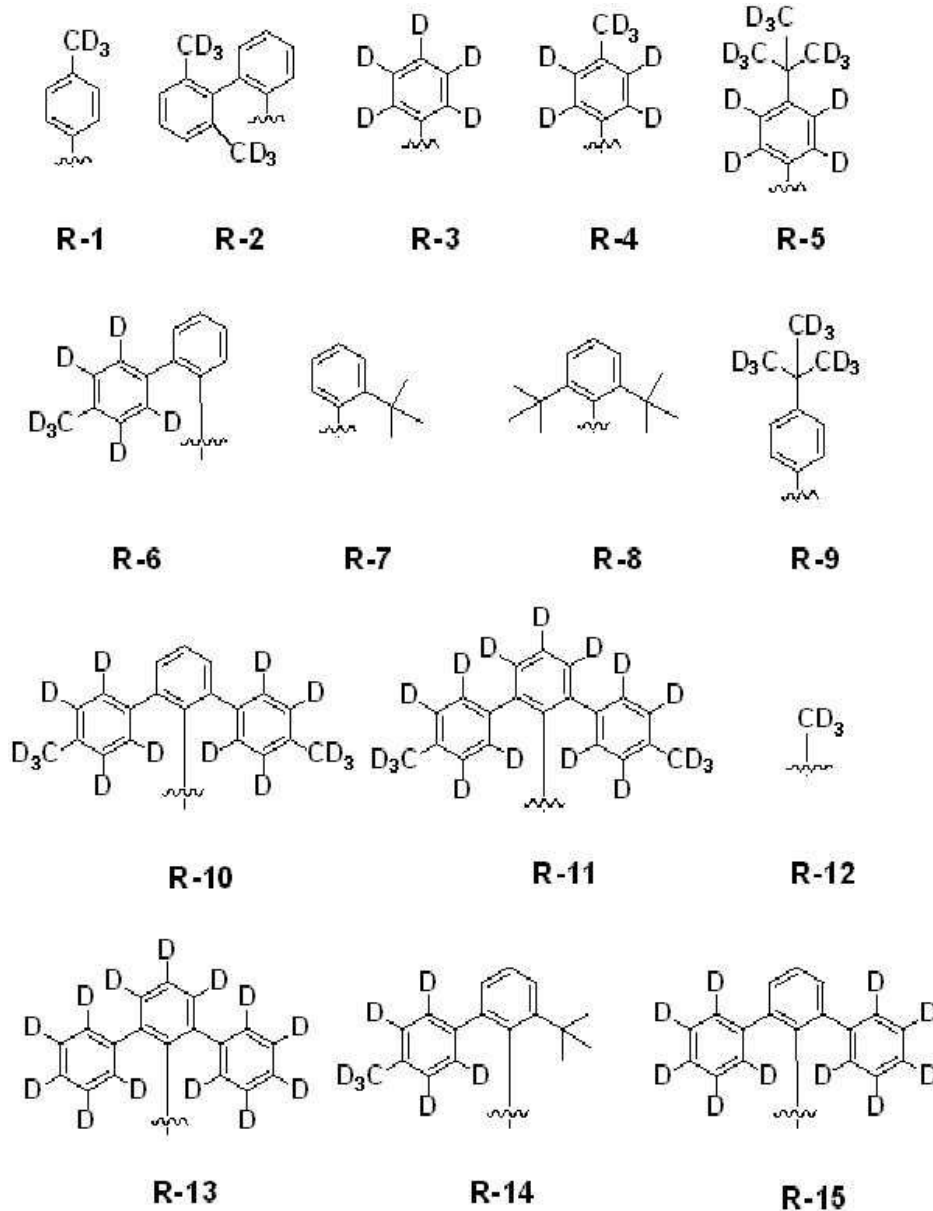
[0122] 화학식 3-3에서,  $X_5$  및  $X_6$  중 어느 하나는 N이고, 나머지는 CR<sub>6</sub>일 수 있다. R<sub>6</sub>은 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다. b<sub>4</sub>는 1 이상 4 이하의 정수일 수 있다. 예를

들어,  $X_5$ 는 N,  $X_6$ 은 CH이고,  $R_1$ 는 중수소 원자일 수 있다.

[0123] 화학식 3-2 및 화학식 3-3에서 M, L,  $R_1$  내지  $R_4$ ,  $b_1$  내지  $b_3$ , 및  $R_{50}$ 에 대해서는 화학식 3에서 설명한 내용과 동일한 내용이 적용될 수 있다.

[0124] 한편,  $R_{50}$ 은 화합물군 R의 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0125] [화합물군 R]



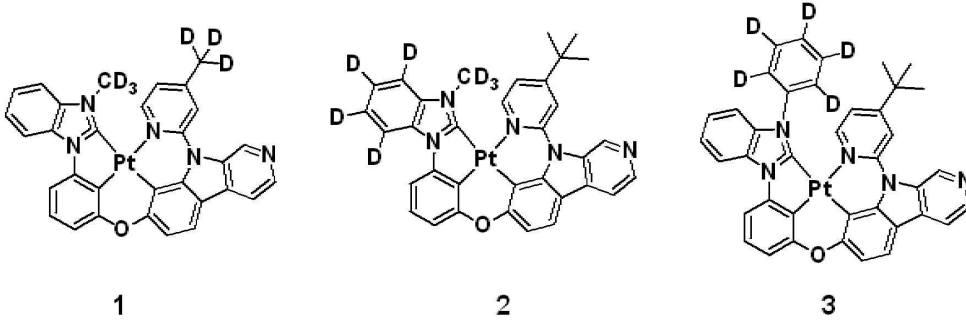
[0126]

[0127] 화합물군 R에서  $R_{50}$ 이 중수소 원자를 포함하지 않는 화합물인 경우,  $R_1$ 은 중수소 원자를 치환기로 포함할 수 있다.  $R_{50}$ 이 R-7 또는 R-8인 경우에  $R_1$ 은 중수소 원자일 수 있다. 예를 들어,  $R_{50}$ 이 R-7이고  $b_1$ 이 4인 경우, 복수의  $R_1$ 은 모두 중수소 원자일 수 있다.

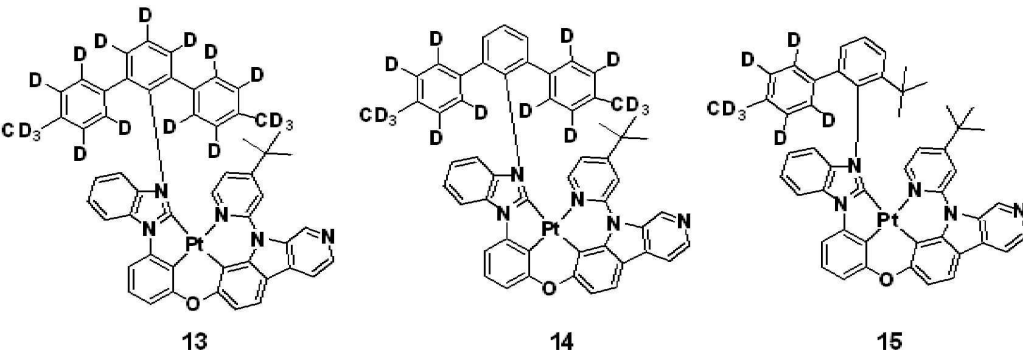
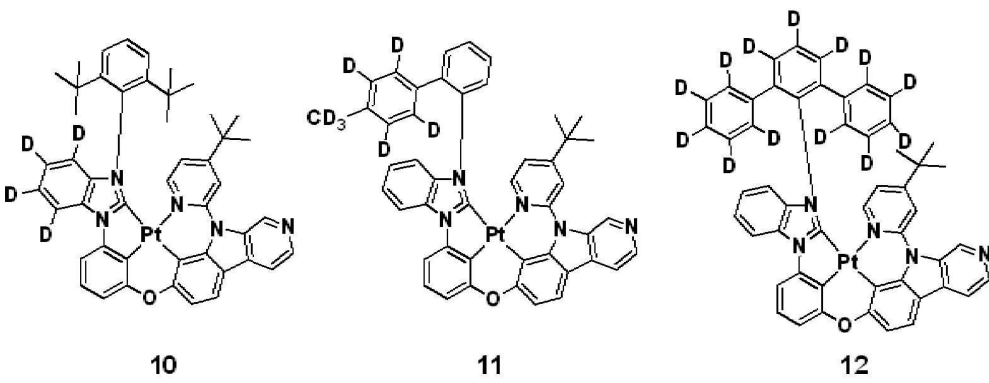
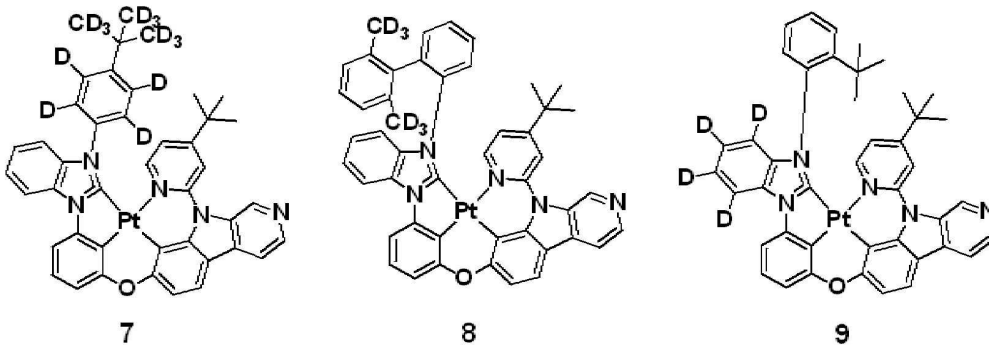
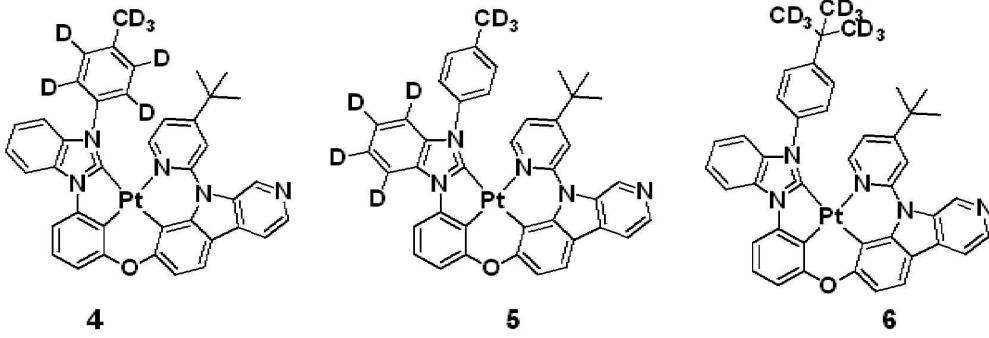
[0128] 일 실시예의 유기 금속 화합물은 청색 광을 발광하는 발광 도펀트일 수 있다. 또한, 일 실시예의 유기 금속 화합물은 인광 도펀트일 수 있다.

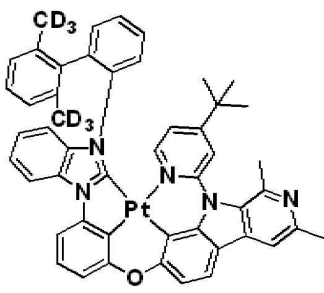
[0129] 일 실시예의 유기 금속 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 발광층(EML)은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0130] [화합물군 1]

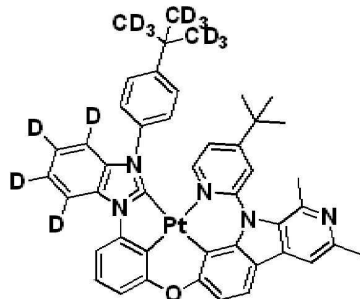


[0131]

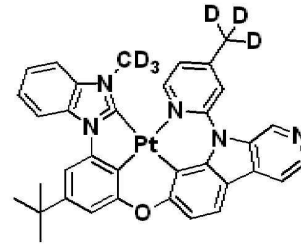




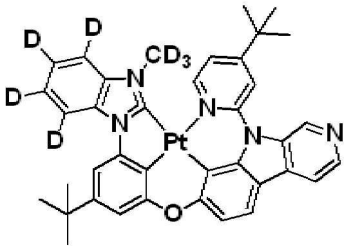
16



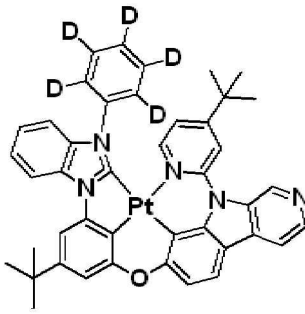
17



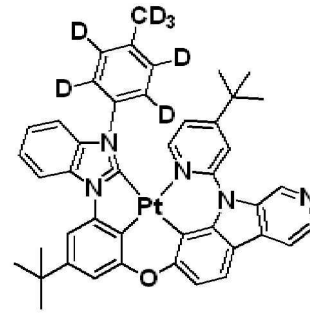
18



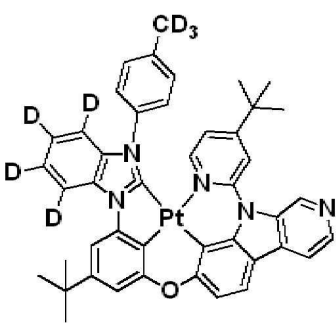
19



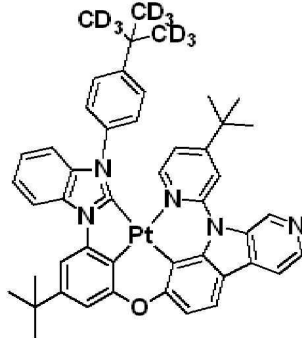
20



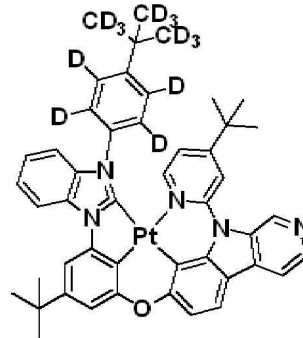
21



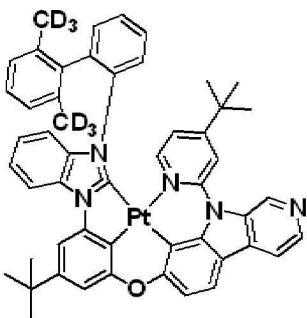
22



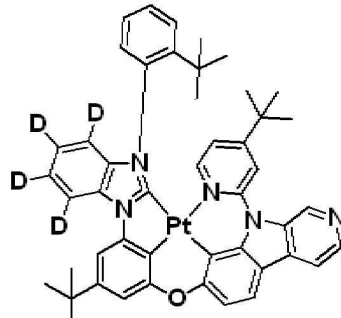
23



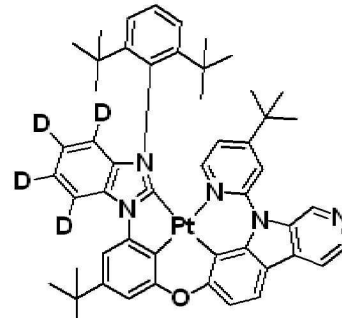
24



25

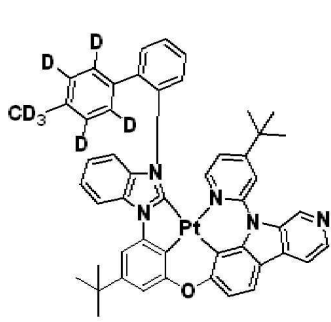


26

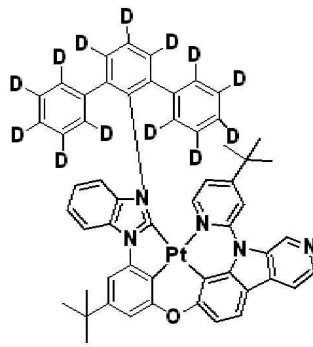


27

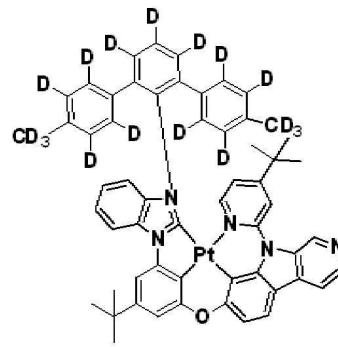




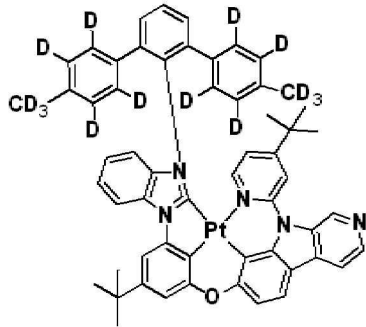
28



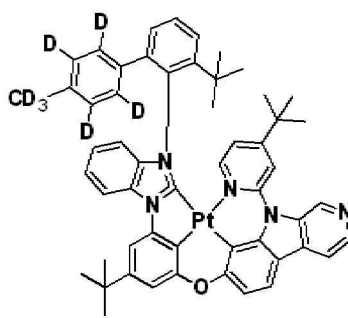
29



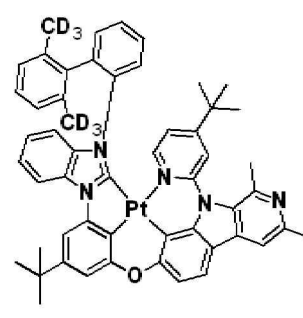
30



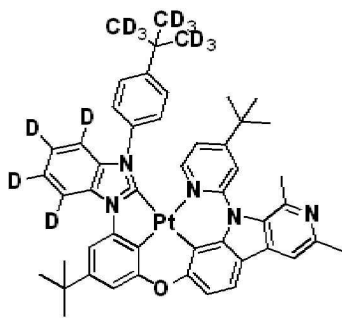
31



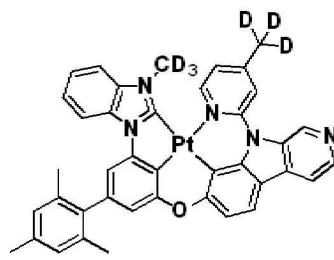
32



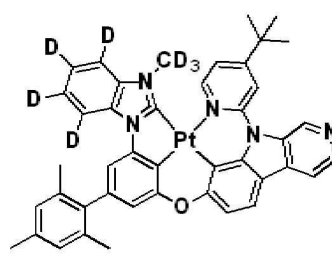
33



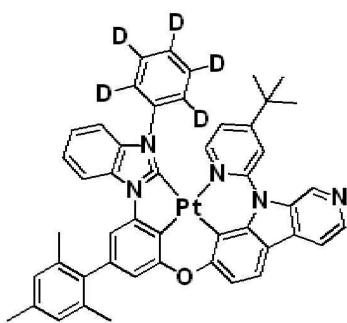
34



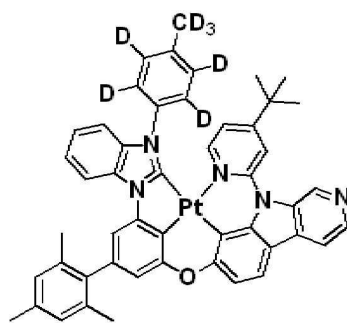
35



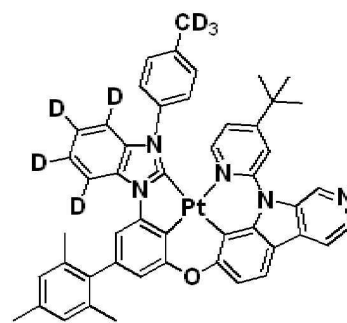
36



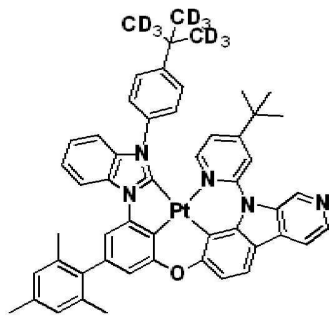
37



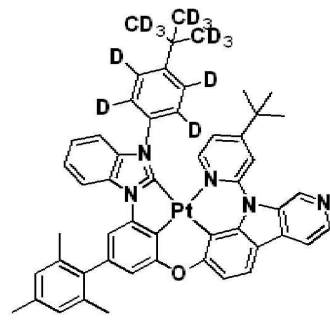
38



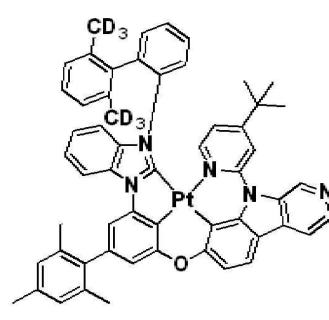
39



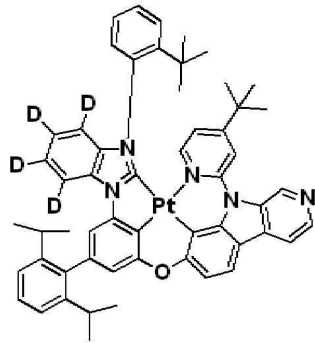
40



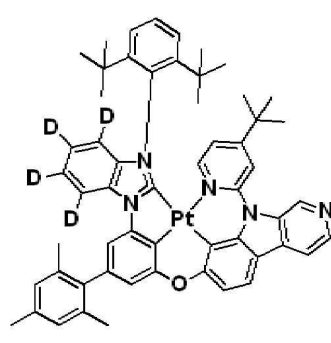
41



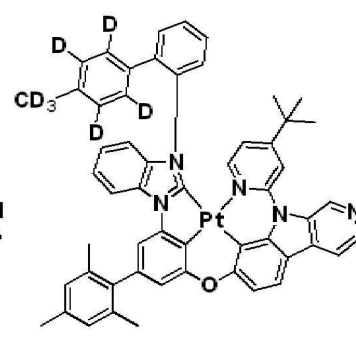
42



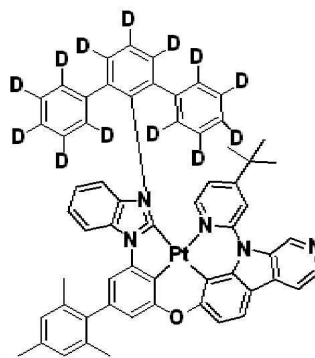
43



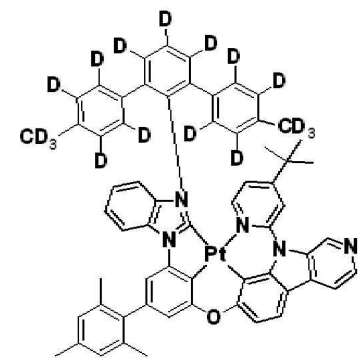
44



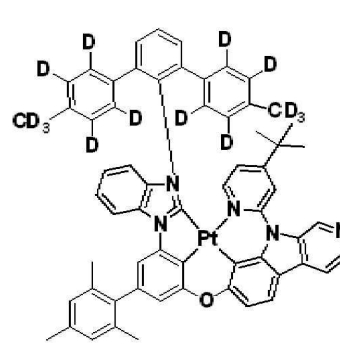
45



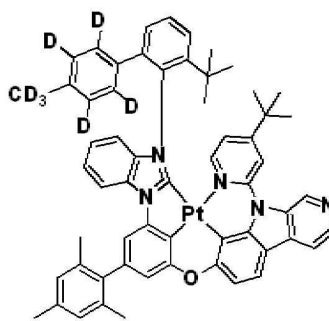
46



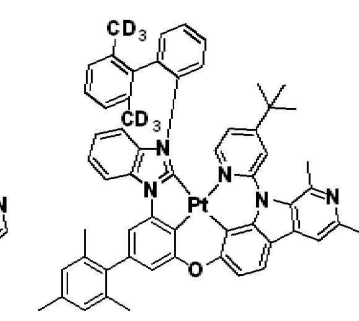
47



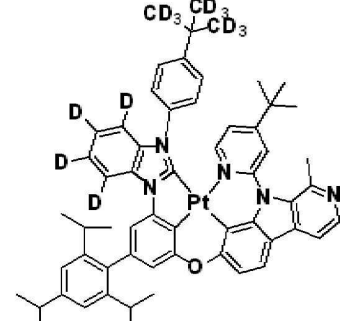
48



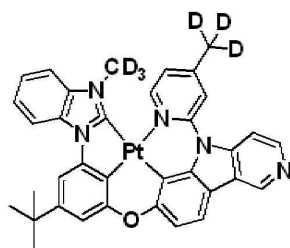
49



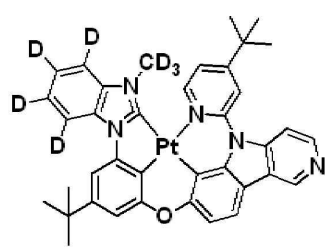
50



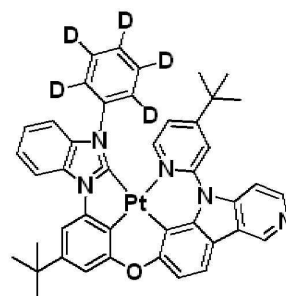
51



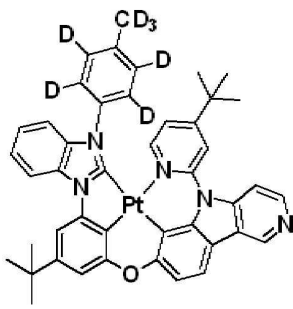
52



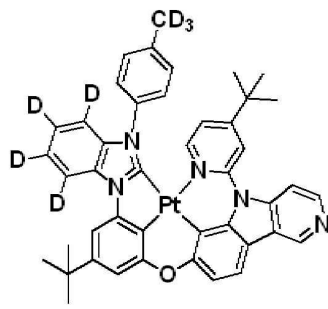
53



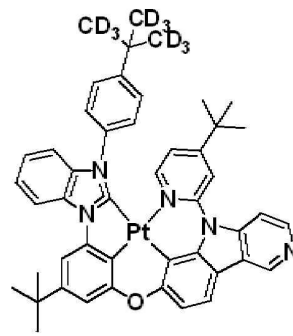
54



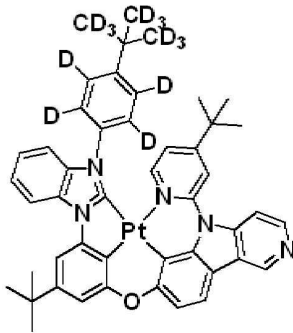
55



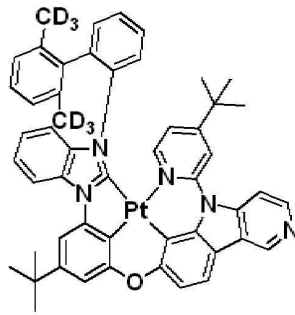
56



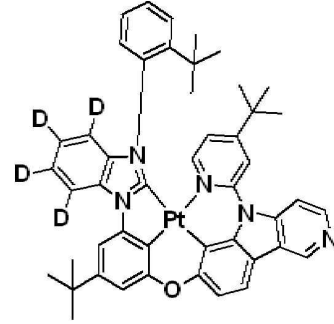
57



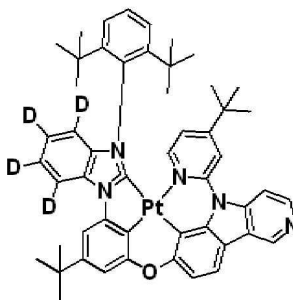
58



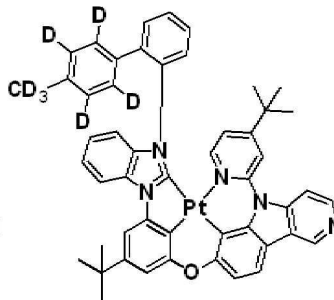
59



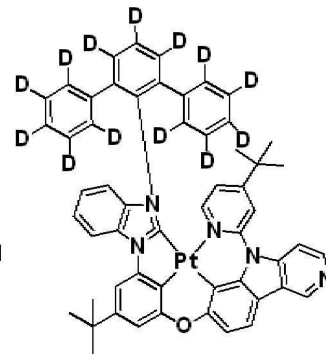
60



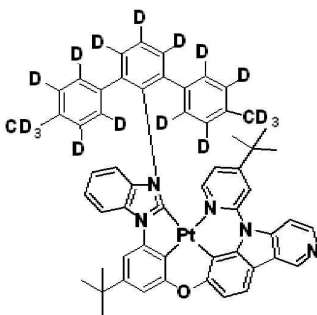
61



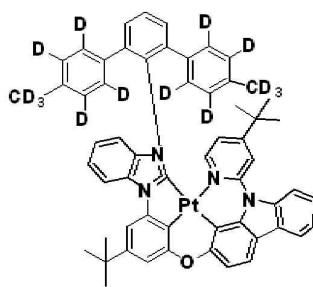
62



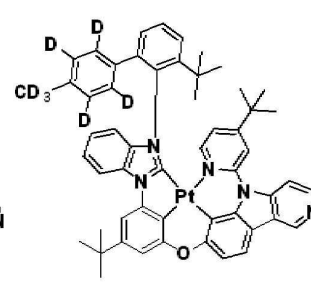
63



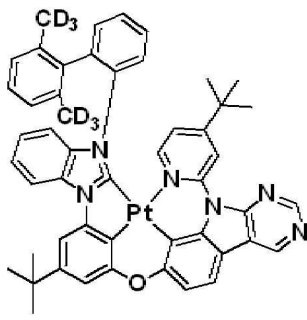
64



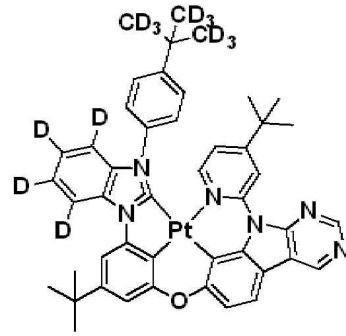
65



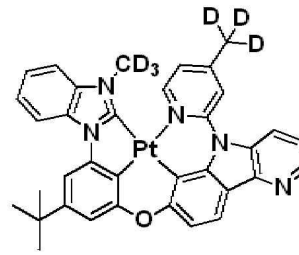
66



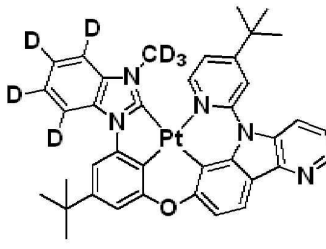
67



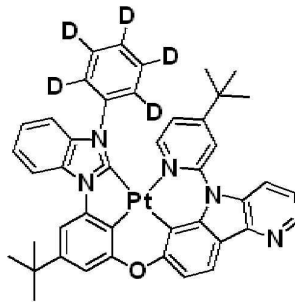
68



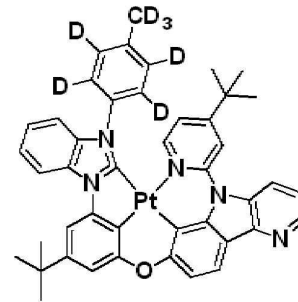
69



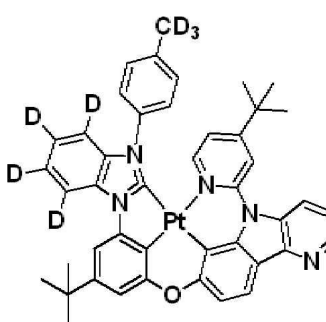
70



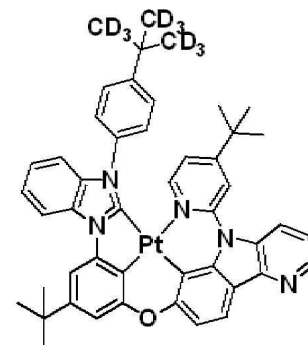
71



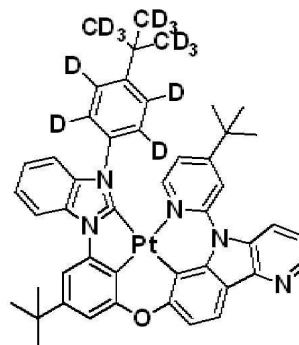
72



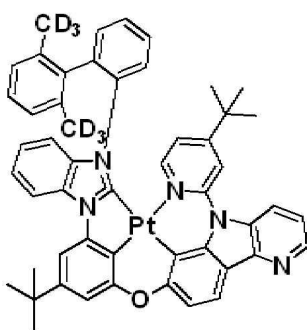
73



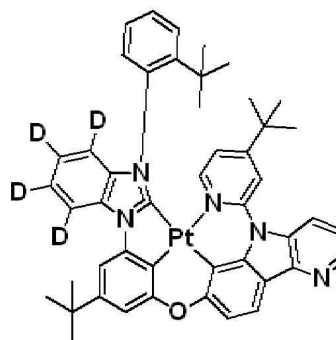
74



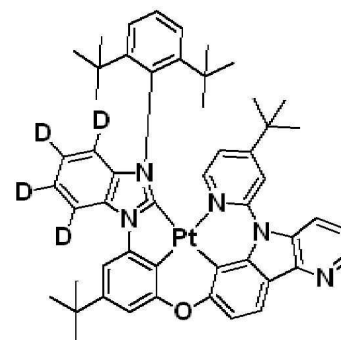
75



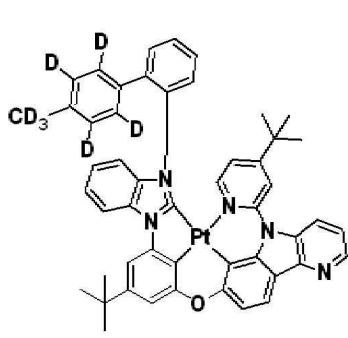
76



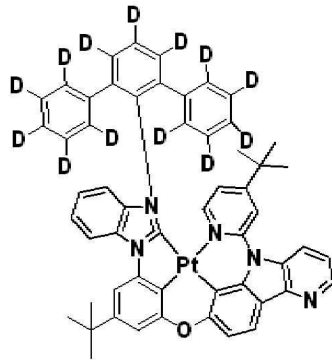
77



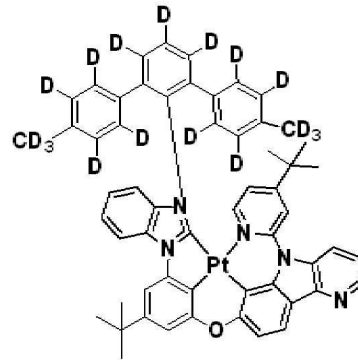
78



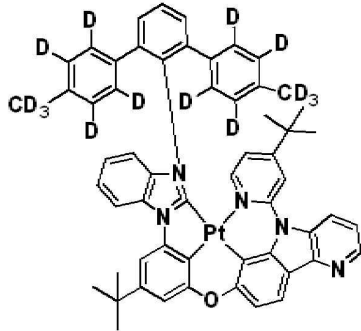
79



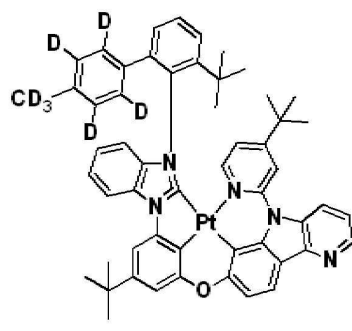
80



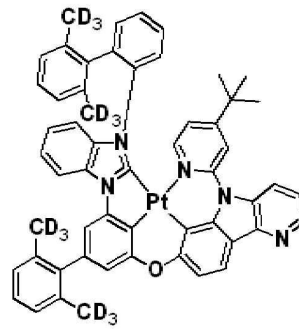
81



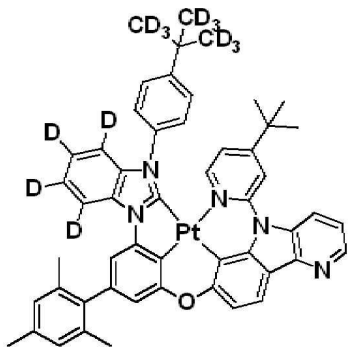
82



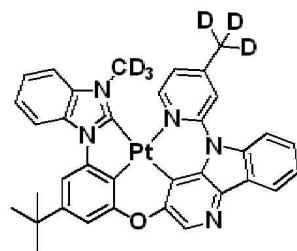
83



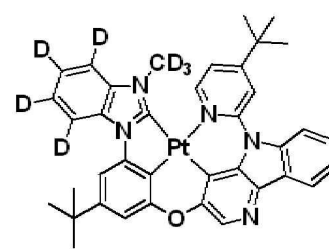
84



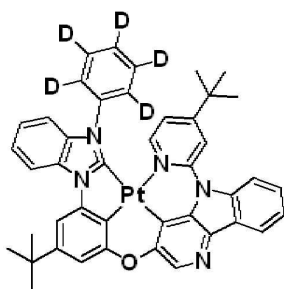
85



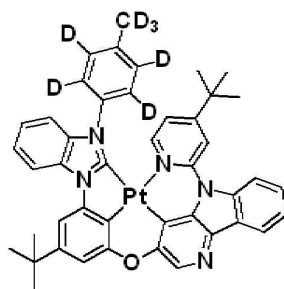
86



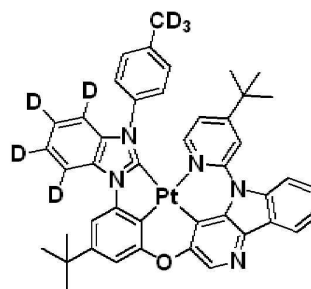
87



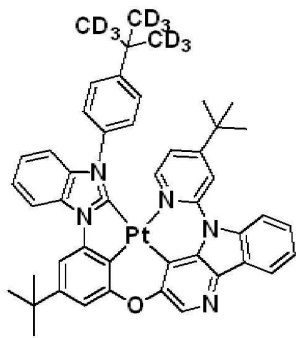
88



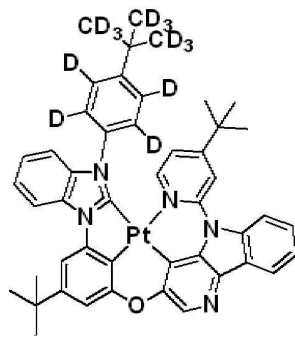
89



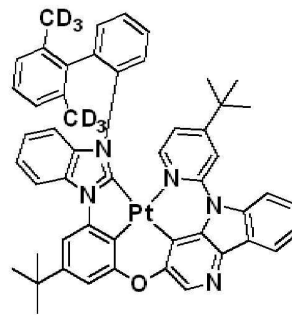
90



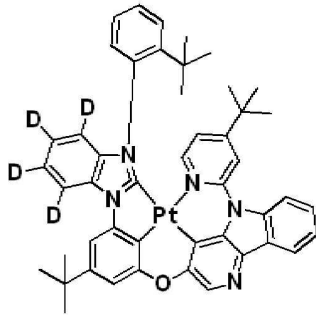
91



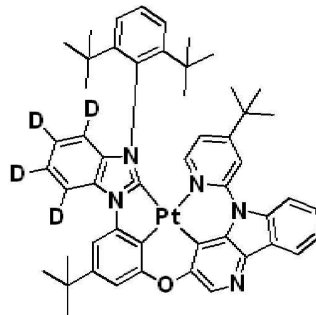
92



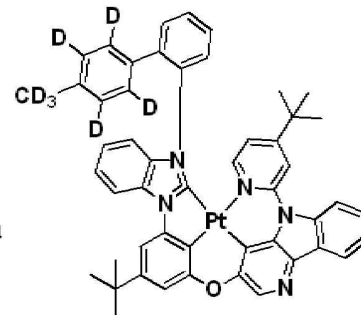
93



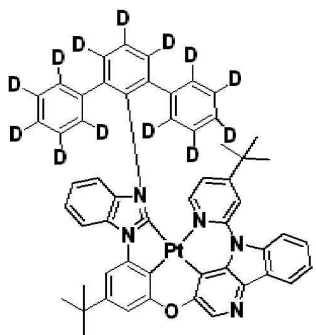
94



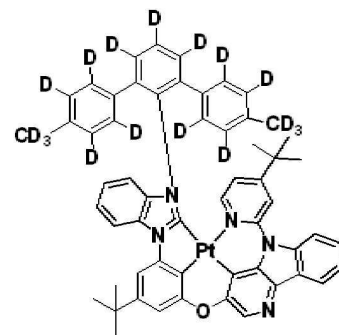
95



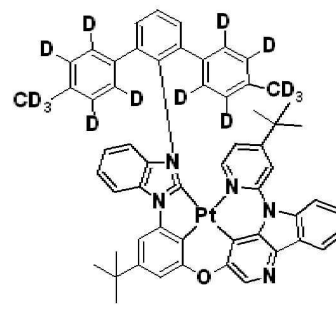
96



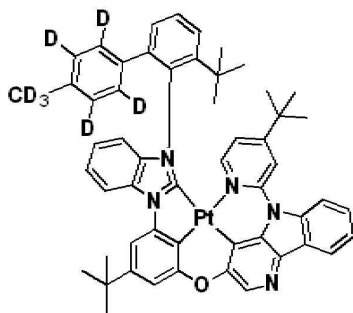
97



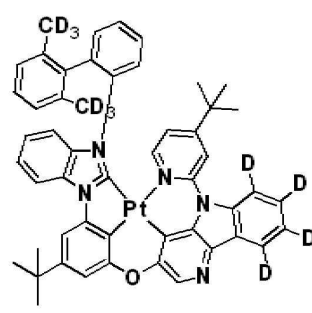
98



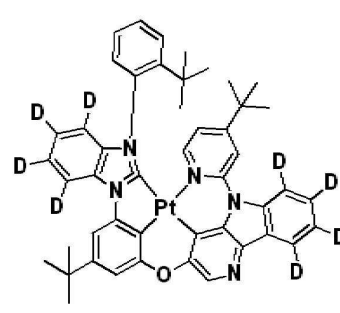
99



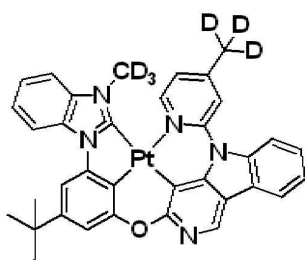
100



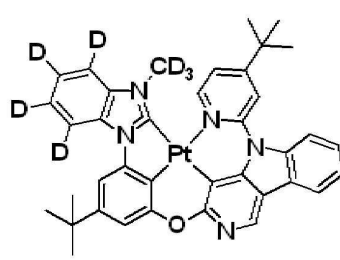
101



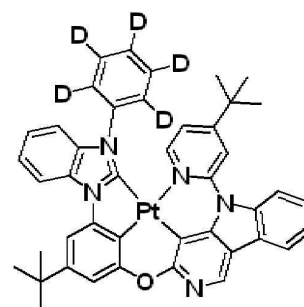
102



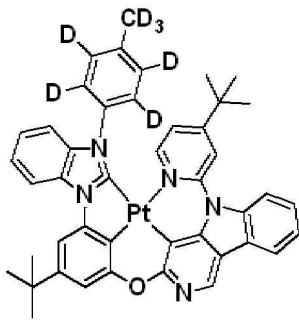
103



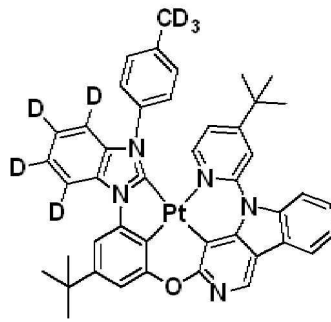
104



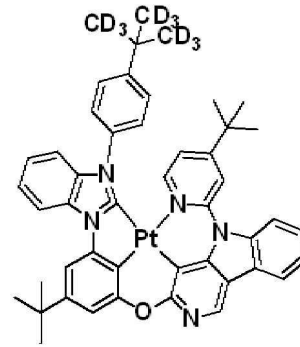
105



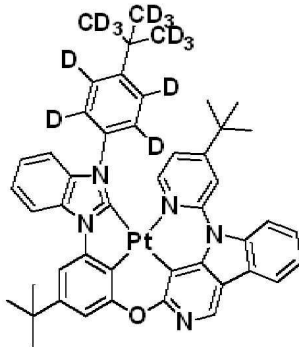
106



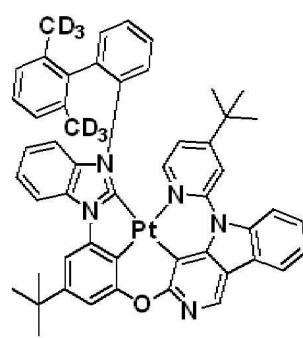
107



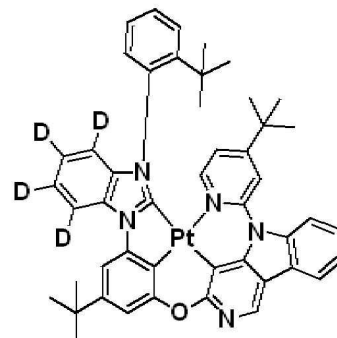
108



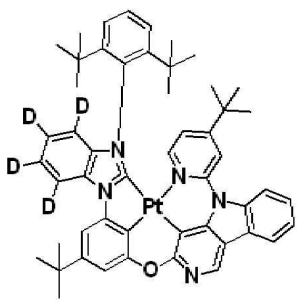
109



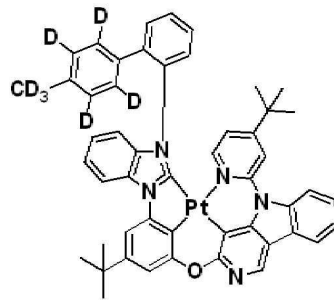
110



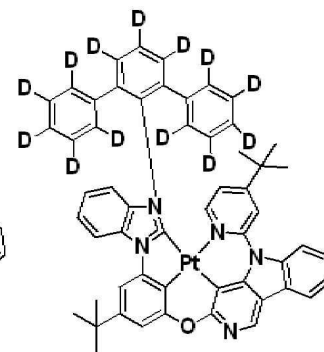
111



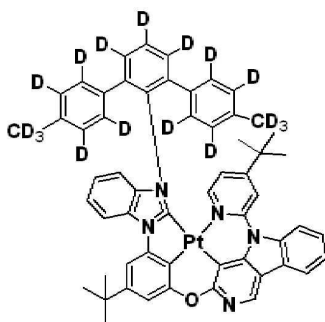
112



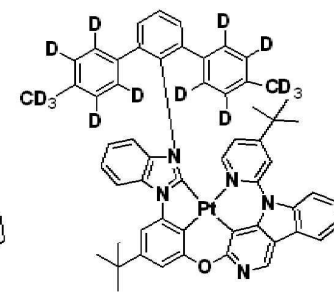
113



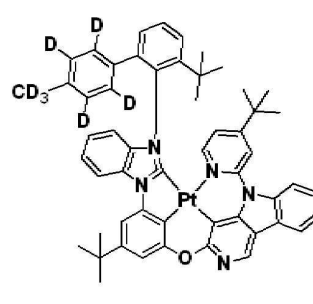
114



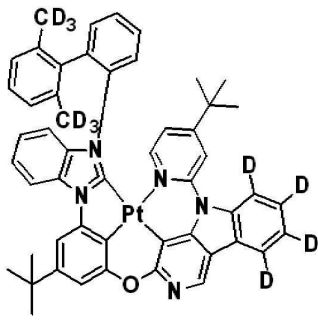
115



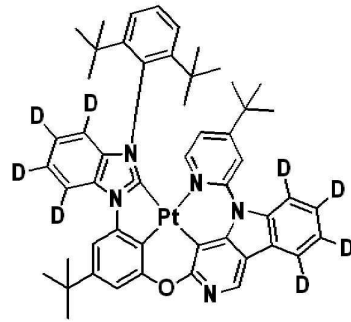
116



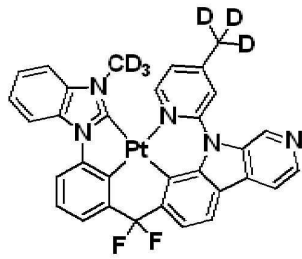
117



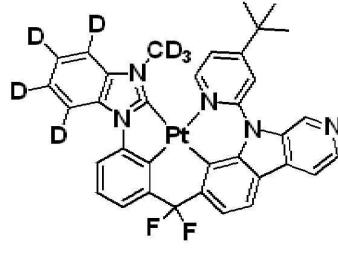
118



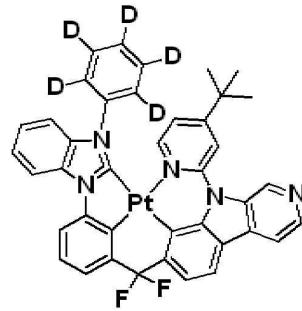
119



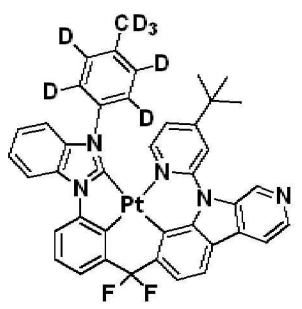
120



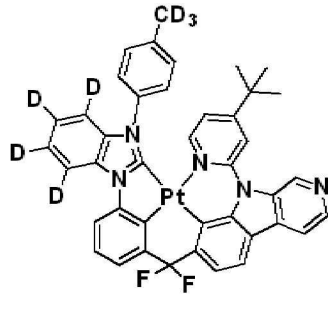
121



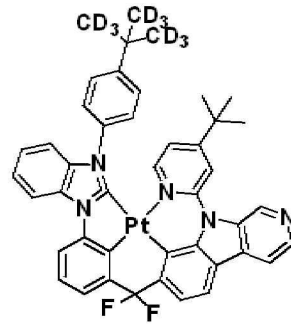
122



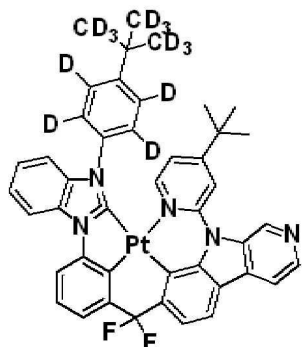
123



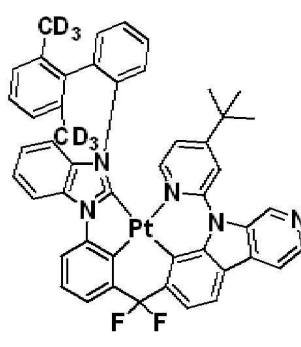
124



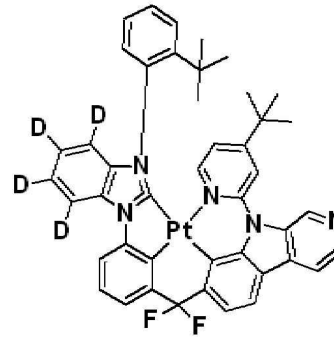
125



126

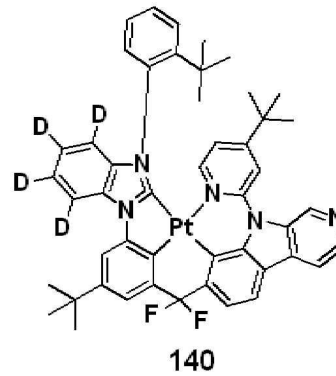
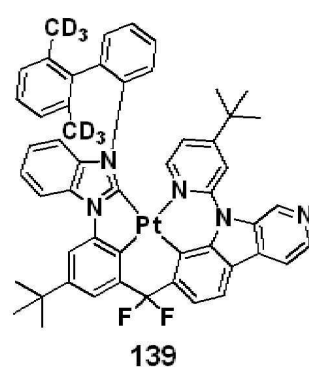
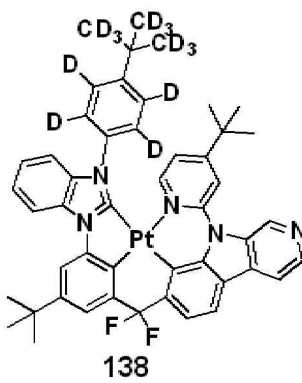
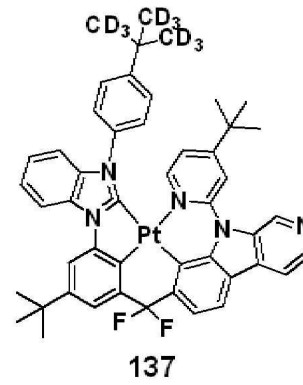
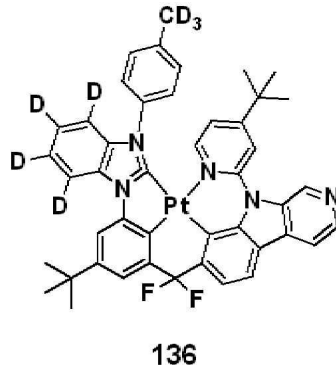
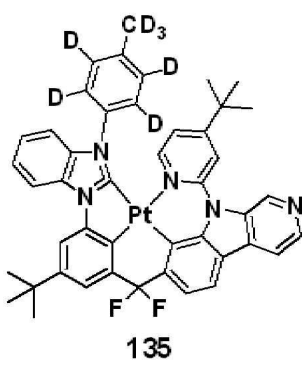
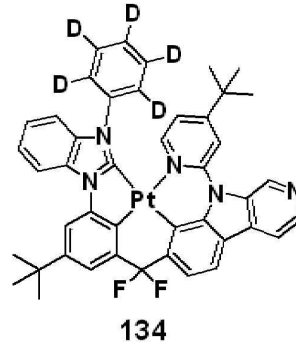
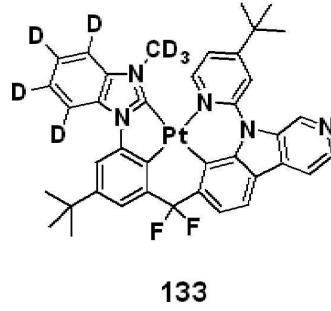
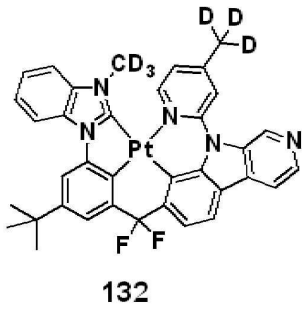
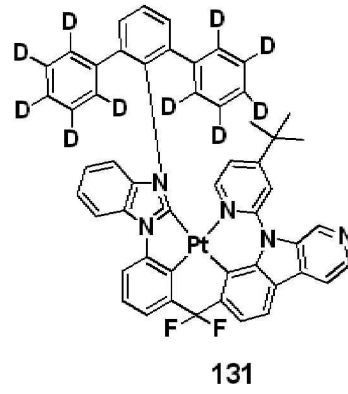
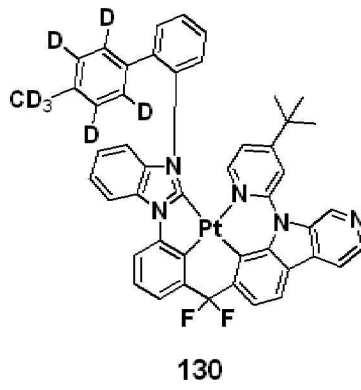
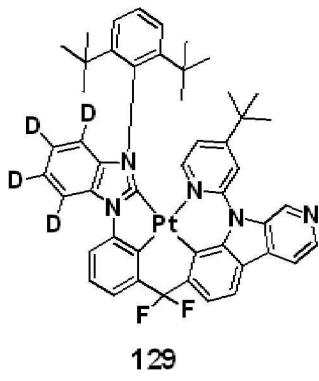


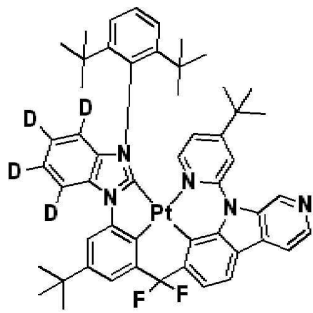
127



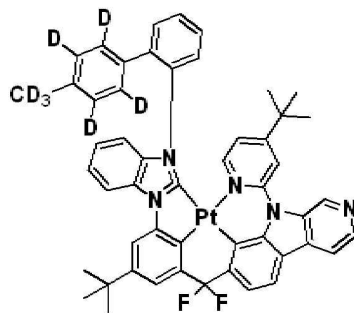
128



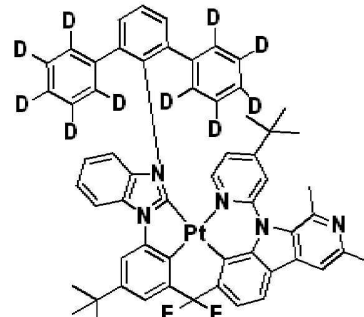




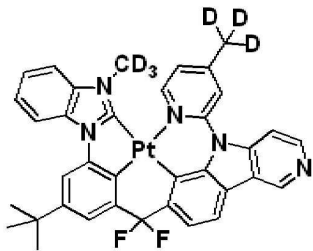
141



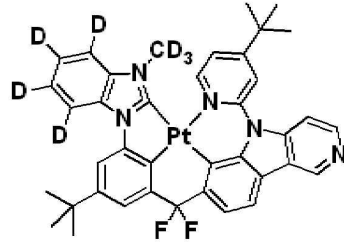
142



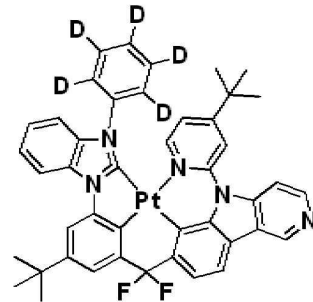
143



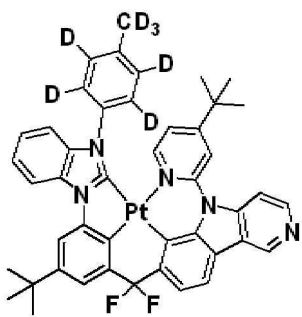
144



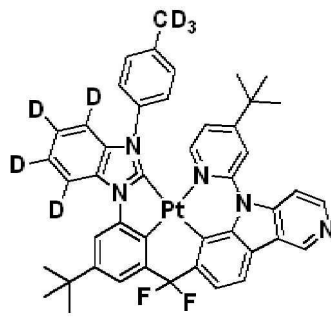
145



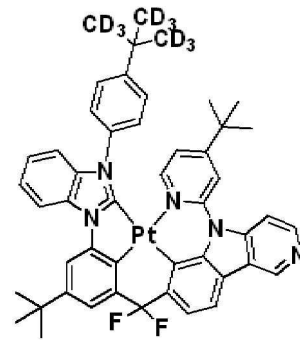
146



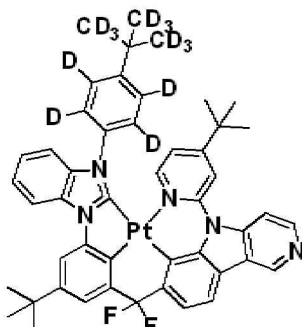
147



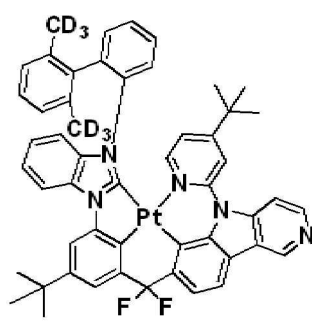
148



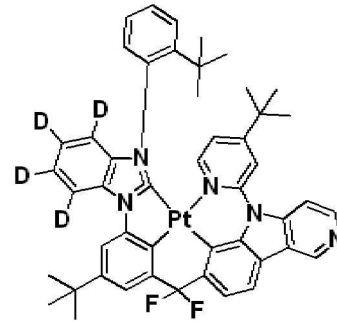
149



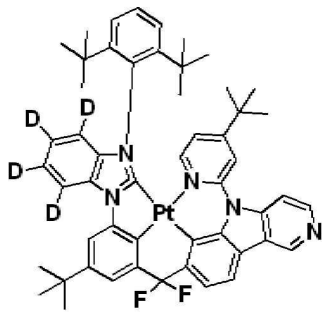
150



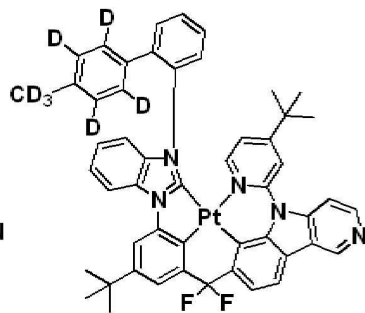
151



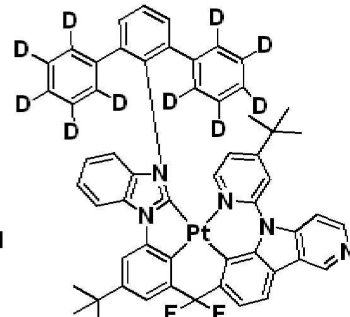
152



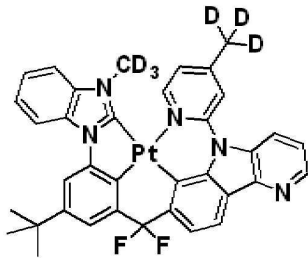
153



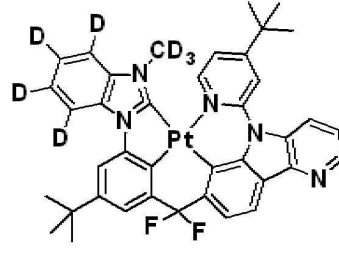
154



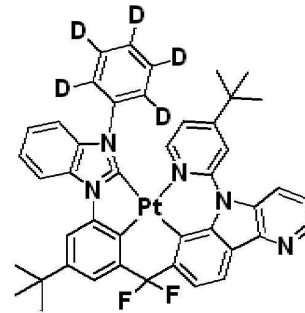
155



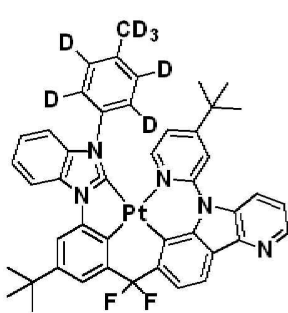
156



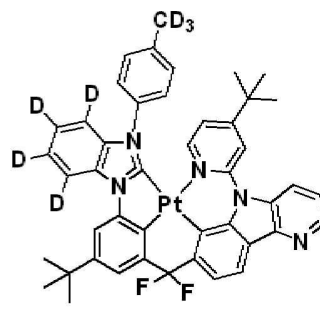
157



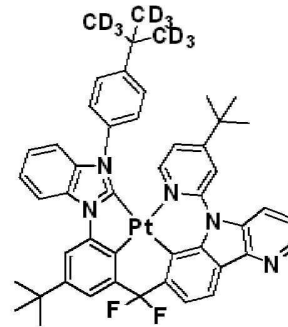
158



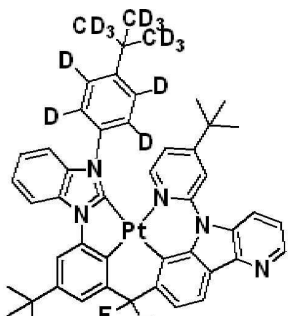
159



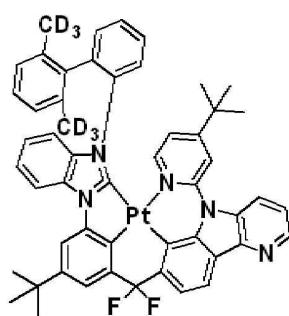
160



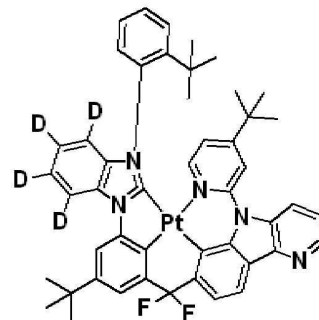
161



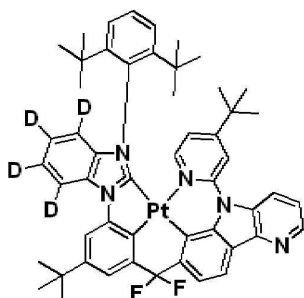
162



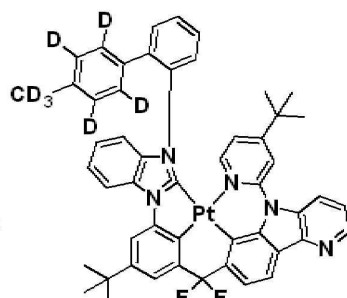
163



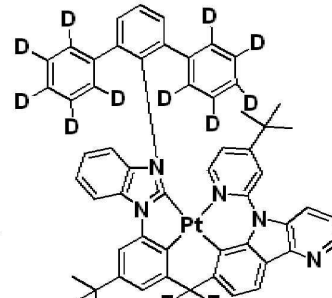
164



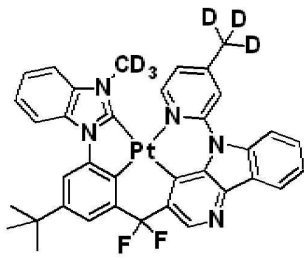
165



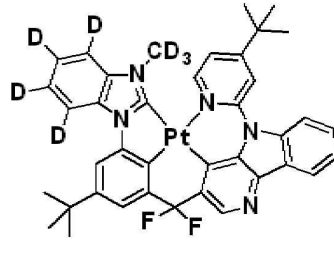
166



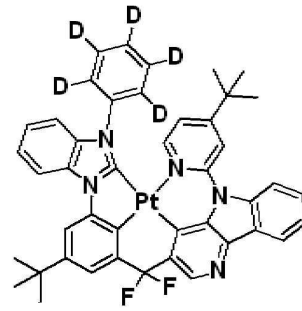
167



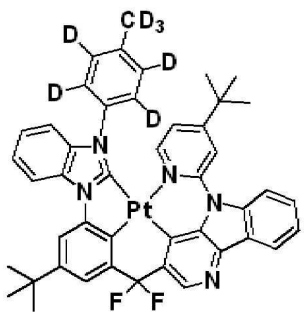
168



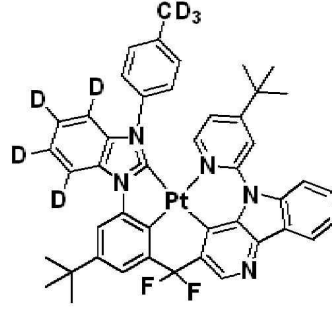
169



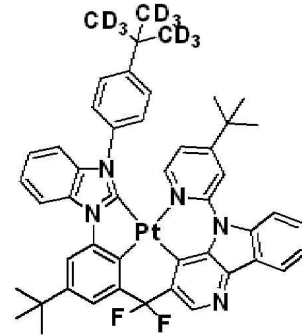
170



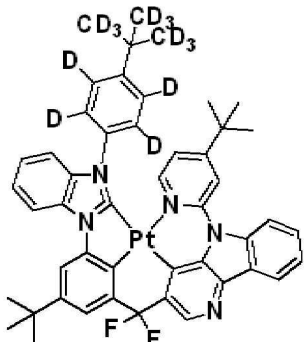
171



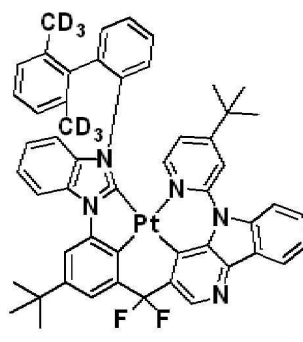
172



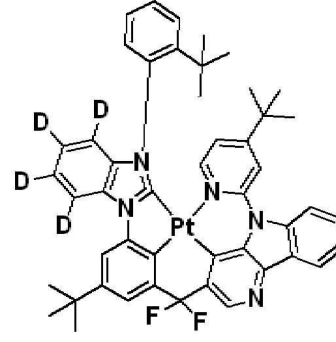
173



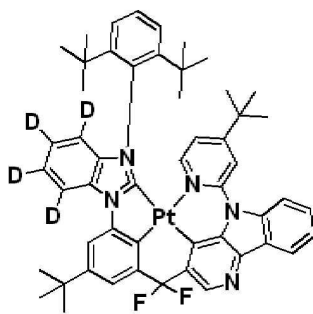
174



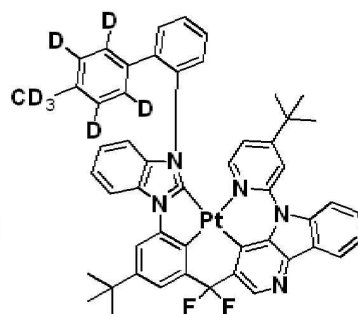
175



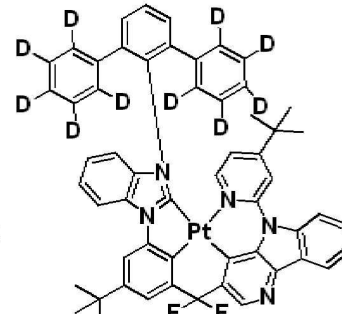
176



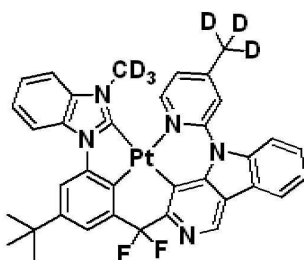
177



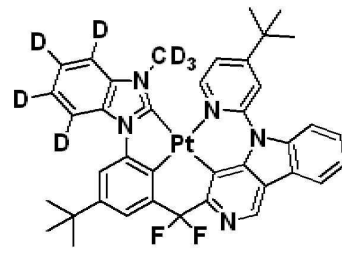
178



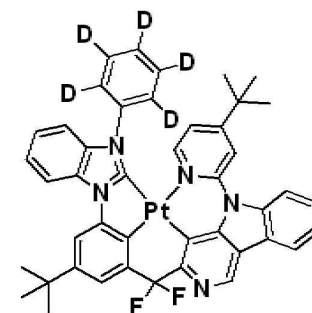
179



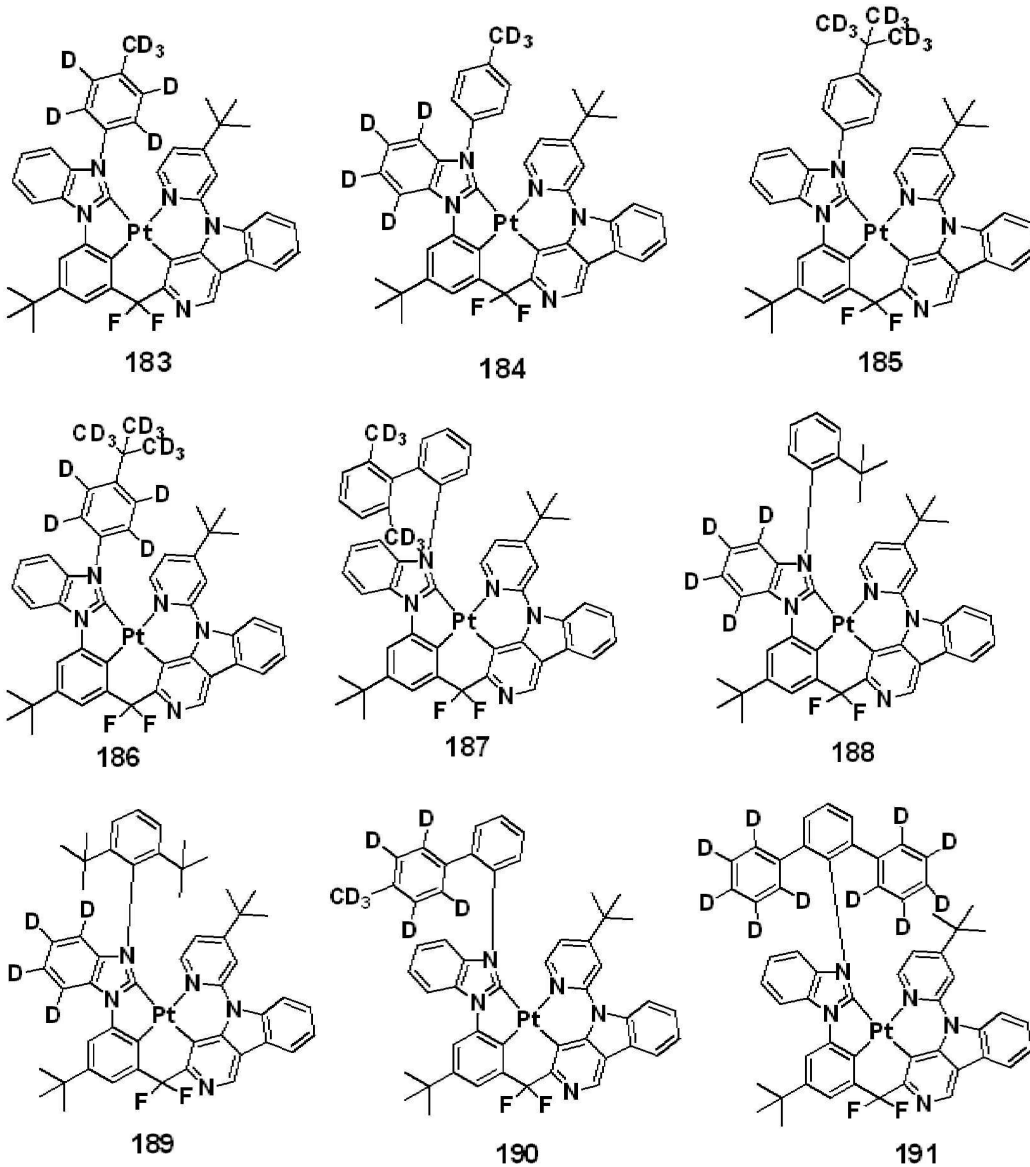
180



181



182



- [0132] 화합물군 1에서 제시된 구체에 화합물들에서, "D"는 중수소 원자에 해당한다.
- [0133] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 카볼린기 및 중수소 원자를 포함하는 일 실시예의 유기 금속 화합물을 포함하여 개선된 발광 효율 특성을 나타낼 수 있다. 일 실시예의 유기 금속 화합물은 카볼린기 및 중수소 원자를 포함하여 향상된 <sup>3</sup>MLCT 비율을 나타낼 수 있다.
- [0134] 한편, 도 1 내지 도 4에 도시된 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 도펀트 재료로 포함할 수 있다.
- [0135] 일 실시예에서 발광층(EML)은 인광 발광하는 것일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 일 실시예에 따른 유기 금속 화합물은 인광 도펀트일 수 있다.
- [0136] 한편, 발광층(EML)은 상술한 일 실시예의 유기 금속 화합물 이외에 호스트 물질을 더 포함할 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 호스트 물질로 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, DPEPO(Bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide), CBP(4,4'-Bis(carbazol-9-yl)biphenyl), mCP(1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzene), PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzo[b,d]furan), TCTA(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine) 및 TPBi(1,3,5-tris(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole-2-yl)benzene) 중 적어도 하나를 포함하는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 예를 들어, Alq<sub>3</sub>(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(n-vinylcarbazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TCTA(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), TBADN(3-tert-butyl-9,10-

di(naphth-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazolyl)-2,2'-dimethylbiphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), CPI(Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH<sub>2</sub> (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO<sub>3</sub> (Hexaphenylcyclotrisiloxane), DPSiO<sub>4</sub> (Octaphenylcyclo tetrasiloxane), PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran), BCPDS(bis(4-(9H-carbazol-9-yl)phenyl)diphenylsilane), POPCPA((4-(1-(4-(diphenylamino)phenyl)cyclohexyl)phenyl)diphenylphosphine oxide) 등을 호스트 재료로 사용할 수 있다.

[0137] 또한, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)은 상술한 유기 금속 화합물 이외에 공지의 도펀트 재료를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)은 공지의 형광 도펀트 재료, 공지의 지연형광 도펀트 재료, 또는 공지의 인광 도펀트 재료를 더 포함할 수 있다.

[0138] 한편, 도면에 도시되지는 않았으나 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 복수의 발광층들을 포함하는 것일 수 있다. 복수의 발광층들은 순차적으로 적층되어 제공되는 것일 수 있으며, 예를 들어 복수의 발광층들을 포함하는 유기 전계 발광 소자(10)는 백색광을 방출하는 것일 수 있다. 복수의 발광층들을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 탠덤(Tandem) 구조의 유기 전계 발광 소자일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 복수의 발광층들을 포함하는 경우 적어도 하나의 발광층(EML)은 상술한 바와 같이 일 실시예의 유기 금속 화합물을 포함할 수 있다.

[0139] 도 1 내지 도 4에 도시된 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서, 전자 수송 영역(ETR)은 발광층(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 정공 저지층(HBL), 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0140] 전자 수송 영역(ETR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0141] 예를 들어, 전자 수송 영역(ETR)은 전자 주입층(EIL) 또는 전자 수송층(ETL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 전자 주입 물질과 전자 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 전자 수송 영역(ETR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 발광층(EML)으로부터 차례로 적층된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층(HBL)/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

[0142] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0143] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 안트라센계 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니며, 전자 수송 영역은 예를 들어, Alq<sub>3</sub>(Tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, 2-(4-(N-phenylbenzimidazol-1-yl)phenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzene), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq<sub>2</sub>(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), BmPyPhB(1,3-Bis[3,5-di(pyridin-3-yl)phenyl]benzene) 및 이들의 혼합물을 포함하는 것일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0144] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, NaCl, CsF, RbCl, RbI와 같은 할로젠화 금속, Yb와 같은 란타넘족 금속, Li<sub>2</sub>O, BaO 와 같은 금속 산화물, 또는 Liq(Lithium quinolate) 등이 사용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭(energy band

gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0145] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층(HBL)을 포함할 수 있다. 정공 저지층(HBL)은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 및 Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0146] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 공통 전극 또는 캐소드(cathode)일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)이 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.

[0147] 제2 전극(EL2)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들을 포함하는 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.

[0148] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)이 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소시킬 수 있다.

[0149] 한편, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 제2 전극(EL2) 상에는 캡핑층(CPL)이 더 배치될 수 있다. 캡핑층(CPL)은 예를 들어, α-NPD, NPB, TPD, m-MTDATA, Alq3, CuPc, TPD15(N4,N4,N4',N4'-tetra (biphenyl-4-yl) biphenyl-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"- Tris (carbazol-9-yl) triphenylamine), N, N'-bis (naphthalen-1-yl) 등을 포함하는 것일 수 있다.

[0150] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 상술한 바와 같이 카보린기 및 중수소 원자를 포함하는 유기 금속 화합물을 발광층(EML)에 포함하여 우수한 발광 효율 특성을 나타낼 수 있다.

[0151] 이하에서는, 실시예 및 비교예를 참조하면서, 본 발명의 일 실시 형태에 따른 유기 금속 화합물 및 일 실시예의 유기 전계 발광 소자에 대해서 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 나타내는 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 일 예시이며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0152] [실시예]

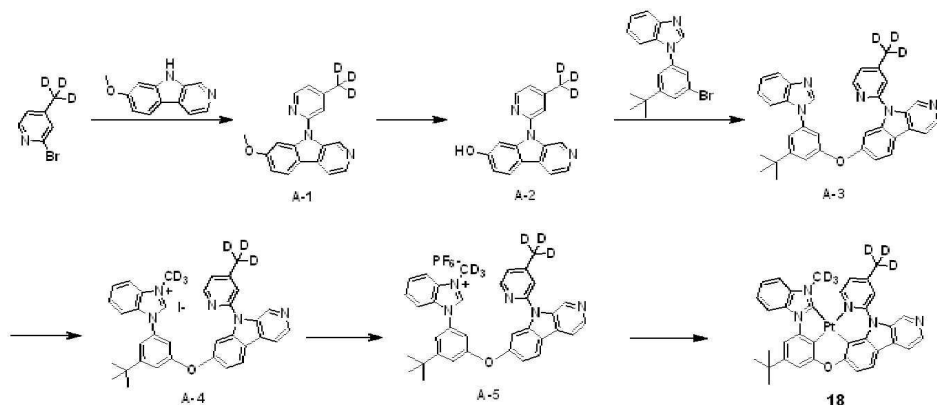
[0153] 1. 유기 금속 화합물의 합성

[0154] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 금속 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 금속 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0155] (1) 유기 금속 화합물 18의 합성

[0156] 일 실시예에 따른 유기 금속 화합물 18은 예를 들어 하기 반응식 1의 단계에 의해 합성될 수 있다.

[0157] [반응식 1]



[0158]

[0159] (중간체 A-1의 합성)

[0160] 7-메톡시-9H-피리도[3,4-b]인돌 9.91g (50mmol)과 2-브로모-4-(메틸-d3)피리딘 13.1g (75mmol), 삼인삼칼륨 23g (100mmol), CuI 1.83g (10mmol), 피콜린산 1.17g (10mmol)을 반응용기에 넣고 디메틸술폭시드 150mL 에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 가온하여 160℃에서 24시간 교반하였다. 반응 종결 후 상온으로 식히고 300mL 증류수를 가하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 추출된 유기층을 포화염화나트륨 수용액으로 세척하고 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 13.1g (45mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0161] (중간체 A-2의 합성)

[0162] 중간체 [A-1] 13.1g (45mmol)을 과량의 브롬산 용액에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 가온하여 110℃에서 24시간 교반하였다. 반응 종결 후 상온으로 식히고 적정량의 탄산수소나트륨을 가하여 중화시켰다. 300mL 증류수를 가하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 추출된 유기층을 포화염화나트륨 수용액으로 세척하고 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 9.56g (35mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0163] (중간체 A-3의 합성)

[0164] 1-(3-브로모-5-t-부틸)페닐)1H-벤조[d]이미다졸 14.2g (43mmol), 중간체 [A-2] 9.1g (35mmol), 삼인삼칼륨 16.2g (70mmol), CuI 1.3g (7.0mmol), 피콜린산 0.8g (7.0mmol)을 반응용기에 넣고 디메틸술폭시드 100mL에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 가온하여 160℃에서 24시간 교반하였다. 반응 종결 후 상온으로 식히고 300mL 증류수를 가하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 추출된 유기층을 포화염화나트륨 수용액으로 세척하고 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 13.4g (26mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0165] (중간체 A-4의 합성)

[0166] 중간체 [A-3] 13.4g (26mmol)을 과량의 요오드화메탄에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 가온하여 110℃에서 24시간 교반하였다. 반응 종결 후 상온으로 식히고 생성된 고체를 필터하여 에테르로 세척하였다. 세척된 고체를 재결정 이용하여 분리하여 14.8g (22mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0167] (중간체 A-5의 합성)

[0168] 중간체 [A-4] 14.8g (22mmol)과 헥사플루오로인산암모늄 14.6g (88mmol)을 반응용기에 넣고 메틸알코올 240mL 와 물 60mL의 혼합용액에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 상온에서 24시간 교반하였다. 반응 종결 후 생성된 고체를 필터하여 에테르로 세척하였다. 세척된 고체를 건조하여 12.4g (18 mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0169] (화합물 18의 합성)

[0170] 중간체 [A-5] 6.2g (9mmol)과 Dichloro(1,5-cyclooctadiene)platinum 3.7g (9.9mmol), 초산나트륨 4.4g (54mmol)을 디옥산 140ml에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 가온하여 110℃에서 72시간 교반하였다. 반응 종결 후 상온으로 식히고 100ml의 증류수를 가하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 추출된 유기층을 포화염화나트륨 수용액으로 세척하고 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하

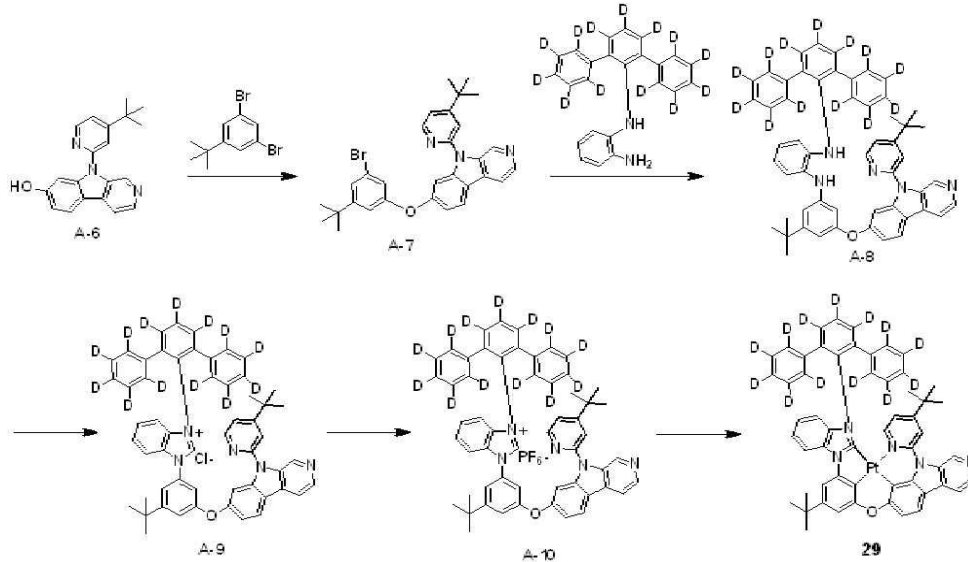


여 1.77g (2.4 mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0171] (2) 유기 금속 화합물 29의 합성

[0172] 일 실시예에 따른 화합물 29는 예를 들어 하기 반응식 2의 단계에 의해 합성될 수 있다.

[0173] [반응식 2]



[0174] (중간체 A-6의 합성)

[0175] 2-브로모-4-(메틸-d3)피리딘 대신 2-브로모-4-(t-부틸)피리딘을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 18의 중간체 A-2와 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

[0176] (중간체 A-7의 합성)

[0177] 중간체 [A-2] 대신, 중간체 [A-6]을 사용하고, 1-(3-브로모-5-t-부틸)페닐 1H-벤조[d]이미다졸 대신 1,3-디브로모-5-(t-부틸)벤젠을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 18의 중간체 A-3와 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

[0178] (중간체 A-8의 합성)

[0179] 중간체 [A-7] 5.28g (10mmol)과 N-([1,1':3,1"-터페닐]-2"-닐-d13)벤젠-1,2-디아민 3.84 g (11mmol), SPhos (0.75mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (0.5mmol), 소듐 t-부톡시드 (20mmol)을 톨루엔 용매 100ml로 현탁하고 100 °C로 승온하여 5시간동안 교반하였다. 반응 종결 후 감압하여 용매를 제거하고, 염화메틸렌과 증류수로 추출하였다. 추출된 유기층을 포화염화나트륨 수용액으로 세척하고 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 6.06g (7.6 mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0180] (중간체 A-9의 합성)

[0181] 중간체 [A-8] 6.06g (7.6 mmol) 1 mmol을 트리에틸오소포메이트 380 mmol 에 녹인 후, HCl 9.12mmol을 적가한다. 100 °C로 승온하여 20시간동안 교반하였다. 반응 종결 후 감압하여 용매를 제거하고, 염화메틸렌과 증류수로 추출하였다. 추출된 유기층을 포화염화나트륨 수용액으로 세척하고 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 4.98g (5.9 mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0182] (중간체 A-10의 합성)

[0183] 중간체 [A-4] 대신 중간체 [A-9]를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 18의 중간체 [A-5]와 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

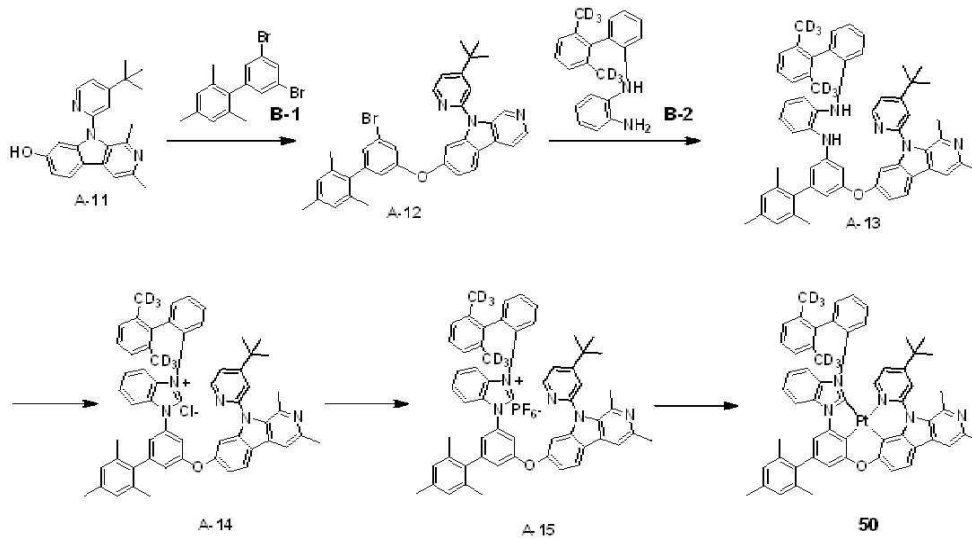
[0184] (화합물 29의 합성)

[0185] 중간체 [A-5] 대신 중간체 [A-10]를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 18과 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

[0187] (3) 유기 금속 화합물 50의 합성

[0188] 일 실시예에 따른 유기 금속 화합물 50은 예를 들어 하기 반응식 3의 단계에 의해 합성될 수 있다.

[0189] [반응식 3]



[0190]

[0191] (중간체 A-11의 합성)

[0192] 7-메톡시-9H-피리도[3,4-b]인돌 대신 7-메톡시-1,3-디메틸-9H-피리도[3,4-b]인돌 을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-6]과 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

[0193] (중간체 A-12의 합성)

[0194] 중간체 [A-6] 대신 중간체 [A-11]을 사용하고, 1,3-디브로모-5-(t-부틸)벤젠 대신 중간체 [B-1]을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-7]과 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

[0195] (중간체 A-13의 합성)

[0196] 중간체 [A-7] 대신 중간체 [A-12]을 사용하고, N-([1,1':3,1''-터페닐]-2'-닐-d13)벤젠-1,2-디아민 대신 중간체 [B-2]을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 A-8과 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

[0197] (중간체 A-14의 합성)

[0198] 중간체 [A-8] 대신 중간체 [A-13]을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-9]와 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

[0199] (중간체 A-15의 합성)

[0200] 중간체 [A-9] 대신 중간체 [A-14]를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-10]와 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물을 수득하였다.

[0201] (화합물 50의 합성)

[0202] 중간체 [A-10] 대신 중간체 [A-15]를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29와 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물인 유기 금속 화합물 50을 수득하였다.

[0203] (4) 유기 금속 화합물 79의 합성

[0204] 7-메톡시-9H-피리도[3,4-b]인돌 대신 7-메톡시-5H-피리도[3,4-b]인돌을 사용하고, N-([1,1':3,1''-터페닐]-2'-닐-d13)벤젠-1,2-디아민 대신 N<sup>1</sup>-(4'-(메틸-d3)-[1,1'[디페닐]-2'-닐-2',3',5',6'-d4]벤젠-1,2-디아민을 사용하는 것을 제외하고는 상기 화합물 29의 합성과 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물인 유기 금속 화합물 79를 수득하였다.

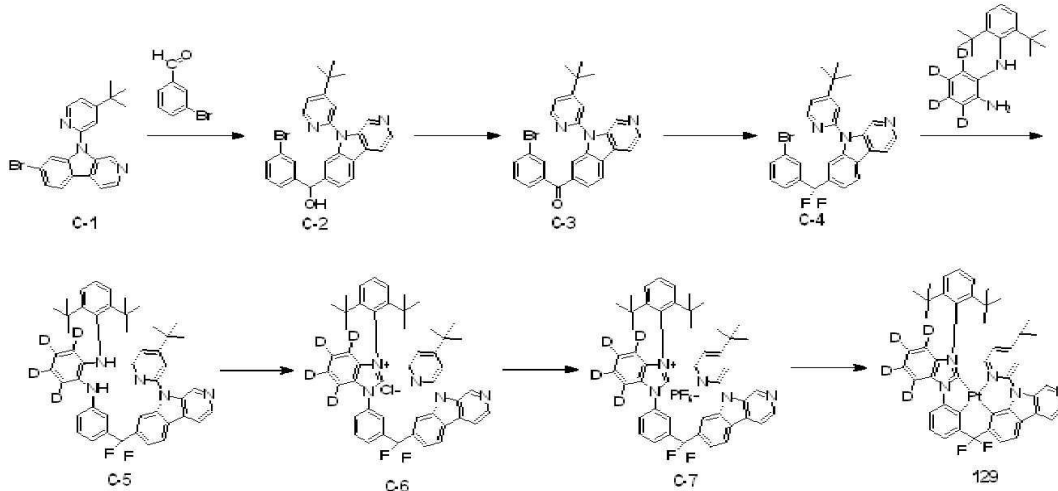
[0205] (5) 유기 금속 화합물 119의 합성

[0206] 7-메톡시-9H-피리도[3,4-b]인돌 대신 3-메톡시-5H-피리도[4,3-b]인돌-6,7,8,9-d<sub>4</sub> 를 사용하고, N-([1,1':3,1''-터페닐]-2'-닐-d<sub>13</sub>)벤젠-1,2-디아민 대신 N<sup>1</sup>-(2,6-디-t-부틸페닐)벤젠-d<sub>8</sub>-1,2-디아민을 사용한 것을 제외하고는 상기 화합물 29의 합성과 동일한 방법을 이용하여 목적 화합물인 유기 금속 화합물 119를 수득하였다.

[0207] (6) 유기 금속 화합물 129의 합성

[0208] 일 실시예에 따른 유기 금속 화합물 129는 예를 들어 하기 반응식 4의 단계에 의해 합성될 수 있다.

[0209] [반응식 4]



[0210]

[0211] (중간체 C-1의 합성)

[0212] 7-브로모-9H-피리도[3,4-b]인돌 12.35g (50mmol)과 2-브로모-4-(t-부틸)피리딘을 16.06g (75mmol), 삼인삼칼륨 23g (100 mmol), CuI 1.83g (10mmol), 피콜린산 1.17g (10mmol)을 반응 용기에 넣고 디메틸술폭시드 150mL 에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 가온하여 160℃에서 24시간 교반하였다. 반응 종결 후 상온으로 식히고 300mL 증류수를 가하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 추출된 유기층을 포화염화나트륨 수용액으로 세척하고 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 14.45g (38 mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0213] (중간체 C-2의 합성)

[0214] 중간체 [C-1] 14.45 g (38 mmol)을 THF 500 mL에 녹인 후, -78℃에서 노르말 부틸리튬 41.8 mmol (2.5M in Hexane)을 천천히 첨가하였다. 한 시간 후 0℃에서 3-브로모벤즈알데히드 10.5 g (57 mmol)을 첨가하였다. 2시간 동안 교반한 후 암모늄 클로라이드를 첨가하고 디에틸에테르 (30 mL)로 3회 세척하였다. 세척된 디에틸에테르층을 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 10.7 g (22 mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0215] (중간체 C-3의 합성)

[0216] 중간체 [C-2] 10.7 g (22 mmol) 을 디메클로라이드에 녹인 후, DDQ 14.9 g (66 mmol) 을 첨가한 후, 실온에서 12시간 동안 교반한다. 반응 종결 후 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 8.72 g (18 mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0217] (중간체 C-4의 합성)

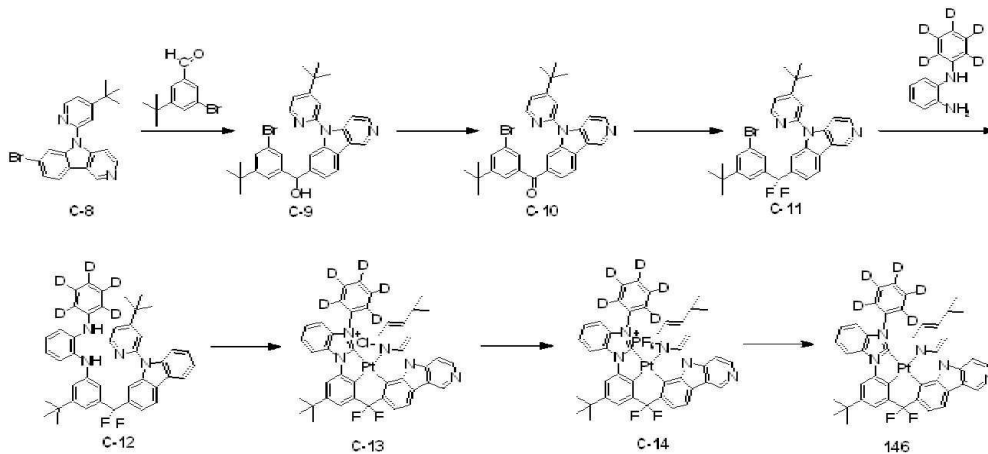
[0218] 중간체 [C-3] 8.72 g (18 mmol) 을 질소 조건하에서 디메클로라이드에 녹인 후, HF-피리딘 18 mL를 첨가한 후, 50℃ 에서 24시간 동안 교반한다. 반응 종결 후 용매를 제거한 잔여물에 디에틸에테르를 첨가한 후, 중탄산나트륨 용액으로 세척하였다. 세척된 디에틸에테르층을 소듐설페이트로 건조하였다. 용매를 제거한 잔여물을 핵산 하에서 교반한 후, 재결정을 통해 8.6 g (17 mmol) 목적 화합물을 수득하였다.

[0219] (중간체 C-5의 합성)

[0220] 중간체 [A-7] 대신 중간체 [C-4]을 사용하고, N-([1,1':3,1''-터페닐]-2'-닐-d<sub>13</sub>)벤젠-1,2-디아민 대신 N<sup>1</sup>-

(2,6-디-*t*-부틸페닐)벤젠-디4-1,2-디아민 을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 A-8과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.

- [0221] (중간체 C-6의 합성)
- [0222] 중간체 [A-8] 대신 중간체 [C-5]을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-9]와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.
- [0223] (중간체 C-7의 합성)
- [0224] 중간체 [A-9] 대신 중간체 [C-6]를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-10]와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.
- [0225] (화합물 129의 합성)
- [0226] 중간체 [A-10] 대신 중간체 [C-7]를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물인 유기 금속 화합물 129를 수득하였다.
- [0227] (7) 유기 금속 화합물 146의 합성
- [0228] 일 실시예에 따른 유기 금속 화합물 146은 예를 들어 하기 반응식 5의 단계에 의해 합성될 수 있다.
- [0229] [반응식 5]



- [0230] (중간체 C-8의 합성)
- [0231] 7-브로모-9H-피리도[3,4-b]인돌 대신 7-브로모-5H-피리도[4,3-b]인돌, 3-브로모벤즈알데히드 대신 3-브로모-5-(*t*-부틸)벤즈알데히드 를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 129의 중간체 [C-1]과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.
- [0232] (중간체 C-9의 합성)
- [0233] 중간체 [C-1] 대신 중간체 [C-8]을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 129의 중간체 [C-2]과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.
- [0234] (중간체 C-10의 합성)
- [0235] 중간체 [C-2] 대신 중간체 [C-9]을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 129의 중간체 [C-3]과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.
- [0236] (중간체 C-11의 합성)
- [0237] 중간체 [C-3] 대신 중간체 [C-10]을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 129의 중간체 [C-4]과 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.
- [0238] (중간체 C-12의 합성)
- [0239] 중간체 [A-7] 대신 중간체 [C-11]을 사용하고, N-([1,1':3,1''-터페닐]-2'-닐-d13)벤젠-1,2-디아민 대신 N<sup>1</sup>-(페닐-디5)벤젠-1,2-디아민 을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-8]과 동일한 방법을 이용하

여 목적화합물을 수득하였다.

- [0241] (중간체 C-13의 합성)
- [0242] 중간체 [A-8] 대신 중간체 [C-12]을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-9]와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.
- [0243] (중간체 C-14의 합성)
- [0244] 중간체 [A-9] 대신 중간체 [C-13]를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29의 중간체 [A-10]와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물을 수득하였다.
- [0245] (화합물 146의 합성)
- [0246] 중간체 [A-10] 대신 중간체 [C-14]를 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 29와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물인 유기 금속 화합물 146을 수득하였다.
- [0247] (8) 유기 금속 화합물 155의 합성
- [0248] N<sup>1</sup>-(페닐-디5)벤젠-1,2-디아민 대신 N<sup>1</sup>-([1,1':3',1''-터페닐]-2'-닐-2,2'',3,3'',4,4'',5,5'',6,6''-d10)벤젠-1,2-디아민 을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 146와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물인 유기 금속 화합물 155를 수득하였다.
- [0249] (9) 유기 금속 화합물 167의 합성
- [0250] 7-브로모-5H-피리도[4,3-b]인돌 대신 7-브로모-5H-피리도[3,2-b]인돌 을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 155와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물인 유기 금속 화합물 167을 수득하였다.
- [0251] (10) 유기 금속 화합물 191의 합성
- [0252] 7-브로모-5H-피리도[4,3-b]인돌 대신 3-브로모-5H-피리도[4,3-b]인돌 을 사용하는 것을 제외하고는 상기 합성에 155와 동일한 방법을 이용하여 목적화합물인 유기 금속 화합물 191을 수득하였다.
- [0253] 상기 합성예에서 합성된 화합물들의 <sup>1</sup>H NMR 및 MS/FAB을 하기 표 1에 나타내었다. 표 1에 나타난 화합물 이외의 다른 화합물들도 위의 합성 경로 및 원료 물질을 참조하여 기술 분야에 숙련된 이들이 그 합성 방법을 용이하게 인식할 수 있다.

**표 1**

구분	<sup>1</sup> H NMR (CDC1 <sub>3</sub> , 400 MHz)	MS/FAB	
		found	calc.
화합물 18	δ 8.87(s, 1H), 8.74(d, 1H), 8.39(m, 2H), 7.43~7.38(m, 5H), 7.12~7.08(m, 2H), 6.71~6.69(m, 3H), 1.32(s, 9H)	736.2397	736.2396
화합물 29	δ 8.87(s, 1H), 8.73(d, 1H), 8.42~8.39(m, 2H), 7.41~7.38(m, 3H), 7.14~7.12(m, 3H), 6.95~6.94(m, 2H), 6.70~6.68(m, 2H), 1.35(s, 9H), 1.32(s, 9H)	999.4086	999.4088
화합물 50	δ 8.74(d, 1H), 8.39(d, 1H), 8.10(m, 1H), 7.53(m, 1H), 7.39~7.33(m, 7H), 7.15~7.13(m, 3H), 7.01~6.99(m, 6H), 6.69(d, 1H), 2.92(s, 6H), 2.89(s, 3H), 2.51(s, 3H), 2.48(s, 3H), 1.32(s, 9H)	1034.4117	1034.4118
화합물 79	δ 8.74(d, 1H), 8.42~8.39(m, 2H), 8.10(d, 1H), 7.97(d, 1H), 7.41~7.39(m, 4H), 7.22~7.13(m, 5H), 6.98~6.96(m, 2H), 6.70(s, 1H), 6.68(d, 1H), 1.35(s, 9H), 1.33(s, 9H)	931.3556	931.3555
화합물 119	δ 8.74(d, 1H), 7.46~7.44(m, 3H), 7.11~7.09(m, 3H), 6.987(d, 1H), 6.51(d, 1H), 1.37(s, 9H), 1.35(s, 9H), 1.32(s, 9H), 1.30(s, 9H)	954.4402	954.4400
화합물 129	δ 8.87(s, 1H), 8.74(d, 1H), 8.46~8.43(m, 2H), 7.46~7.38(m, 4H), 7.23~7.21(m, 2H), 7.01~6.99(m, 4H), 1.37(s, 18H), 1.32(s, 9H)	928.3540	928.3542
화합물 146	δ 9.32(s, 1H), 8.74(d, 1H), 8.46(d, 1H), 8.34(d, 1H), 7.51~7.41(m, 5H), 7.14~7.12(m, 2H), 7.05(s, 1H), 6.95~6.94(m, 2H), 1.41(s, 9H), 1.33(s, 9H)	873.2980	873.2979

화합물 155	$\delta$ 9.34(s, 1H), 8.74(d, 1H), 8.46(d, 1H), 8.35(m, 1H), 8.20(d, 2H), 7.51-7.43(m, 6H), 7.14-7.12(m, 2H), 7.06(s, 1H), 6.96-6.95(m, 2H), 1.42(s, 9H), 1.33(s, 9H)	1030.3916	1030.3918
화합물 167	$\delta$ 8.73(d, 1H), 8.46-8.44(m, 2H), 8.20(d, 2H), 7.97(d, 1H), 7.46-7.38(m, 5H), 7.21-7.14(m, 3H), 7.05(s, 1H), 6.96-6.95(m, 2H), 1.40(s, 9H), 1.32(s, 9H)	1030.3917	1030.3918
화합물 191	$\delta$ 8.74(d, 1H), 8.54(d, 1H), 8.38(s, 1H), 8.20(d, 2H), 7.94(d, 1H), 7.43-7.35(m, 5H), 7.17-7.14(m, 3H), 7.05(s, 1H), 6.96-6.95(m, 2H), 1.41(s, 9H), 1.32(s, 9H)	1030.3919	1030.3918

[0255]

2. 유기 금속 화합물의 특성 평가

[0256]

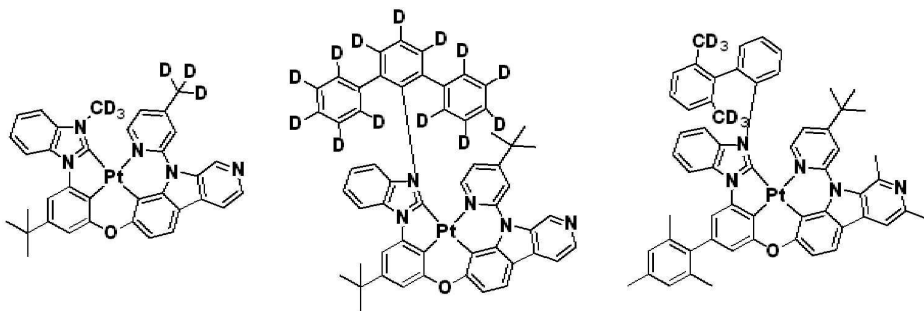
실시에 화합물 18, 29, 50, 79, 119, 129, 146, 155, 167, 191, 및 비교예 화합물 C1 내지 C3의 유기 금속 화합물의 발광 특성을 평가하여 하기 표 2에 나타내었다.

[0257]

실시에 화합물들과 비교예 화합물들은 아래와 같다.

[0258]

[실시에 화합물]

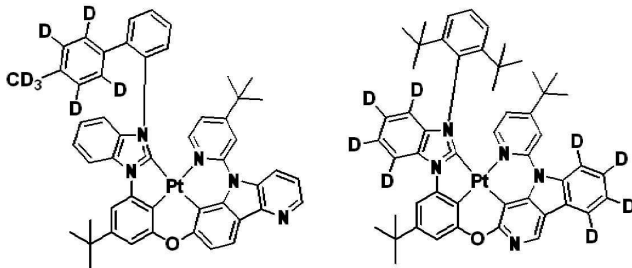


18

29

50

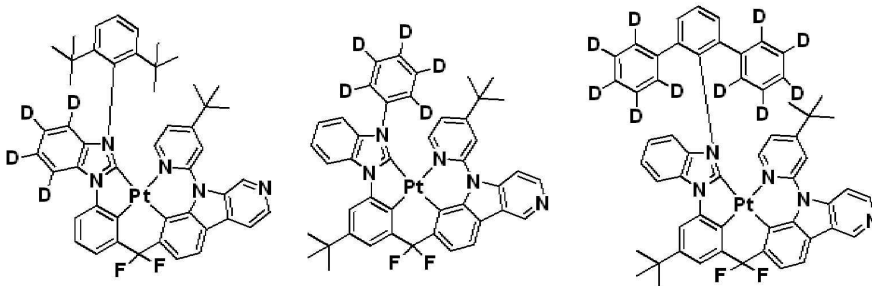
[0259]



79

119

[0260]

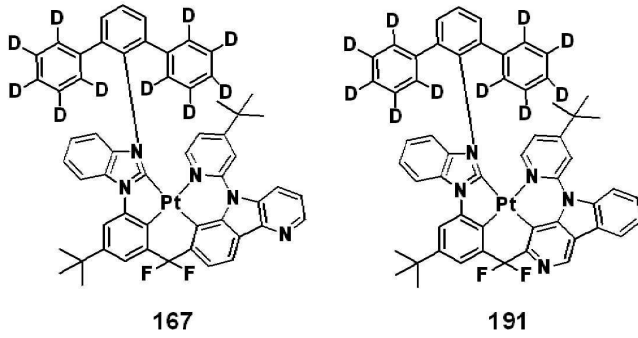


129

146

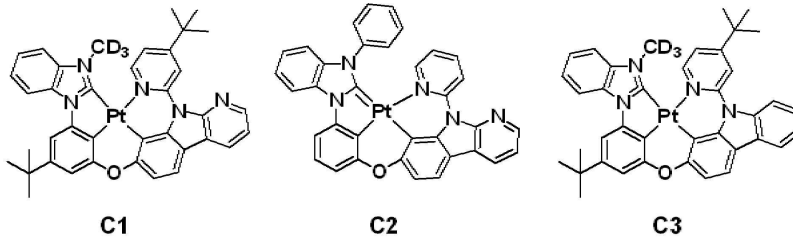
155

[0261]



[0262]

[0263] [비교예 화합물]



[0264]

표 2

[0265]

구분	T1 (nm)	T1 level (eV)	<sup>3</sup> MLCT (%)	<sup>3</sup> MC (eV)
유기 금속 화합물 18	459	2.70	13.4	0.56
유기 금속 화합물 29	453	2.73	14.6	0.81
유기 금속 화합물 50	456	2.72	13.3	0.68
유기 금속 화합물 79	460	2.70	15.0	0.66
유기 금속 화합물 119	455	2.72	13.2	0.75
유기 금속 화합물 129	459	2.70	17.4	0.78
유기 금속 화합물 146	448	2.82	18.5	0.75
유기 금속 화합물 155	447	2.83	21.0	0.86
유기 금속 화합물 167	463	2.68	17.5	0.71
유기 금속 화합물 191	450	2.80	19.4	0.82
비교예 화합물 C1	467	2.65	11.9	0.54
비교예 화합물 C2	466	2.65	12.3	0.55
비교예 화합물 C3	470	2.64	8.8	0.41

[0266]

표 2는 각각의 화합물에 대한 최저 삼중항 여기 에너지 준위(T1 level), <sup>3</sup>MLCT(Metal to Ligand Charge Transfer) 및 <sup>3</sup>MC (3 Metal Centered state) 에너지를 B3LYP DFT 계산 방법에 따라 양자 시뮬레이션하여 그 결과를 나타낸 것이다.

[0267]

표 2의 결과를 참조하면, 실시예 화합물인 유기 금속 화합물 18, 29, 50, 79, 119, 129, 146, 155, 167, 및 191은 비교예 화합물 C1 내지 C3과 비교하여 증가된 <sup>3</sup>MLCT(Metal to Ligand Charge Transfer) 값을 나타내고, 실시예의 유기 금속 화합물들은 비교예 화합물 C1 내지 C3과 비교하여 유사한 수준 또는 증가된 <sup>3</sup>MC (3 Metal Centered state) 값을 나타내는 것을 알 수 있다. 이에 따라, 실시예의 유기 금속 화합물들을 발광 소자에 적용하였을 때 비교예 화합물들을 적용한 경우에 비하여 개선된 소자 수명과 발광 효율 특성을 나타낼 것을 기대할 수 있다.

[0268]

또한, 실시예 화합물인 유기 금속 화합물 18, 29, 50, 79, 119, 129, 146, 155, 167 및 191은 비교예 화합물 C1 내지 C3과 비교하여 단파장을 갖는 것을 알 수 있다. 비교예 화합물 C1은 카볼린기의 X<sub>1</sub>만 질소 원자인 것으로, 즉 카볼린기의 α(alpha) 위치에만 질소 원자가 포함되어 실시예의 화합물들보다 긴 파장 값을 나타내는 것으로 판단된다. 비교예 화합물 C3은 카볼린기를 포함하지 않아, 실시예 화합물들 및 비교예 화합물 C1에 비해

긴 파장 값을 나타내는 것으로 판단된다.

[0269] 한편, 비교예 화합물 C1과 비교하여, 실시예 화합물 29 및 화합물 119는 중수소 원자 치환기를 복수로 포함하여 높은 <sup>3</sup>MC (3 Metal Centered state) 값을 나타내는 것으로 판단된다.

[0270] 3. 유기 전계 발광 소자의 제작 및 평가

[0271] (유기 전계 발광 소자의 제작)

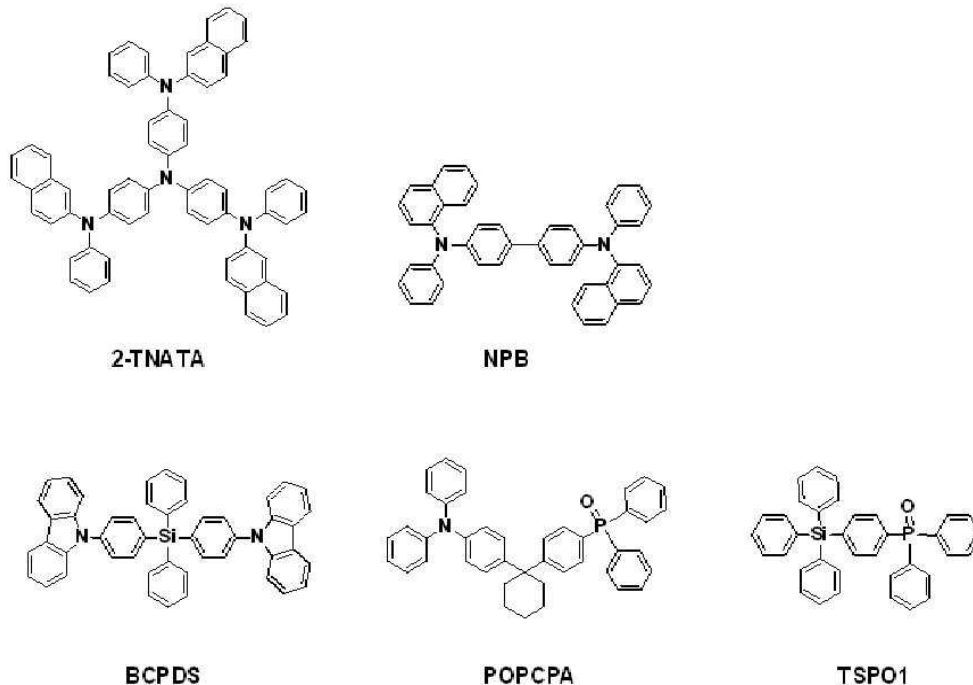
[0272] 일 실시예의 유기 금속 화합물을 발광층에 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자를 아래의 방법으로 제조하였다. 상술한 화합물 18, 29, 50, 79, 119, 129, 146, 155, 167 및 191을 발광층의 도펀트 재료로 사용하여 실시예 1 내지 실시예 10의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 비교예 1 및 비교예 2는 상술한 비교예 화합물 C1 및 C3을 발광층 도펀트 재료로 사용하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0273] 기판 및 애노드로서 코닝(corning)사의 15Ω/cm<sup>2</sup> (1200Å) ITO가 형성된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 상기 유리 기판을 설치하였다.

[0274] 상기 유기 기판에 형성된 ITO 애노드 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0275] 상기 정공 수송층 상부에 코-호스트인 BCPDS 및 POPCPA (BCPDS와 POPCPA의 중량비는 1:1)와 도펀트인 실시예 화합물들 또는 비교예 화합물들을 코-호스트와 도펀트의 중량비가 90 : 10이 되도록 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0276] 상기 발광층 상부에 TSP01을 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상부에 Alq<sub>3</sub>를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 후, 상기 전자 주입층 상부에 Al를 진공 증착하여 3000Å 두께의 캐소드를 형성하여, 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.



[0277]

표 3

구분	도펀트 재료	구동 전압(V)	전류 밀도 (mA/cm <sup>2</sup> )	휘도 (cd/m <sup>2</sup> )	발광 효율 (cd/A)	최대 발광 파장(nm)	반감 수명 (hr)
실시예 1	화합물18	4.35	50	3750	11.35	450	125
실시예 2	화합물29	4.51	50	3985	13.50	455	175

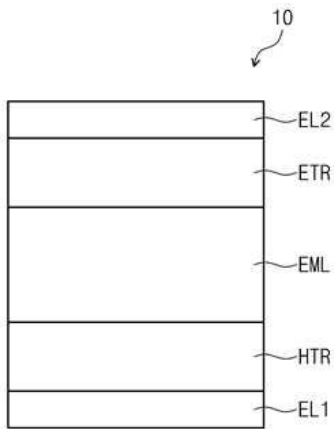
[0278]



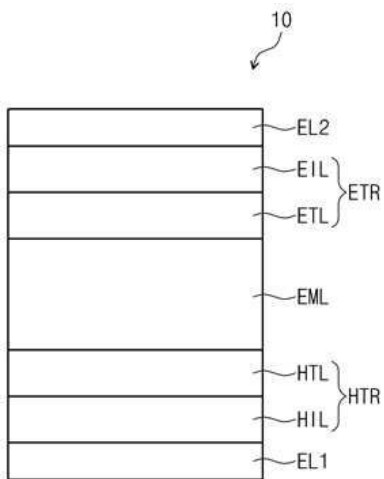


도면

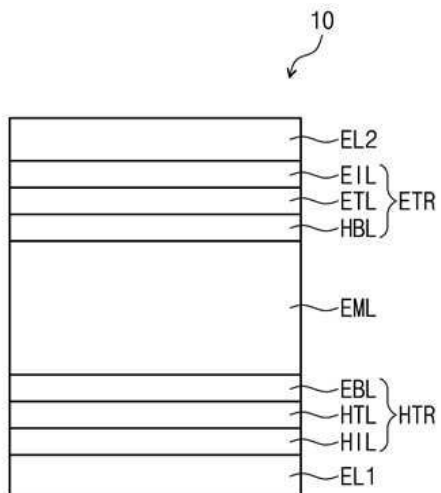
도면1



도면2



도면3



도면4

