



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년06월10일
(11) 등록번호 10-2673196
(24) 등록일자 2024년06월03일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 15/00 (2024.01) C09K 11/06 (2006.01)
G01N 21/64 (2006.01) G01N 33/58 (2006.01)
H10K 50/00 (2023.01) H10K 99/00 (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07F 15/0086 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
(21) 출원번호 10-2018-0104722
(22) 출원일자 2018년09월03일
심사청구일자 2021년08월31일
(65) 공개번호 10-2019-0026613
(43) 공개일자 2019년03월13일
(30) 우선권주장
1020170113560 2017년09월05일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
CN105505378 A
CN108276452 A
JP2008103535 A
JP2008239759 A

(73) 특허권자
삼성전자주식회사
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)
(72) 발명자
최종원
경기도 용인시 수지구 광고마을로 62, 4208동
2301호(상현동, 광고상록자이아파트)
아라타니 스캐카즈
경기도 화성시 동탄중앙로 189, 335동 503호(반송
동, 동탄시범다운마을 월드메르디앙반도유보라)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 19 항

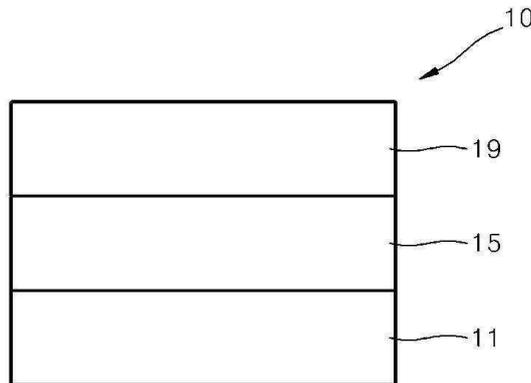
심사관 : 김지은

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

(57) 요약

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

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

G01N 21/6486 (2013.01)

G01N 33/58 (2020.05)

H10K 50/12 (2023.02)

H10K 85/346 (2023.02)

C09K 2211/185 (2013.01)

(72) 발명자

이금희

경기도 수원시 장안구 서부로 2067, 208동 604호
(율전동, 삼성아파트)

이방린

경기도 수원시 영통구 영통로 498, 151동 801호 (영통동, 황골마을주공1단지아파트)

최현호

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

곽승연

경기도 수원시 영통구 삼성로268번길 25, 705호 (원천동)

곽윤현

서울특별시 강남구 도산대로30길 16-2, 401호 (논현동)

김상동

경기도 성남시 분당구 운중로197번길 2 (운중동)

김지환

서울특별시 중구 다산로 32, 6동 401호(신당동, 남산타운)

백철

경기도 수원시 영통구 영통로 232, 824동 705호(영통동, 두산.우성.한신아파트)

조용석

경기도 화성시 동탄공원로 21-12, 901동 702호(능동, 푸른마을 포스코더샵)

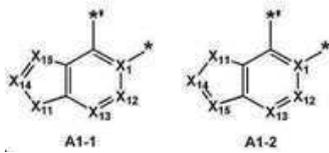
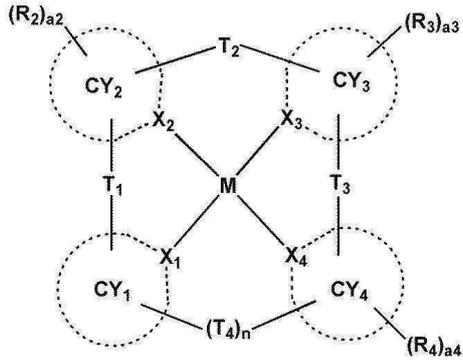
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 M은 Pt, Pd, 또는 Au이고,

상기 화학식 1 중 X₁은 N이고,

상기 화학식 1 중 X₂ 및 X₃는 C이고, X₄는 N이고,

상기 화학식 1 중 X₁과 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합이고,

상기 화학식 1 중 n은 0이고, n이 0일 경우 CY₁과 CY₄는 서로 연결되지 않고,

상기 화학식 1 중, CY₁은 상기 화학식 A1-1 내지 A1-2 중 하나로 표시된 그룹이고,

상기 화학식 A1-1 내지 A1-2 중,

i) X₁₁은 *-S-*, *-Se-* 또는 *-O-*이고, X₁₂는 C(R₁₂) 또는 N이고, X₁₃은 C(R₁₃) 또는 N이고, X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅) 또는 N이고,

ii) X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅)일 경우, R₁₄와 R₁₅는 서로 연결되지 않고,

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

상기 화학식 1 중 CY₂ 내지 CY₄는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

상기 화학식 1 중 T₁은 단일 결합, *-N[(L₅)_{c5}-(R₅)]-*, *-S-*, *-Se-* 및 *-O-* 중에서 선택되고,

상기 화학식 1 중 T₂ 내지 T₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, *-N[(L₅)_{c5}-(R₅)]-*, *-S-*, *-Se-*

및 *-0-*' 중에서 선택되고,

상기 L₅는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

상기 c₅는 1 내지 3 중에서 선택되고, c₅는 2 이상일 경우 2 이상의 L₅는 서로 동일하거나 상이하고,

상기 R₂ 내지 R₅ 및 R₁₂ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₇-C₆₀알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 및 -P(=O)(Q₈)(Q₉) 중에서 선택되고,

상기 화학식 1 중 a₂ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수 중에서 선택되고,

상기 화학식 1 중 a₂개의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 1 중 a₃개의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 1 중 a₄개의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 1 중 R₂ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 1 중 R₅와 R₂ 내지 R₄ 중 하나는, 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₇-C₆₀알킬아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기는,

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향

족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$, $-B(Q_{16})(Q_{17})$ 및 $-P(=O)(Q_{18})(Q_{19})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기 및 C_1-C_{60} 알콕시기;

C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_7-C_{60} 알킬아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_7-C_{60} 알킬아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, C_2-C_{60} 알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$, $-B(Q_{26})(Q_{27})$ 및 $-P(=O)(Q_{28})(Q_{29})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_7-C_{60} 알킬아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, C_2-C_{60} 알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

$-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$, $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 및 $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$;

중에서 선택되고,

상기 Q_1 내지 Q_9 , Q_{11} 내지 Q_{19} , Q_{21} 내지 Q_{29} 및 Q_{31} 내지 Q_{39} 는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기 및 C_6-C_{60} 아릴기;

C_1-C_{60} 알킬기 및 C_6-C_{60} 아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C_6-C_{60} 아릴기, C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, C_2-C_{60} 알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중에서 선택된다.

청구항 2

삭제

청구항 3

제1항에 있어서,

CY_2 내지 CY_4 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저물 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저물 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저물 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹,

아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

CY₂ 및 CY₃는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인텐 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저몰 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저몰 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹 및 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 CY₁과 CY₄가 서로 동일한, 유기금속 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

T₁은 단일 결합이고,

T₂는 단일 결합이 아닌, 유기금속 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 R₂ 내지 R₅ 및 R₁₂ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, -SF₅, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, C₁-C₂₀알킬페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기,

벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

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

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

중에서 선택되고,

Q₁ 내지 Q₉는 서로 독립적으로,

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

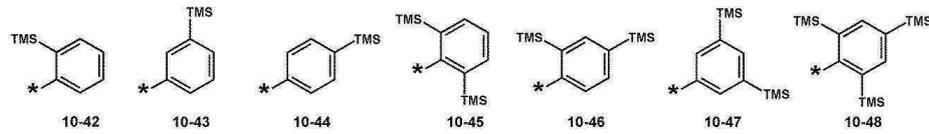
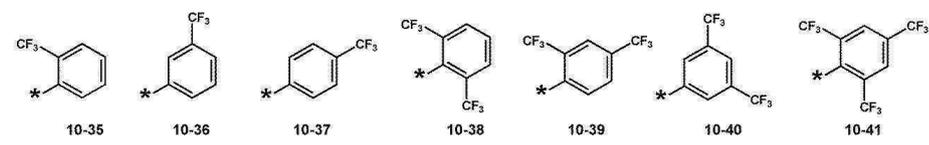
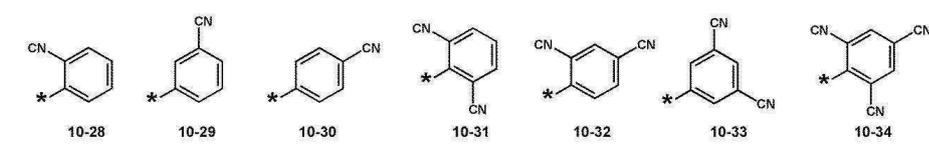
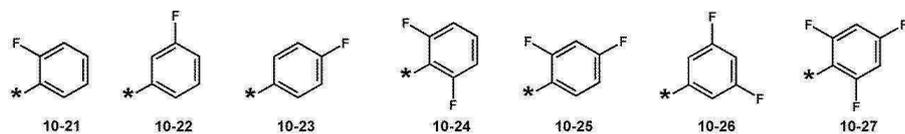
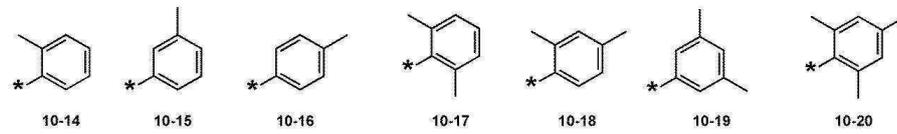
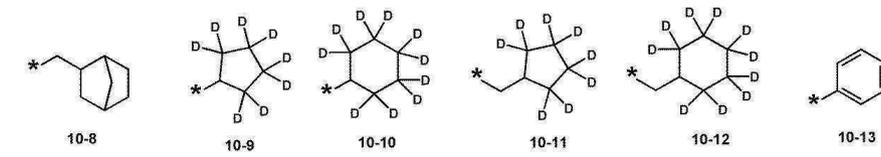
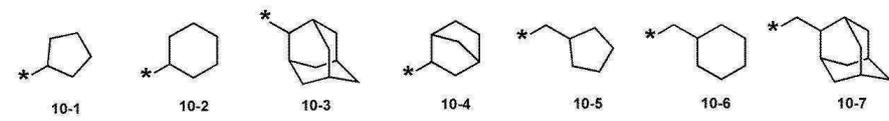
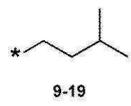
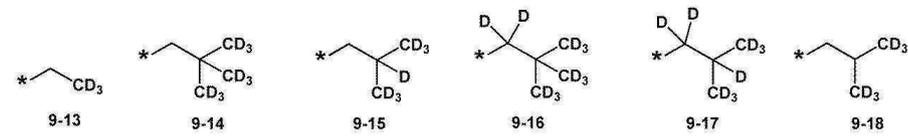
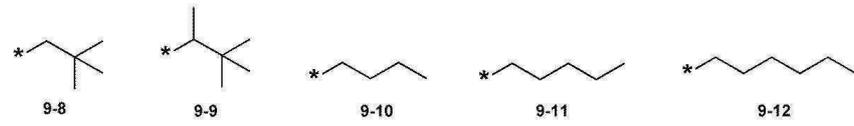
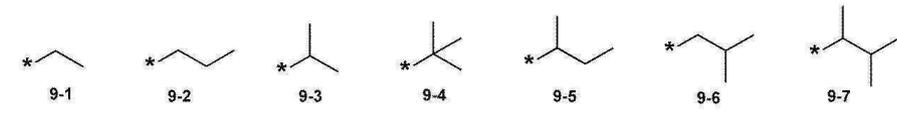
n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

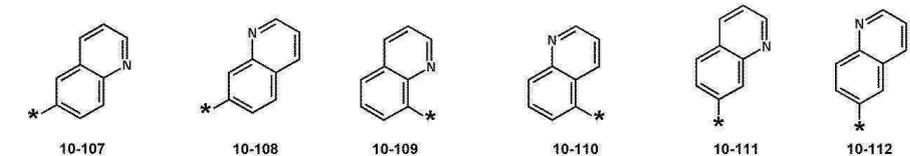
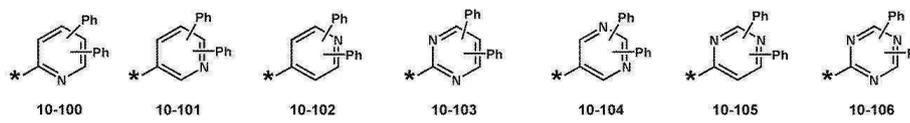
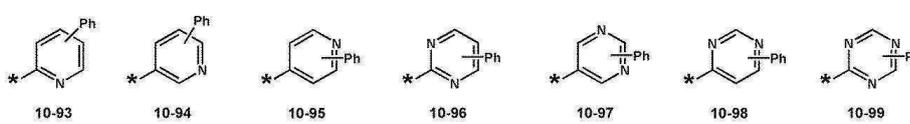
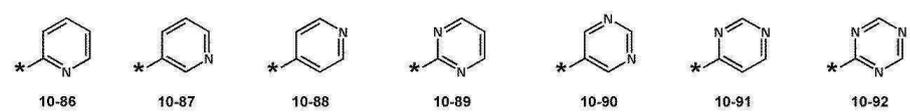
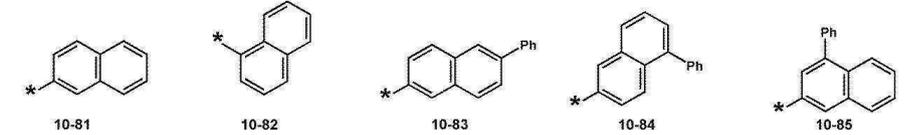
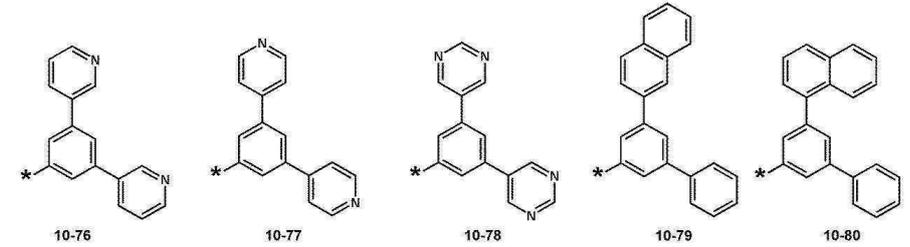
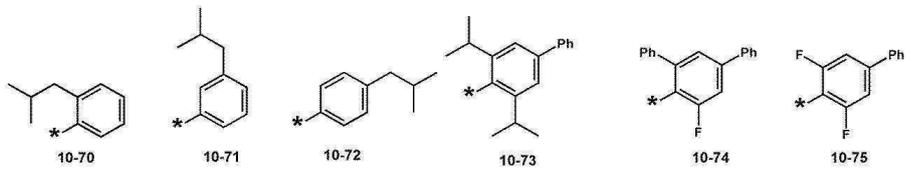
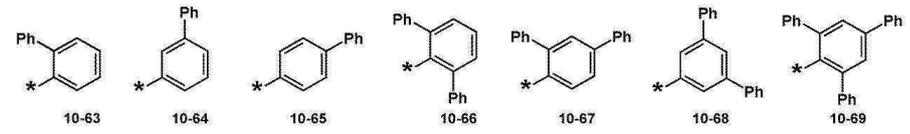
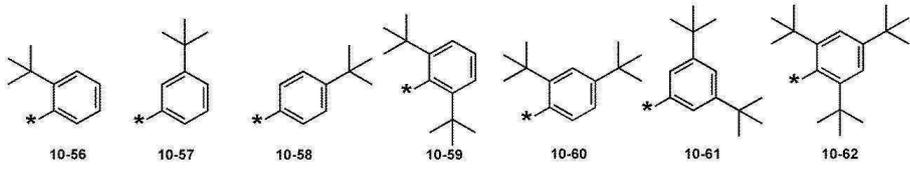
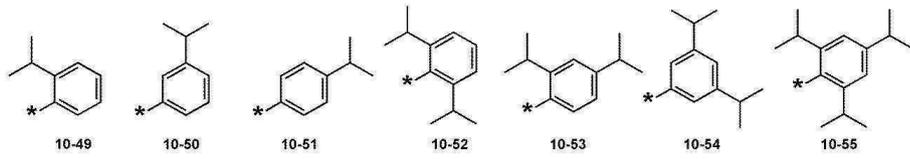
중에서 선택된, 유기금속 화합물.

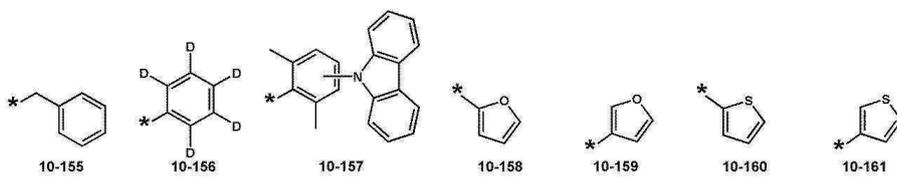
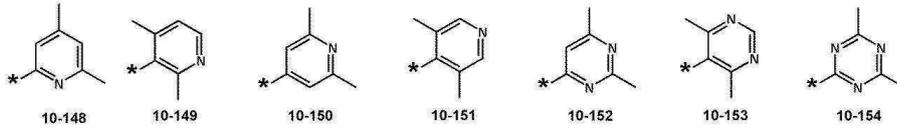
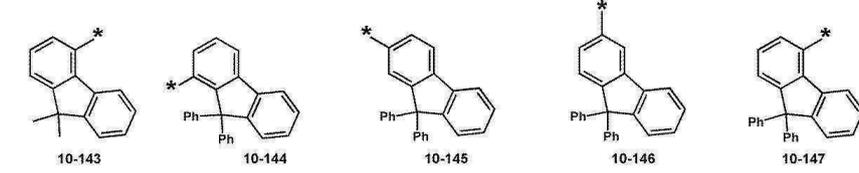
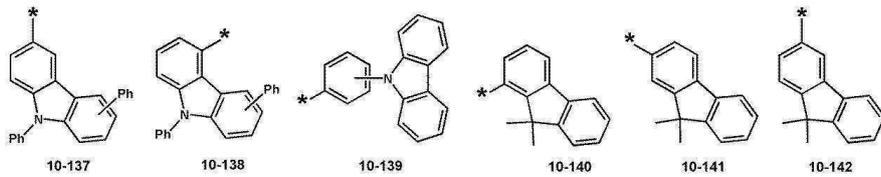
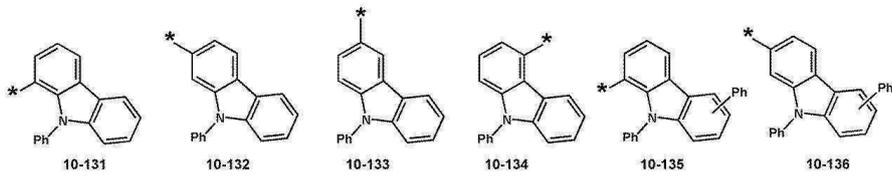
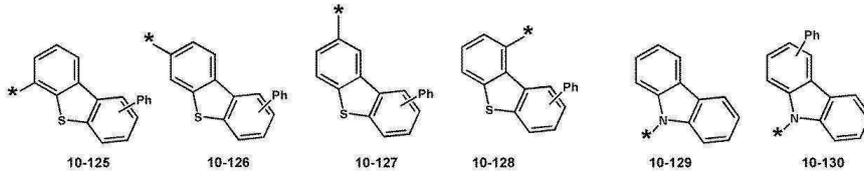
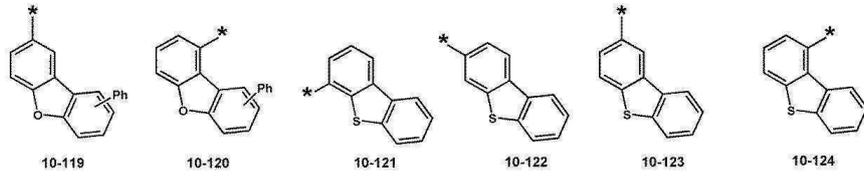
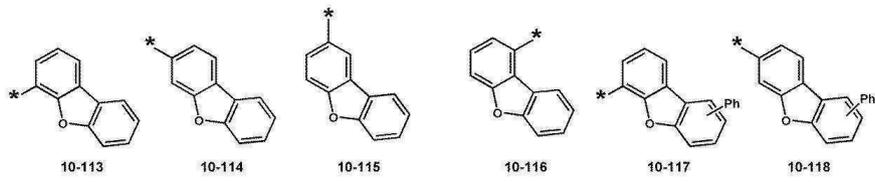
청구항 8

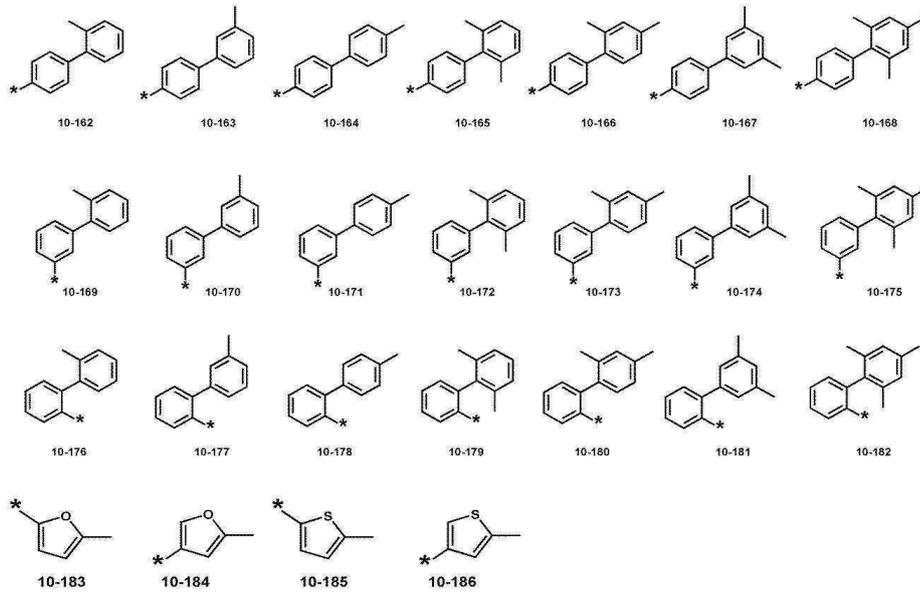
제1항에 있어서,

상기 R₂ 내지 R₅ 및 R₁₂ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF₅, -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 하기 화학식 9-1 내지 9-19로 표시되는 그룹, 하기 화학식 10-1 내지 10-186으로 표시되는 그룹 및 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) 중에서 선택된, 유기금속 화합물:







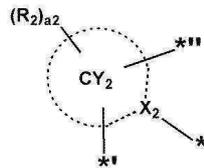


상기 화학식 9-1 내지 9-19 및 10-1 내지 10-186 중 *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고, Ph는 페닐기이고, TMS는 트리메틸실릴기이고,

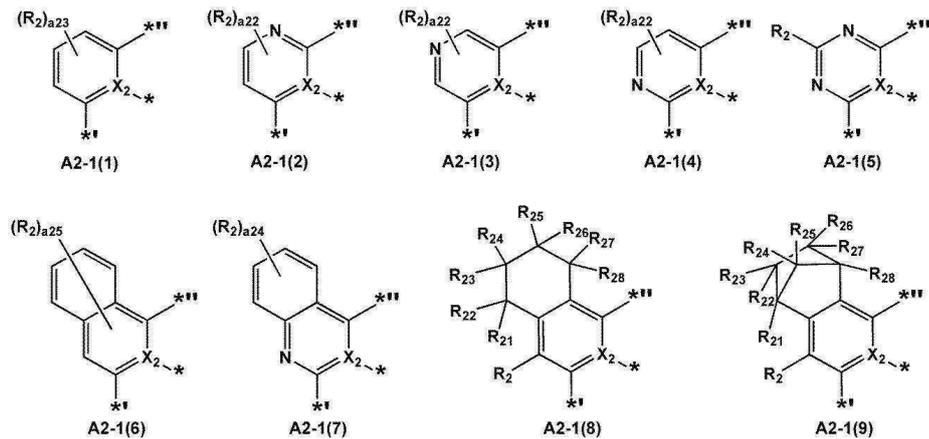
Q₃ 내지 Q₅에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하다.

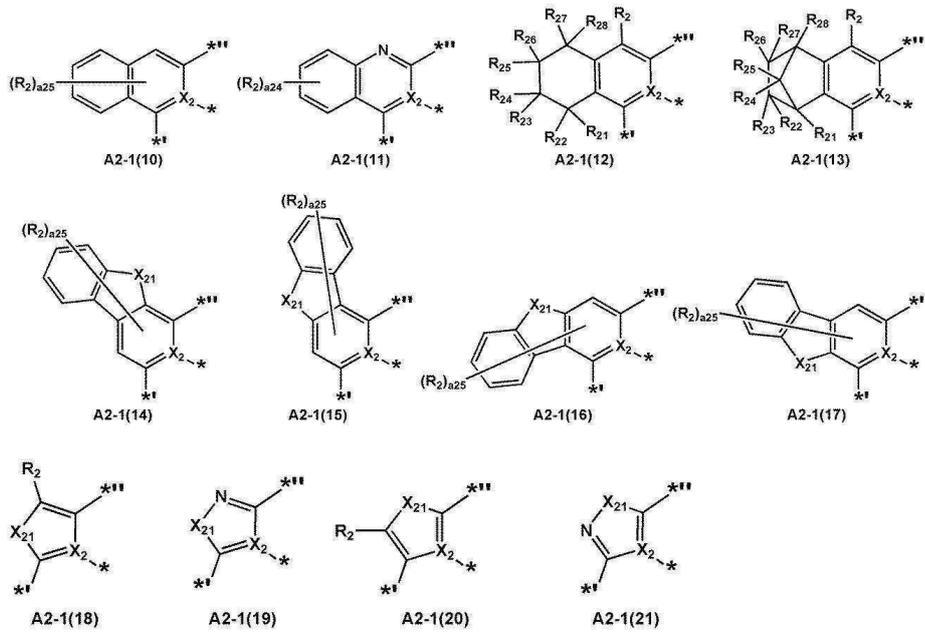
청구항 9

제1항에 있어서,



상기 화학식 1 중 로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(21) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물:

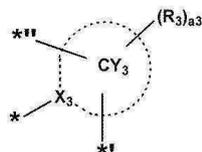




상기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(21) 중,
 X_2 및 R_2 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,
 X_{21} 은 O, S, $N(R_{21})$, $C(R_{21})(R_{22})$ 또는 $Si(R_{21})(R_{22})$ 이고,
 R_{21} 내지 R_{28} 에 대한 설명은 각각 제1항 중 R_2 에 대한 설명과 동일하고,
 a_{25} 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
 a_{24} 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,
 a_{23} 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
 a_{22} 는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,
 $*$ 는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,
 $*$ '은 화학식 1 중 T_1 과의 결합 사이트이고,
 $*$ "는 화학식 1 중 T_2 와의 결합 사이트이다.

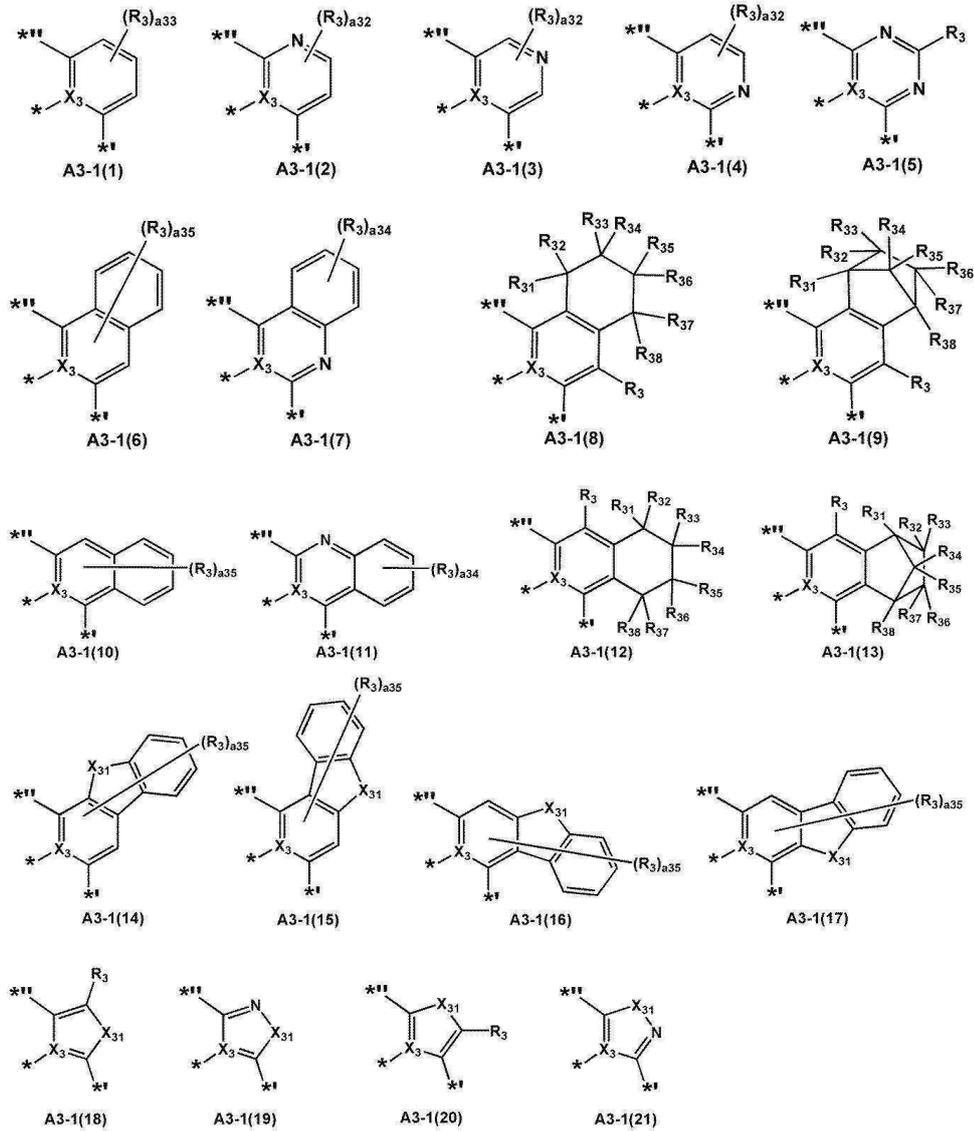
청구항 10

제1항에 있어서,



상기 화학식 1 중
 된, 유기금속 화합물:

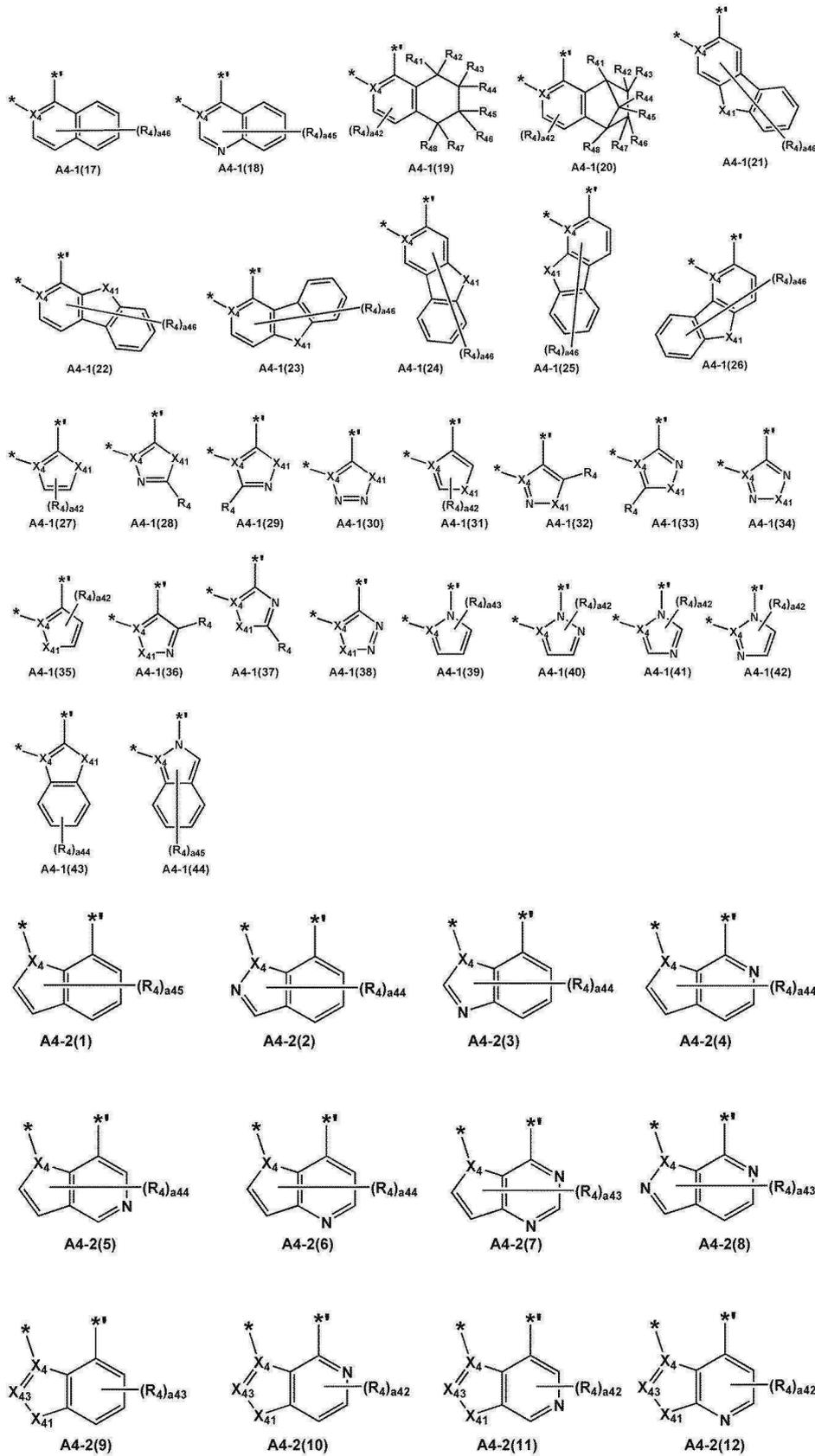
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 A3-1(1) 내지 A3-1(21) 중 하나로 표시

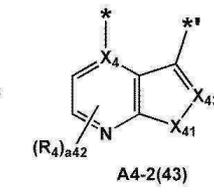
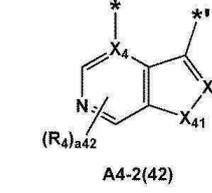
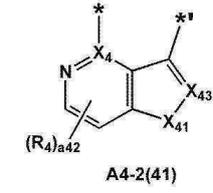
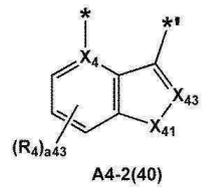
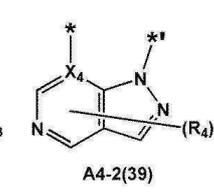
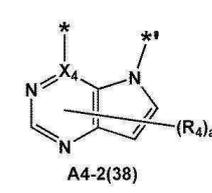
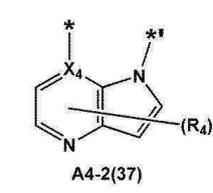
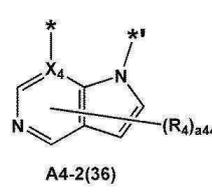
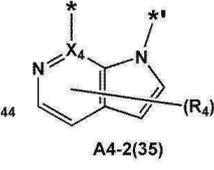
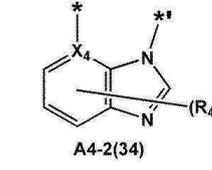
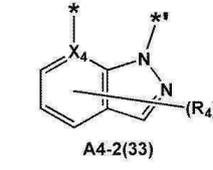
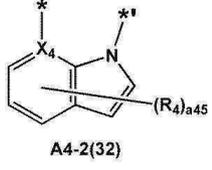
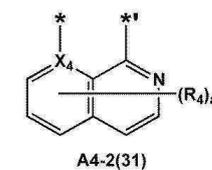
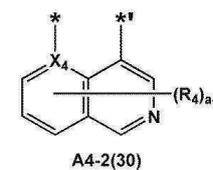
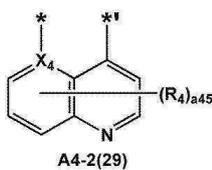
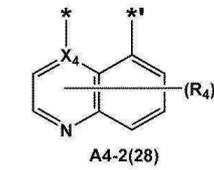
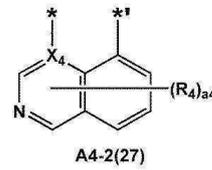
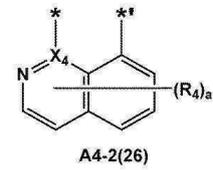
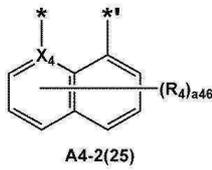
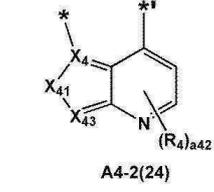
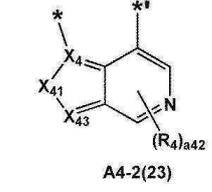
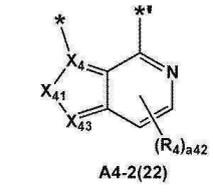
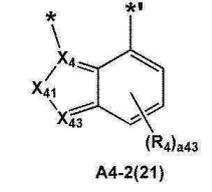
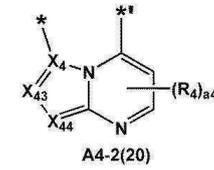
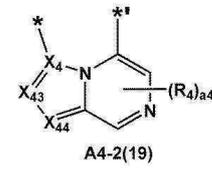
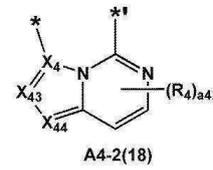
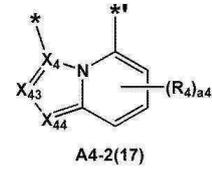
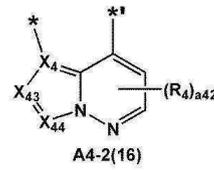
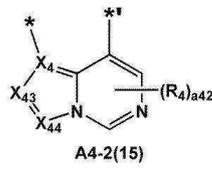
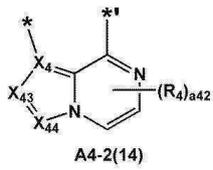
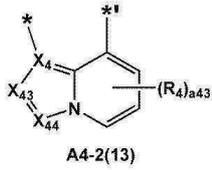


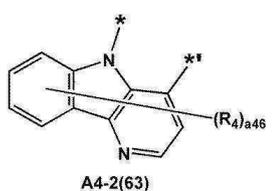
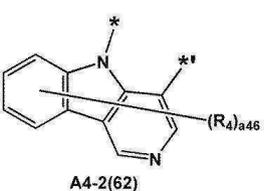
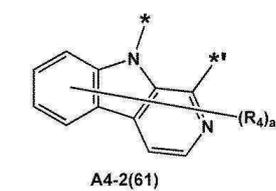
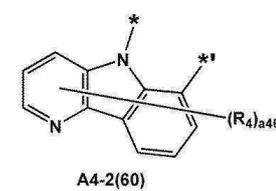
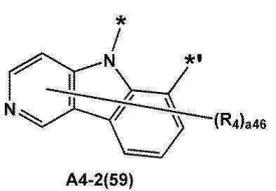
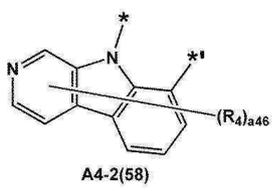
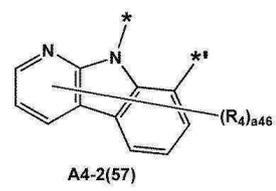
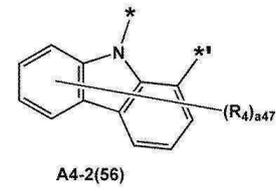
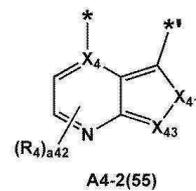
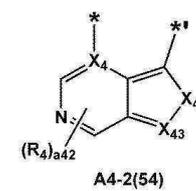
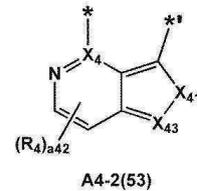
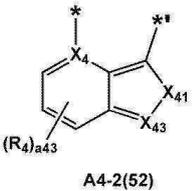
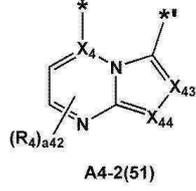
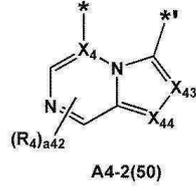
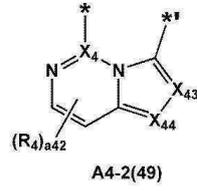
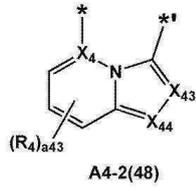
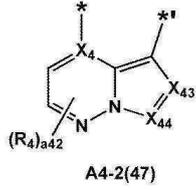
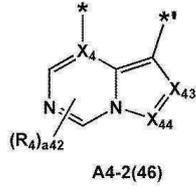
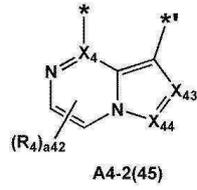
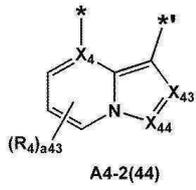
상기 화학식 A3-1(1) 내지 A3-1(21) 중,
 X_3 및 R_3 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,
 X_{31} 은 O, S, $N(R_{31})$, $C(R_{31})(R_{32})$ 또는 $Si(R_{31})(R_{32})$ 이고,
 R_{31} 내지 R_{38} 에 대한 설명은 각각 제1항 중 R_3 에 대한 설명과 동일하고,
 a_{35} 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
 a_{34} 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,
 a_{33} 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
 a_{32} 는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,
 $*$ 는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,
 $'$ 은 화학식 1 중 T_3 와의 결합 사이트이고,
 $"$ 는 화학식 1 중 T_2 와의 결합 사이트이다.

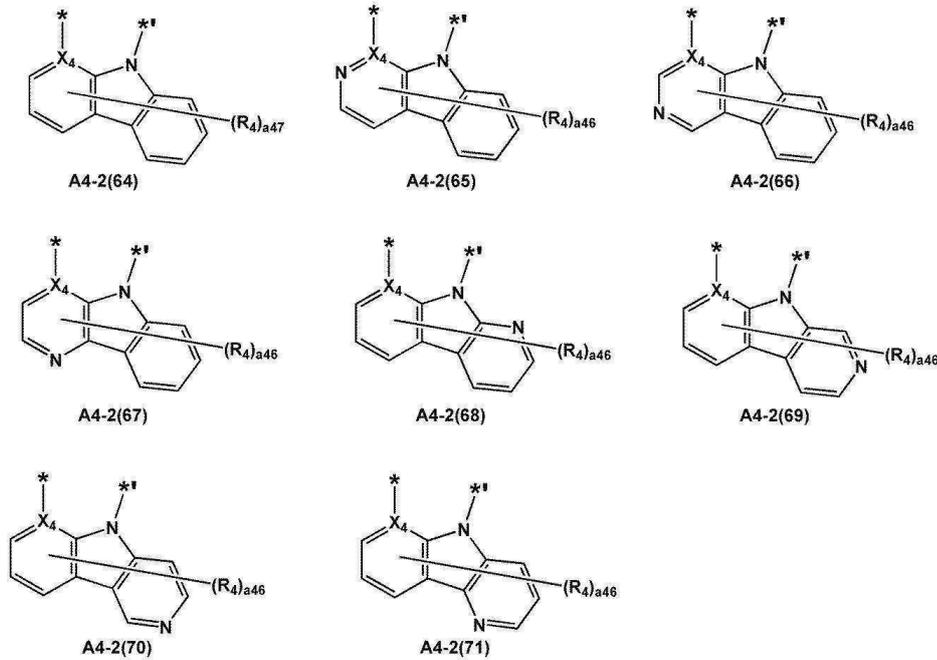
청구항 11

제1항에 있어서,









상기 화학식 A4-1 내지 A4-6 및 A4-1(1) 내지 A4-1(44), A4-2(1) 내지 A4-2(71) 중,
 X_4 및 R_4 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

X_{41} 은 O, S, $N(R_{41})$, $C(R_{41})(R_{42})$ 또는 $Si(R_{41})(R_{42})$ 이고,

X_{42} 는 N 또는 $C(R_{42})$ 이고,

X_{43} 은 N 또는 $C(R_{43})$ 이고,

X_{44} 는 N 또는 $C(R_{44})$ 이고,

X_{45} 는 N 또는 $C(R_{45})$ 이고,

R_{41} 내지 R_{48} 에 대한 설명은 각각 상기 R_4 에 대한 설명과 동일하고,

a_{47} 은 0 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

a_{46} 은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

a_{45} 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a_{44} 은 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a_{43} 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

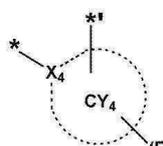
a_{42} 은 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

*는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

*'은 화학식 1 중 T_3 와의 결합 사이트이다.

청구항 12

제11항에 있어서,

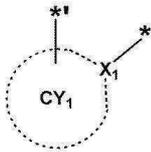


T_3 가 단일 결합이고, $(R_4)_{a44}$ 로 표시된 모이어티는 상기 화학식 A4-1 내지 A4-6, A4-1(1) 내지 A4-

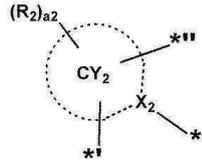
1(44) 및 A4-2(1) 내지 A4-2(71) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물.

청구항 13

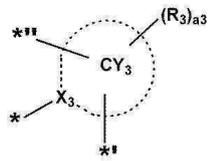
제1항에 있어서,
상기 화학식 1 중,



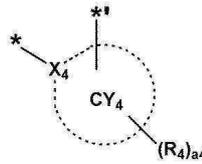
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY1-1 내지 CY1-8로 표시된 그룹 중에서 선택되고,



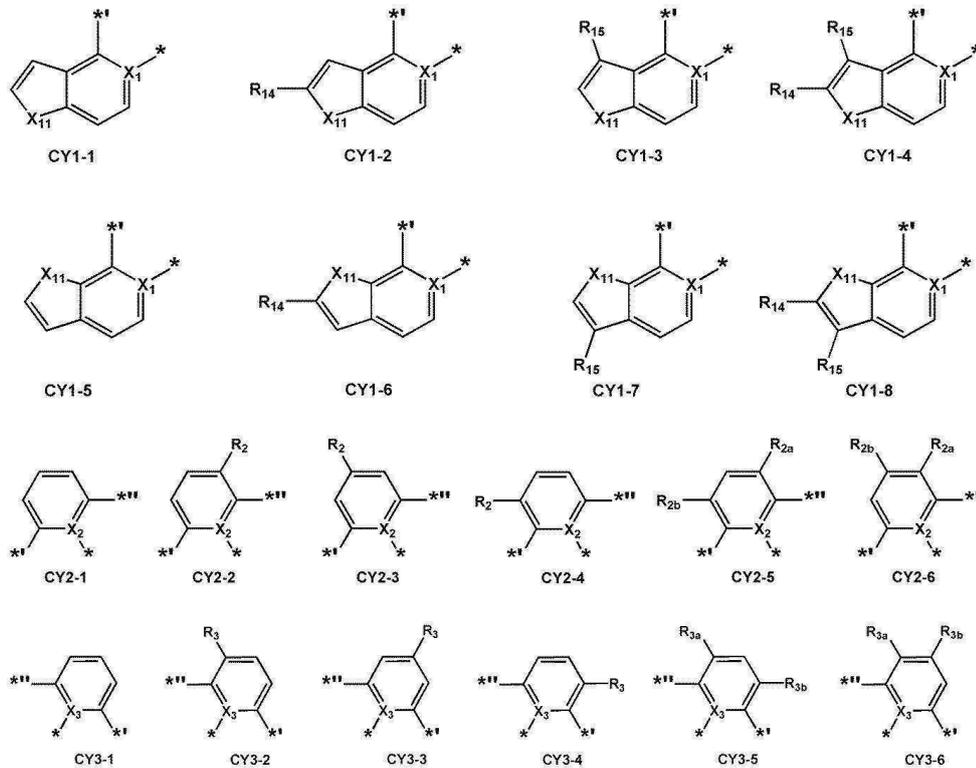
로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY2-1 내지 CY2-6으로 표시된 그룹 중에서 선택되고,

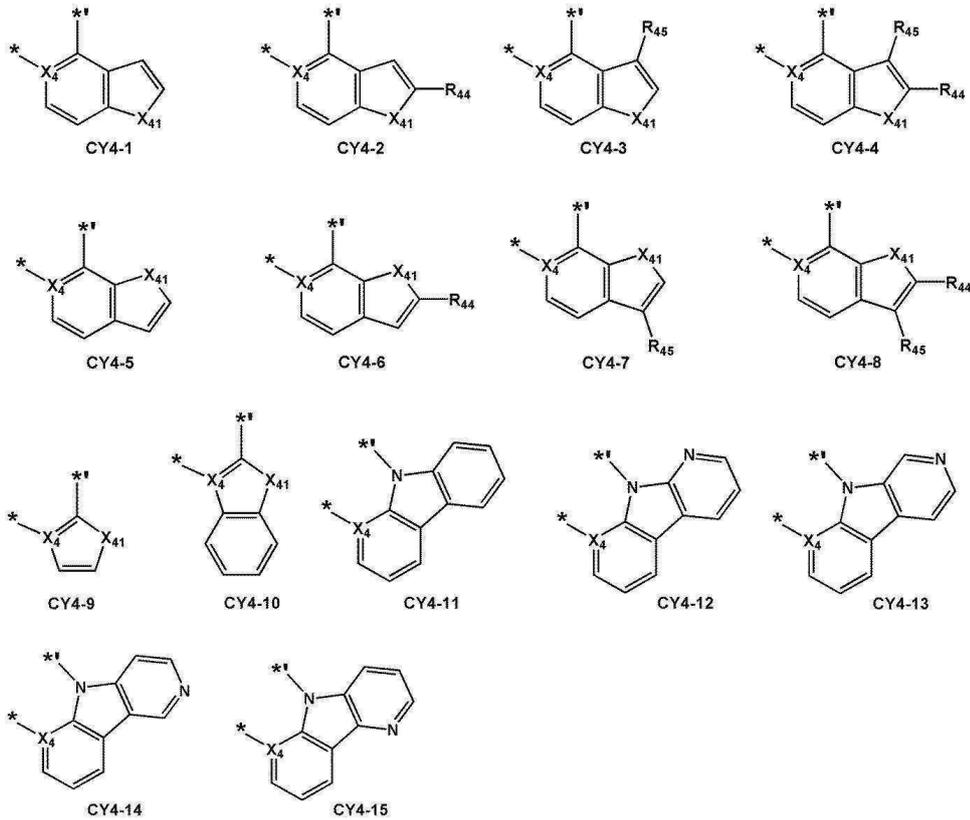


로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY3-1 내지 CY3-6으로 표시된 그룹 중에서 선택되고,



(R4)a4 로 표시된 모이어티가 하기 화학식 CY4-1 내지 CY4-15로 표시된 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:





상기 화학식 CY1-1 내지 CY1-8, CY2-1 내지 CY2-6, CY3-1 내지 CY3-6 및 CY4-1 내지 CY4-15 중,

X₁ 내지 X₄, X₁₁, R₂, R₃, R₁₄ 및 R₁₅에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

X₄₁은 O, S, N(R₄₁), C(R₄₁)(R₄₂) 또는 Si(R₄₁)(R₄₂)이고,

R_{2a} 및 R_{2b}에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₂에 대한 설명과 동일하고,

R_{3a} 및 R_{3b}에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₃에 대한 설명과 동일하고,

R₄₁, R₄₂, R₄₄ 및 R₄₅에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₄에 대한 설명과 동일하고,

R₁₄, R₁₅, R₂, R_{2a}, R_{2b}, R₃, R_{3a}, R_{3b}, R₄₁, R₄₂, R₄₄ 및 R₄₅은 수소가 아니고,

*는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

화학식 CY1-1 내지 CY1-8 중 *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고,

화학식 CY2-1 내지 CY2-6 중 *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고, *''은 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이고,

화학식 CY3-1 내지 CY3-6 중 *'은 화학식 1 중 T₃와의 결합 사이트이고, *''은 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이고,

화학식 CY4-1 내지 CY4-15 중 *'는 화학식 1 중 T₃와의 결합 사이트이다.

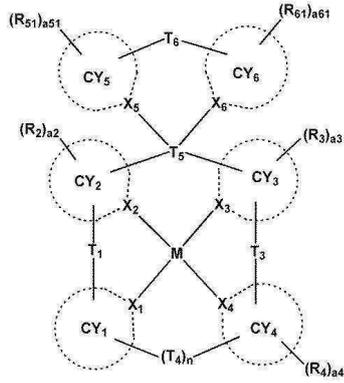
청구항 14

제1항에 있어서,

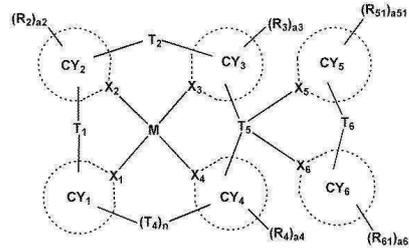
하기 화학식 1(1) 내지 1(6) 중 하나로 표시된, 유기금속 화합물:

<화학식 1(1)>

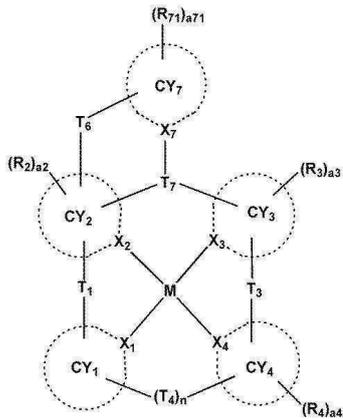
<화학식 1(2)>



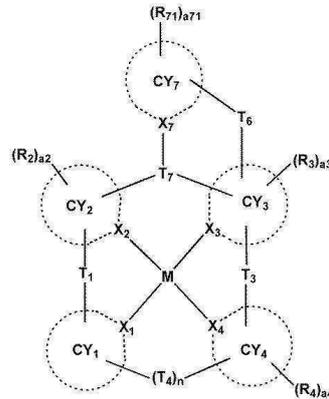
<화학식 1(3)>



<화학식 1(4)>



<화학식 1(5)>



<화학식 1(6)>

상기 화학식 1(1) 내지 1(6) 중

M, X₁ 내지 X₄, CY₁ 내지 CY₄, T₁ 내지 T₄, n, R₂ 내지 R₄ 및 a₂ 내지 a₄에 대한 설명은 각각, 제1항에 기재된 바와 동일하고,

CY₅ 내지 CY₇은 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹이고,

X₅ 내지 X₇은 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

R₅₁, R₆₁ 및 R₇₁에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R₂에 대한 설명과 동일하고,

a₅₁, a₆₁ 및 a₇₁은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고,

T₅는 C, Si 또는 Ge이고,

T₇은 B, N 또는 P이고,

T₆는 단일 결합, *-N[(L₇)_{c7}-(R₇)]-*, *-B(R₇)-*, *-P(R₇)-*, *-C(R₇)(R₈)-*, *-Si(R₇)(R₈)-*, *-Ge(R₇)(R₈)-*, *-S-*, *-Se-*, *-O-*, *-C(=O)-*, *-S(=O)-*, *-S(=O)₂-*, *-C(R₇)=C(R₈)-*, *-C(=S)-* 및 *-C≡C-*

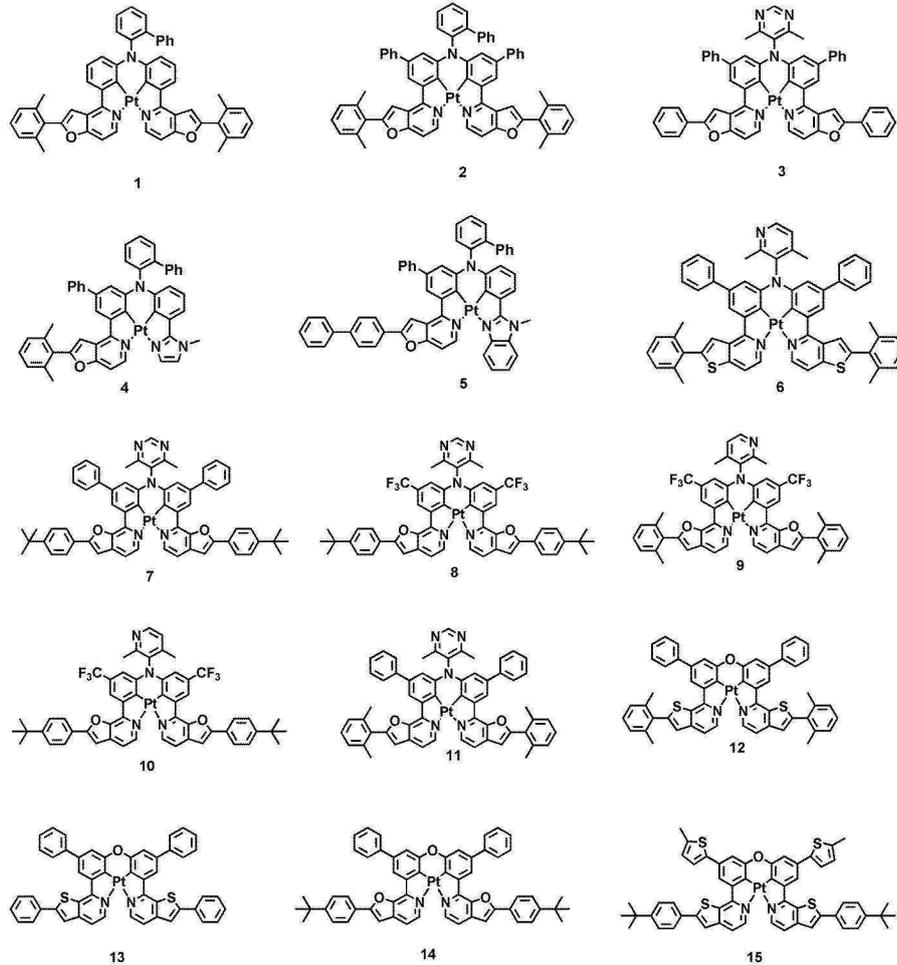
상기 L₇ 및 c₇에 대한 설명은 각각 제1항 중 L₅ 및 c₅에 대한 설명과 동일하고,

상기 R₇ 및 R₈에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₅에 대한 설명과 동일하다.

청구항 15

제1항에 있어서,

상기 화합물 1 내지 15 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



상기 화합물 1 내지 15 중 Ph는 페닐기를 나타낸다.

청구항 16

제1전극;

제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 및 제3항 내지 제15항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 제1전극은 애노드이고,

상기 제2전극은 캐소드이고,

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

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

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

청구항 18

제16항에 있어서,

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

청구항 19

제18항에 있어서,

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

청구항 20

제1항 및 제3항 내지 제15항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 생물학적 물질의 모니터링, 센싱, 또는 검출용 조성물.

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서, 시야각, 응답 시간, 휘도, 구동 전압 및 응답 속도 등이 우수하고, 다색화가 가능하다.

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

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

발명의 내용

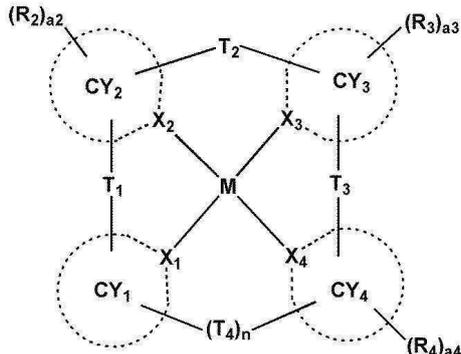
해결하려는 과제

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

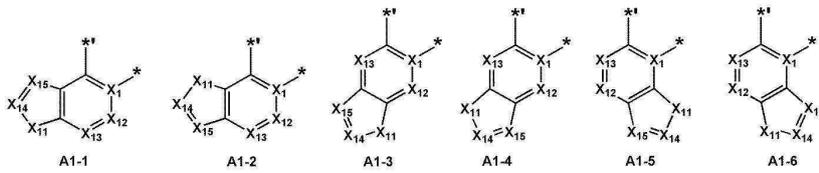
과제의 해결 수단

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

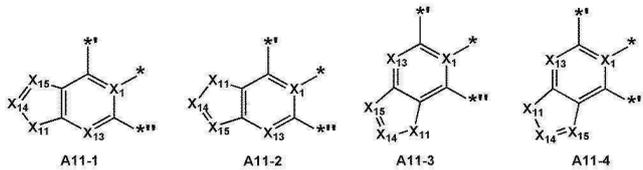
[0007] <화학식 1>



[0008]



[0009]



[0010]

[0011] 상기 화학식 1 M은 전이 금속이고,

[0012] 상기 화학식 1 중 X₁은 N이고,

[0013] 상기 화학식 1 중 X₂ 내지 X₄는 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

[0014] 상기 화학식 1 중 X₁과 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 1개의 결합은 배위 결합이고 나머지 2개의 결합은 공유 결합이고,

[0015] 상기 화학식 1 중 n은 0 또는 1이고, n이 0일 경우 CY₁과 CY₄는 서로 연결되지 않고,

[0016] 상기 화학식 1 중, i) n이 0일 경우, CY₁은 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 중 하나로 표시된 그룹이고, ii) n이 1일 경우, CY₁은 상기 화학식 A11-1 내지 A11-4 중 하나로 표시된 그룹이고,

[0017] 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4 중,

[0018] i) X₁₁은 *-N[(L₁₁)_{c11}-(R₁₁)]-*, *-B(R₁₁)-*, *-P(R₁₁)-*, *-C(R_{11a})(R_{11b})-*, *-Si(R_{11a})(R_{11b})-*, *-Ge(R_{11a})(R_{11b})-*, *-S-*, *-Se-*, *-O-*, *-C(=O)-*, *-S(=O)-*, *-S(=O)₂-* 또는 *-C(=S)-* 이고, X₁₂는 C(R₁₂) 또는 N이고, X₁₃는 C(R₁₃) 또는 N이고, X₁₄는 C(R₁₄) 또는 N이고, X₁₅는 C(R₁₅) 또는 N이고,

[0019] ii) X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅)일 경우, R₁₄와 R₁₅는 서로 연결되지 않고,

[0020] iii) 상기 R_{11a}와 R_{11b}는 선택적으로(optionally), 제2연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀ 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀ 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

[0021] 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4 중, *는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고, *'은 상기 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고, *''은 상기 화학식 1 중 T₄와의 결합 사이트이고,

[0022] 상기 화학식 1 중 CY₂ 내지 CY₄는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀ 카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀ 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

- [0023] 상기 화학식 1 중 T₁ 내지 T₄는 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, *-N[(L₅)_{c5}-(R₅)]-*', *-B(R₅)-*', *-P(R₅)-*', *-C(R₅)(R₆)-*', *-Si(R₅)(R₆)-*', *-Ge(R₅)(R₆)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-S(=O)₂-*', *-C(R₅)=*', *=C(R₅)-*', *-C(R₅)=C(R₆)-*', *-C(=S)-*' 및 *-C≡C-*' 중에서 선택되고, 상기 R₅와 R₆은 선택적으로(optionally), 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0024] 상기 L₅ 및 L₁₁은 서로 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,
- [0025] 상기 c₅ 및 c₁₁은 서로 독립적으로, 1 내지 3 중에서 선택되고, c₅는 2 이상일 경우 2 이상의 L₅는 서로 동일하거나 상이하고, c₁₁이 2 이상일 경우 2 이상의 L₁₁은 서로 동일하거나 상이하고,
- [0026] 상기 R₂ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₅, R_{11a} 및 R_{11b}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₇-C₆₀알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 및 -P(=O)(Q₈)(Q₉) 중에서 선택되고,
- [0027] 상기 화학식 1 중 a₂ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수 중에서 선택되고,
- [0028] 상기 화학식 1 중 a₂개의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0029] 상기 화학식 1 중 a₃개의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0030] 상기 화학식 1 중 a₄개의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0031] 상기 화학식 1 중 R₂ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0032] 상기 화학식 1 중 R₅ 및 R₆ 중 하나와 R₂ 내지 R₄ 중 하나는, 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0033] 상기 치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₇-C₆₀알킬아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0034] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디

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

[0035] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅), -B(Q₁₆)(Q₁₇) 및 -P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0036] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0037] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅), -B(Q₂₆)(Q₂₇) 및 -P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0038] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), -B(Q₃₆)(Q₃₇) 및 -P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉);

[0039] 중에서 선택되고,

[0040] 상기 Q₁ 내지 Q₉, Q₁₁ 내지 Q₁₉, Q₂₁ 내지 Q₂₉ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0041] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0042] 상기 유기층 중 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 할 수 있다.

[0043] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

발명의 효과

[0044] 상기 유기금속 화합물은 우수한 전기적 특성 및 열적 안정성을 갖는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 우수한 구동 전압, 효율, 전력, 색순도 및 수명 특성을 갖는다. 또한, 상기 유기금속 화합물은 우수한 인광 발광 특성을 가지므로, 이를 이용하면, 높은 진단 효율을 갖는 진단용 조성물을 제공할 수 있다.

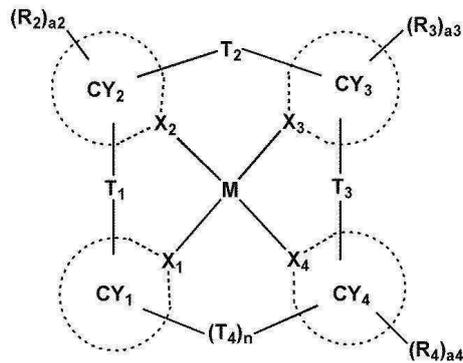
도면의 간단한 설명

- [0045] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.
- 도 2는 실시예 1, 3 및 6 및 비교예 A 내지 C의 유기 발광 소자 각각의 전계발광(EL) 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 3은 실시예 16 내지 18 및 비교예 D 내지 F의 유기 발광 소자 각각의 발광 효율(at CIE_x = 0.685)을 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0046] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0047] <화학식 1>



- [0048]
- [0049] 상기 화학식 1 중 M은 전이 금속일 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1 중 M은 1주기 전이 금속, 2주기 전이 금속 또는 3주기 전이 금속일 수 있다.
- [0050] 또 다른 예로서, 상기 M은 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 칼슘(Ca), 티타늄(Ti), 망간(Mn), 코발트(Co), 구리(Cu), 아연(Zn), 갈륨(Ga), 게르마늄(Ge), 지르코늄(Zr), 루테튬(Ru), 로듐(Rh), 팔라듐(Pd), 은(Ag), 레늄(Re), 백금(Pt) 또는 금(Au)일 수 있다.
- [0051] 일 구현예에 따르면, 상기 M은 Pt, Pd 또는 Au일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0052] 상기 화학식 1 중 X₁은 N이고, X₂ 내지 X₄는 서로 독립적으로, C 또는 N일 수 있다.
- [0053] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 i) X₂ 및 X₃는 C이고, X₄는 N이거나, ii) X₂ 및 X₄는 C이고, X₃은 N일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0054] 상기 화학식 1 중 X₁과 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 1개의 결합은 배위 결합이고 나머지 2개의 결합은 공유 결합일 수 있다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 전기적으로 중성(neutral)이며, 예를 들어, i) 상기 화학식 1 중 X₁과 M 사이의 결합, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 1개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 3개의 결합은 배위 결합이거나, ii) 상기 화학식 1 중 X₁과 M 사이의 결합, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 3개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 1개의 결합은 배위 결합이어서, 전기적으로 중성이 아닌 가상의 유기금속 화합물과는 명확히 구분된다.
- [0055] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 i) X₁과 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합이거나, 또는 i) X₁과 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 공유 결합일 수 있다.
- [0056] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,
- [0057] M은 Pt, Pd 또는 Au이고,

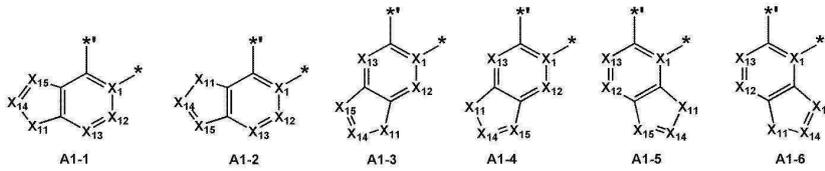
[0058] X₄는 N이고,

[0059] X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

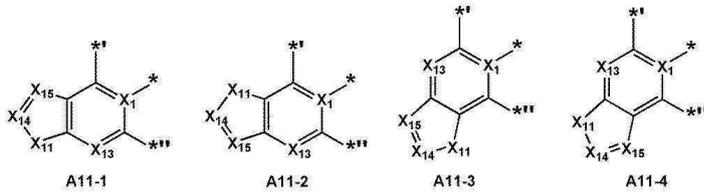
[0060] 상기 화학식 1 중 n은 0 또는 1이고, n이 0일 경우 CY₁과 CY₄는 서로 연결되지 않는다.

[0061] 상기 화학식 1 중, i) n이 0일 경우, CY₁은 하기 화학식 A1-1 내지 A1-6 중 하나로 표시된 그룹이고, ii) n이 1일 경우, CY₁은 하기 화학식 A11-1 내지 A11-4 중 하나로 표시된 그룹이고, 하기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4 중 X₁₁는 *-N[(L_{11a})_{c11}-(R₁₁)]-*, *-B(R₁₁)-*, *-P(R₁₁)-*, *-C(R_{11a})(R_{11b})-*, *-Si(R_{11a})(R_{11b})-*, *-Ge(R_{11a})(R_{11b})-*, *-S-*, *-Se-*, *-O-*, *-C(=O)-*, *-S(=O)-*, *-S(=O)₂-* 또는 *-C(=S)-* 이고, X₁₂는 C(R₁₂) 또는 N이고, X₁₃은 C(R₁₃) 또는 N이고, X₁₄는 C(R₁₄) 또는 N이고, X₁₅는 C(R₁₅) 또는 N일 수 있다:

[0062]



[0063]



[0064] 예를 들어, 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4 중 X₁₂는 C(R₁₂)이고, X₁₃은 C(R₁₃)이고, X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅)일 수 있다.

[0065] 또 다른 예로서, 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4 중 X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅)이고, R₁₄ 및 R₁₅ 중 적어도 하나는 수소가 아닐 수 있다.

[0066] 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4 중 X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅)일 경우, R₁₄와 R₁₅는 서로 연결되지 않는다. 즉, 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4 중 X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅)일 경우, R₁₄와 R₁₅는 서로 연결되어 고리를 형성하지 않는다.

[0067] 상기 R_{11a}와 R_{11b}는 선택적으로(optionally), 제2연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다. 상기 제2연결기에 대한 설명은 본 명세서 중 제1연결기에 대한 설명을 참조한다.

[0068] 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다.

[0069] 상기 화학식 1 중 CY₂ 내지 CY₄는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0070] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 CY₂ 내지 CY₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저물 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸

그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저몰 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 중에서 선택될 수 있다.

- [0071] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,
- [0072] X_2 및 X_3 는 C이고,
- [0073] CY_2 및 CY_3 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로헥타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저몰 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저몰 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹 및 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0074] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 고리 CY_2 내지 CY_4 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 적어도 하나의 5원환 및 적어도 하나의 6원환이 서로 축합된 축합환 중에서 선택되고,
- [0075] 상기 5원환은 시클로헥타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이소옥사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 이소옥사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 이소티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹 및 트리아자실롤 그룹 중에서 선택되고,
- [0076] 상기 6원환은 시클로헥산 그룹, 시클로헥센 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹 및 피리다진 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0077] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 CY_1 과 CY_4 가 서로 동일할 수 있다.
- [0078] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 CY_2 와 CY_3 가 서로 동일할 수 있다.
- [0079] 상기 화학식 1 중 T_1 내지 T_4 는 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, $*-N[(L_5)_{c5}-(R_5)]-*$, $*-B(R_5)-*$, $*-P(R_5)-*$, $*-C(R_5)(R_6)-*$, $*-Si(R_5)(R_6)-*$, $*-Ge(R_5)(R_6)-*$, $*-S-*$, $*-Se-*$, $*-O-*$, $*-C(=O)-*$, $*-S(=O)-*$, $*-S(=O)_2-*$, $*-C(R_5)=*$, $*=C(R_5)-*$, $*-C(R_5)=C(R_6)-*$, $*-C(=S)-*$ 및 $*-C\equiv C-*$ 중에서 선택될 수 있다. 상기 R_5 및 R_6 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하며, R_5 및 R_6 은 선택적으로, 단일 결합, 이중 결합 또는 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.
- [0080] 상기 제1연결기는 $*-N(R_9)-*$, $*-B(R_9)-*$, $*-P(R_9)-*$, $*-C(R_9)(R_{10})-*$, $*-Si(R_9)(R_{10})-*$, $*-Ge(R_9)(R_{10})-*$, $*-S-*$, $*-Se-*$, $*-O-*$, $*-C(=O)-*$, $*-S(=O)-*$, $*-S(=O)_2-*$, $*-C(R_9)=*$, $*=C(R_9)-*$, $*-C(R_9)=C(R_{10})-*$, $*-C(=S)-*$ 및 $*-C\equiv C-*$ 중에서 선택되고, 상기 R_9 및 R_{10} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_5 에 대한 설명을 참조하고, * 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0081] 상기 L_5 및 L_{11} 은 서로 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.

- [0082] 예를 들어, 상기 L_5 및 L_{11} 은 서로 독립적으로,
- [0083] 단일 결합, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹 및 벤조티아디아졸 그룹; 및
- [0084] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 디메틸디벤조실롤일기, 디페닐디벤조실롤일기, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$, $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 및 $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인덴 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹 및 벤조티아디아졸 그룹;
- [0085] 중에서 선택되고,
- [0086] Q_{31} 내지 Q_{39} 는 서로 독립적으로,
- [0087] $-CH_3$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CD_3$, $-CH_2CD_2H$, $-CH_2CDH_2$, $-CHDCH_3$, $-CHDCH_2H$, $-CHDCH_2H$, $-CHDCH_3$, $-CD_2CD_3$, $-CD_2CD_2H$ 및 $-CD_2CDH_2$;
- [0088] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및
- [0089] 중수소, C_1 - C_{10} 알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;
- [0090] 중에서 선택될 수 있다.
- [0091] 상기 c_5 및 c_{11} 은 각각 L_5 및 L_{11} 의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택된다. 상기 c_5 는 2 이상일 경우 2 이상의 L_5 는 서로 동일하거나 상이하고, c_{11} 이 2 이상일 경우 2 이상의 L_{11} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며, 상기 c_5 및 c_{11} 은 서로 독립적으로, 1 또는 2일 수 있다.
- [0092] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 T_1 은 단일 결합이고, T_2 는 단일 결합이 아니고, n은 0일 수 있다.
- [0093] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 T_1 내지 T_4 중 적어도 하나는 서로 독립적으로, $*(R_5)(R_6)-*$, $*(R_5)(R_6)-*$ 및 $*(R_5)(R_6)-*$ 중에서 선택되고, 상기 R_5 와 R_6 은 제1연결기를 통하여 서로 연결될 수 있다. 상기 제1연결기에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0094] 상기 화학식 1 중 R_2 내지 R_6 , R_{11} 내지 R_{15} , R_{11a} 및 R_{11b} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-SF_5$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰

리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조푸라닐기, 벤조티오펜닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0100] $-N(Q_1)(Q_2)$, $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$, $-B(Q_6)(Q_7)$ 및 $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$;

[0101] 중에서 선택되고,

[0102] Q_1 내지 Q_9 는 서로 독립적으로,

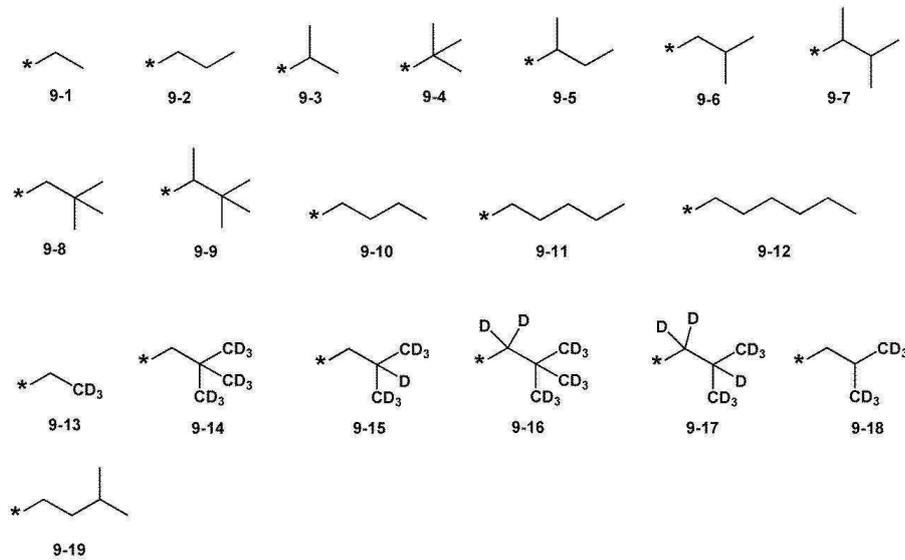
[0103] $-CH_3$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CD_3$, $-CH_2CD_2H$, $-CH_2CDH_2$, $-CHDCH_3$, $-CHDCD_2H$, $-CHDCDH_2$, $-CHDCD_3$, $-CD_2CD_3$, $-CD_2CD_2H$ 및 $-CD_2CDH_2$;

[0104] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

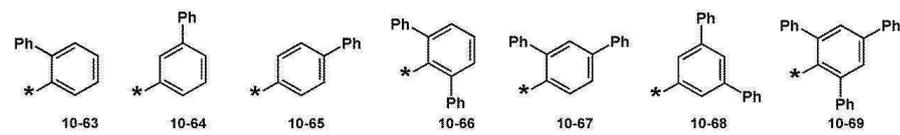
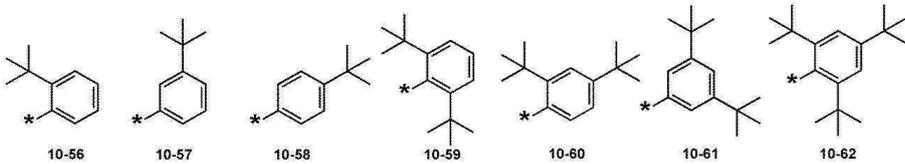
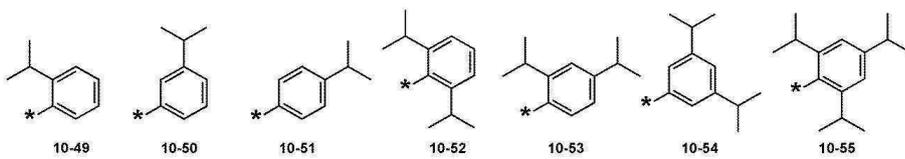
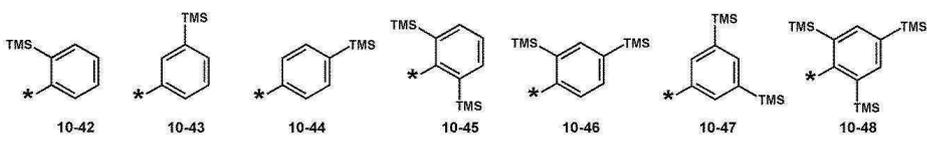
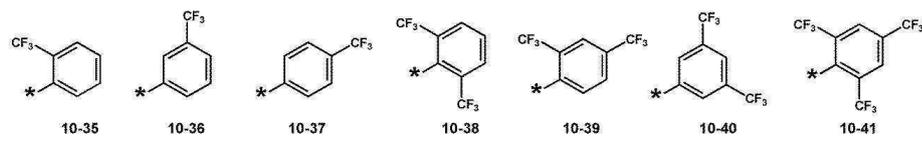
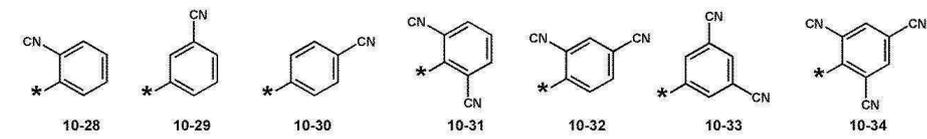
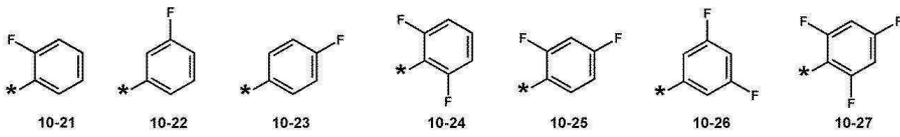
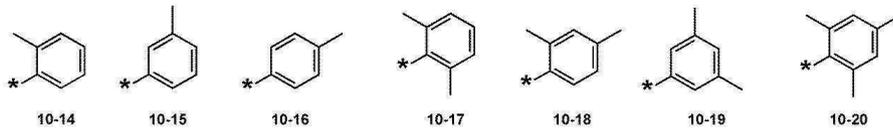
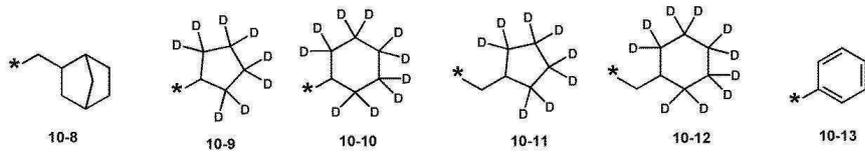
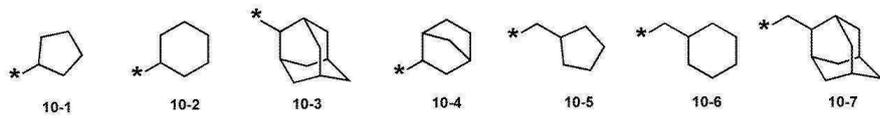
[0105] 중수소, C₁-C₁₀알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

[0106] 중에서 선택될 수 있다.

[0107] 다른 구현예에 따르면, 상기 R₂ 내지 R₆, R₁₁ 내지 R₁₅, R_{11a} 및 R_{11b}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF₅, -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 하기 화학식 9-1 내지 9-19로 표시되는 그룹, 하기 화학식 10-1 내지 10-186으로 표시되는 그룹 및 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ (상기 Q₃ 내지 Q₅에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조함) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



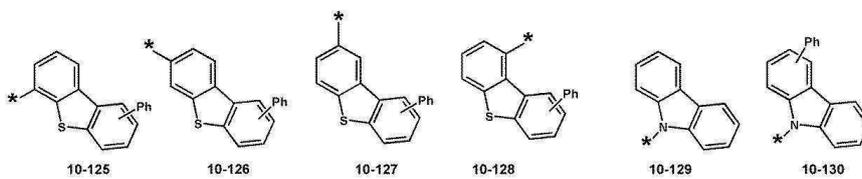
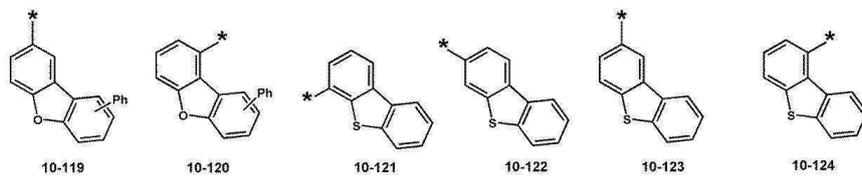
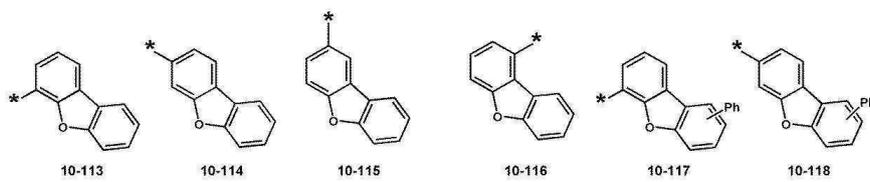
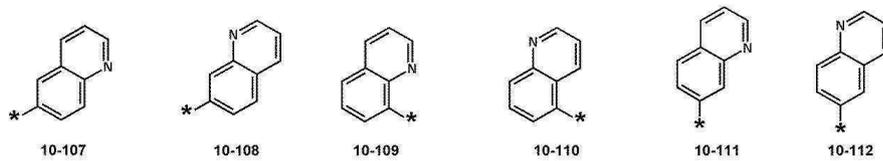
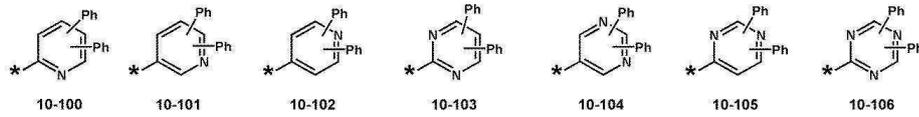
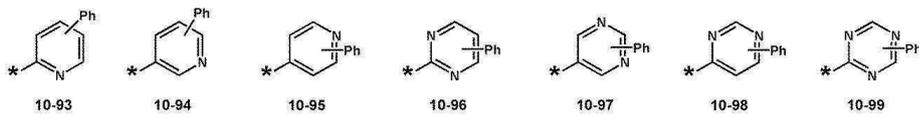
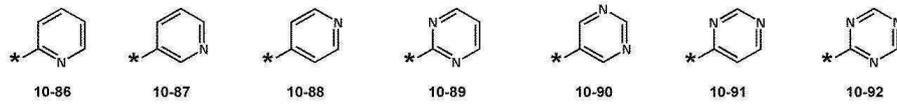
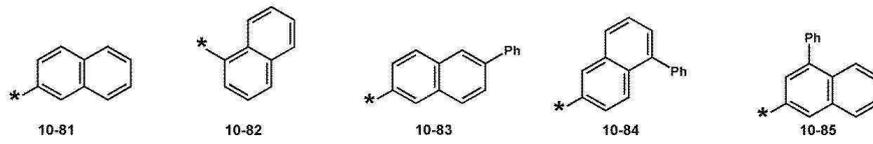
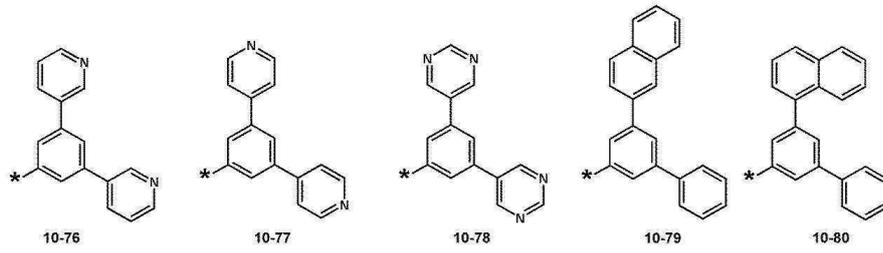
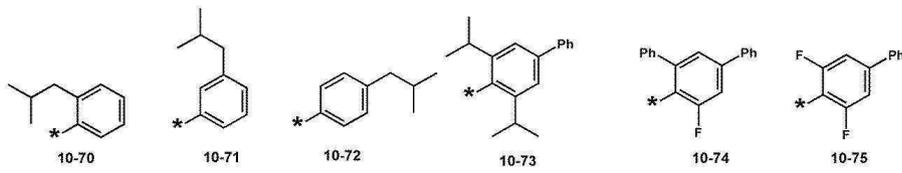
[0108]



[0109]

[0110]

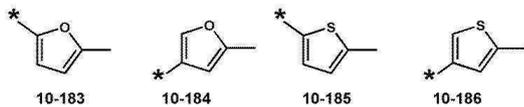
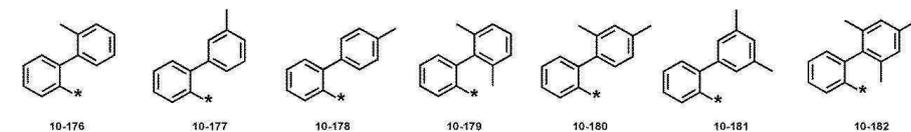
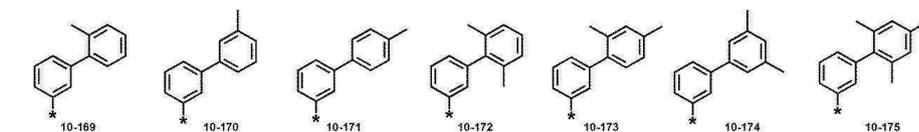
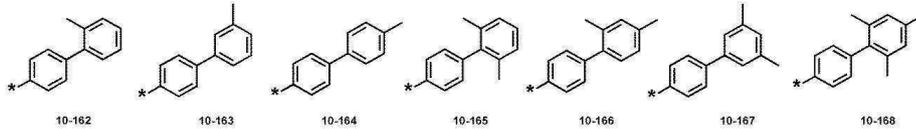
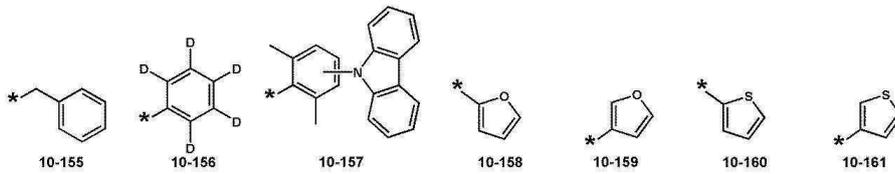
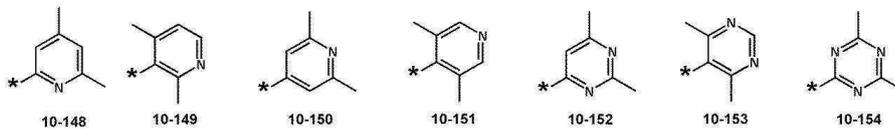
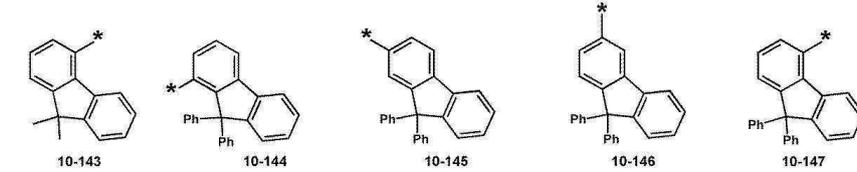
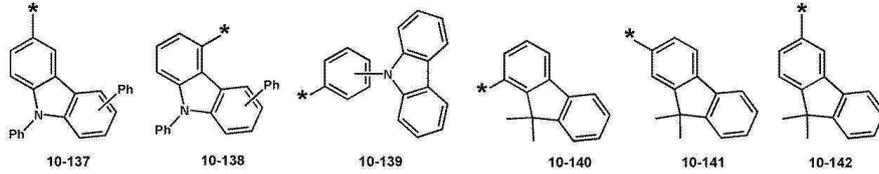
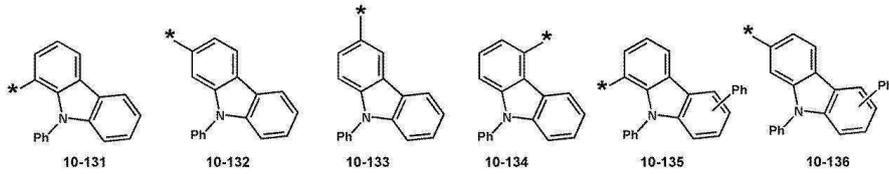
[0111]



[0112]

[0113]

[0114]



[0115]

[0116]

[0117]

[0118]

[0119]

[0120]

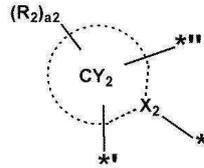
[0121]

상기 화학식 9-1 내지 9-19 및 10-1 내지 10-186 중 *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고, Ph는 페닐기이고, TMS는 트리메틸실릴기이다.

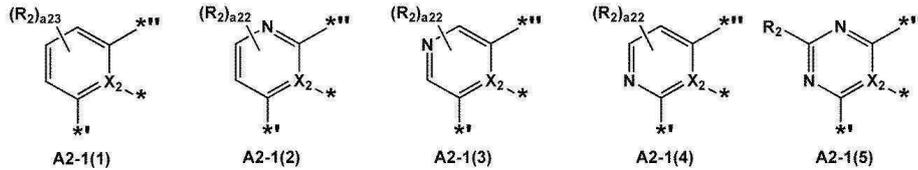
상기 R₅와 R₆은 선택적으로(optionally), 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보실릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, 상기 R_{11a}와 R_{11b}는 선택적으로(optionally), 제2연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보실릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.

상기 화학식 1 중 a₂ 내지 a₄는 각각 R₂ 내지 R₄의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수

(예를 들면, 0 내지 4의 정수) 중에서 선택될 수 있다. 상기 a2가 2 이상일 경우 복수의 R₂는 서로 동일하거나 상이하고, 상기 a3가 2 이상일 경우 복수의 R₃는 서로 동일하거나 상이하고, 상기 a4가 2 이상일 경우 복수의 R₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.



[0122] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(21) 중 하나로 표시될 수 있다:



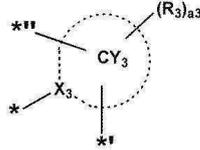
[0123] A2-1(6) through A2-1(13). A2-1(6) is a benzene ring with substituents (R2)a25, X2, and a double dagger symbol (‡). A2-1(7) is a benzene ring with substituents (R2)a24, X2, and a double dagger symbol (‡). A2-1(8) is a polycyclic system with substituents R2, R21, R22, R23, R24, R25, R26, R27, R28, and a double dagger symbol (‡). A2-1(9) is a polycyclic system with substituents R2, R21, R22, R23, R24, R25, R26, R27, R28, and a double dagger symbol (‡). A2-1(10) is a benzene ring with substituents (R2)a25, X2, and a dagger symbol (†). A2-1(11) is a benzene ring with substituents (R2)a24, X2, and a double dagger symbol (‡). A2-1(12) is a polycyclic system with substituents R2, R21, R22, R23, R24, R25, R26, R27, R28, and a double dagger symbol (‡). A2-1(13) is a polycyclic system with substituents R2, R21, R22, R23, R24, R25, R26, R27, R28, and a double dagger symbol (‡).

[0124] A2-1(14) through A2-1(17). A2-1(14) is a polycyclic system with substituents (R2)a25, X21, X2, and a double dagger symbol (‡). A2-1(15) is a polycyclic system with substituents (R2)a25, X21, X2, and a double dagger symbol (‡). A2-1(16) is a polycyclic system with substituents (R2)a25, X21, X2, and a dagger symbol (†). A2-1(17) is a polycyclic system with substituents (R2)a25, X21, X2, and a double dagger symbol (‡).

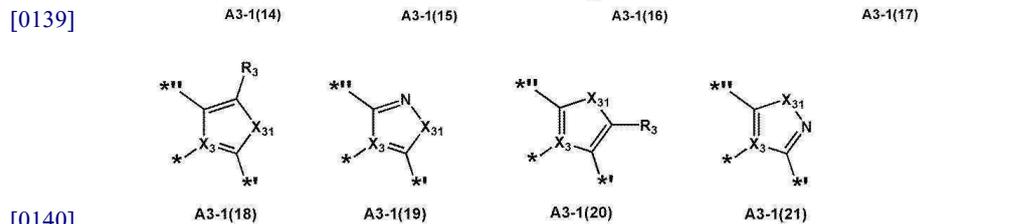
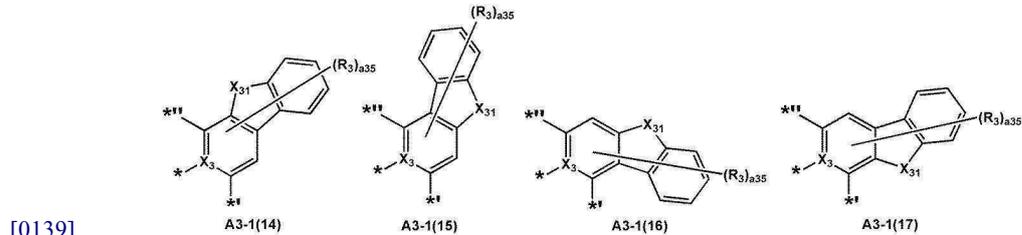
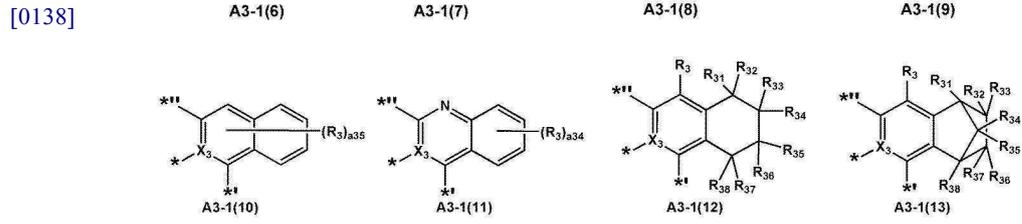
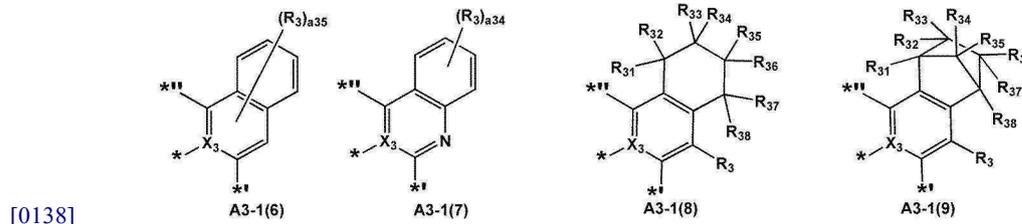
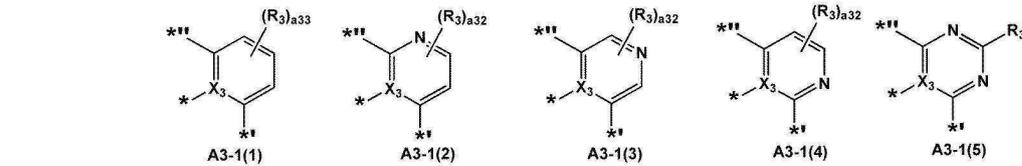
[0125] A2-1(18) through A2-1(21). A2-1(18) is a benzene ring with substituents R2, X21, X2, and a double dagger symbol (‡). A2-1(19) is a benzene ring with substituents X21, X2, and a double dagger symbol (‡). A2-1(20) is a benzene ring with substituents R2, X21, X2, and a dagger symbol (†). A2-1(21) is a benzene ring with substituents X21, X2, and a double dagger symbol (‡).

[0126] 상기 화학식 A2-1(1) 내지 A2-1(21) 중,
 [0127] X₂ 및 R₂에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,
 [0128] X₂₁은 O, S, N(R₂₁), C(R₂₁)(R₂₂) 또는 Si(R₂₁)(R₂₂)이고,
 [0129] R₂₁ 내지 R₂₈에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₂에 대한 설명을 참조하고,
 [0130] a25는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
 [0131] a24는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,
 [0132] a23은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

- [0133] a₂₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,
- [0134] *는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,
- [0135] *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고,
- [0136] *''는 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이다.

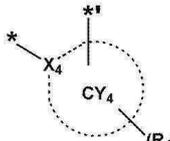


- [0137] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 A3-1(21) 중 하나로 표시될 수 있다: 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A3-1(1) 내지

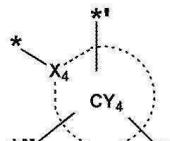


- [0140] 상기 화학식 A3-1(1) 내지 A3-1(21) 중,
- [0141] X₃ 및 R₃에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,
- [0142] X₃₁은 0, S, N(R₃₁), C(R₃₁)(R₃₂) 또는 Si(R₃₁)(R₃₂)이고,
- [0143] R₃₁ 내지 R₃₈에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₃에 대한 설명을 참조하고,
- [0144] a₃₅는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0145] a₃₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

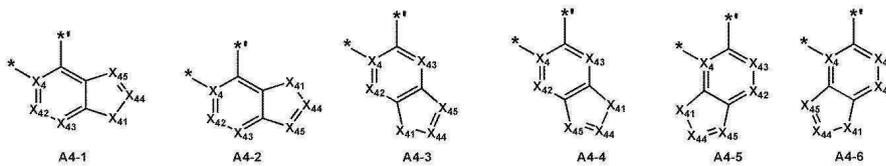
- [0147] a33은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
- [0148] a32는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,
- [0149] *는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,
- [0150] *'은 화학식 1 중 T₃와의 결합 사이트이고,
- [0151] *''는 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이다.
- [0152] 또 다른 구현예로서, 상기 화학식 1 중,



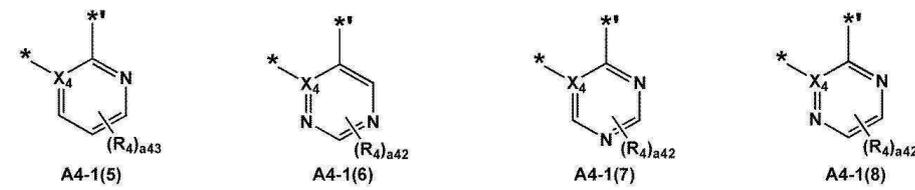
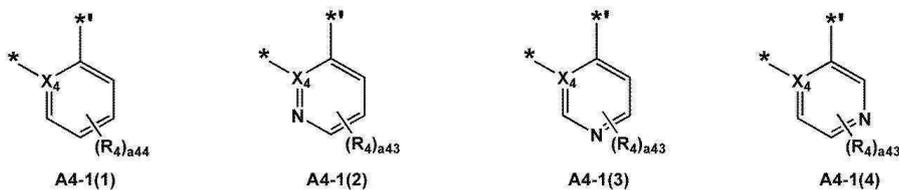
- [0153] n이 0이고, (R₄)_{a4} 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A4-1 내지 A4-6, A4-1(1) 내지 A4-1(44) 및 A4-2(1) 내지 A4-2(71) 중 하나로 표시되거나, 또는



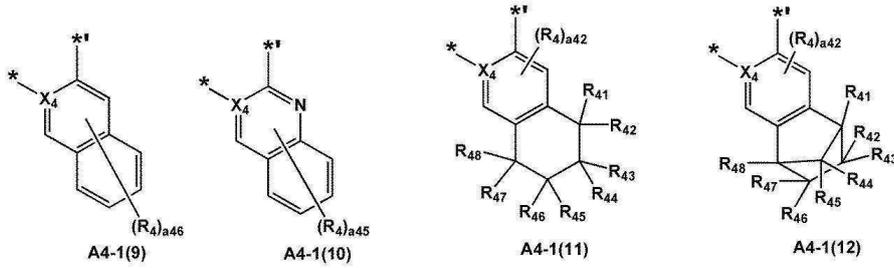
- [0154] n이 1이고, (R₄)_{a4} 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 A14-1 내지 A14-4 및 A14-1(1) 내지 A14-1(17) 중 하나로 표시될 수 있다:



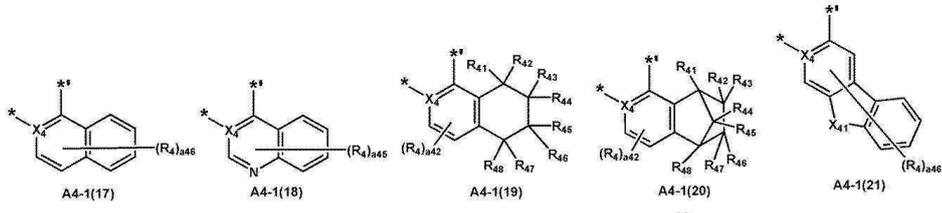
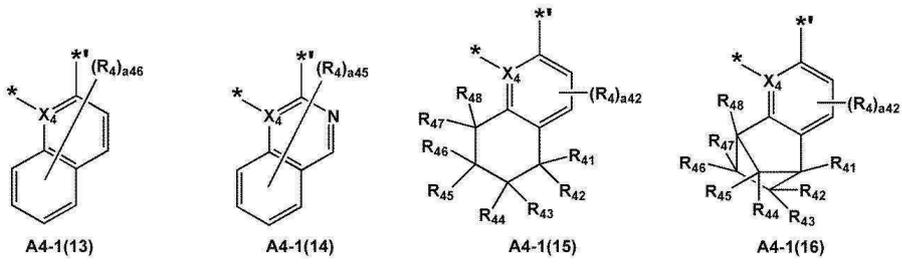
- [0155]



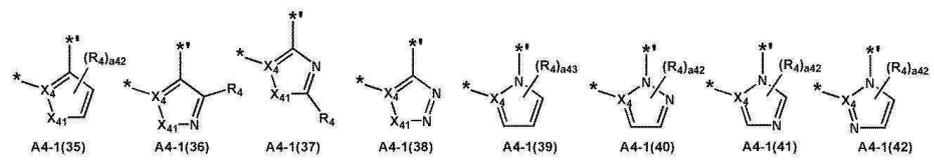
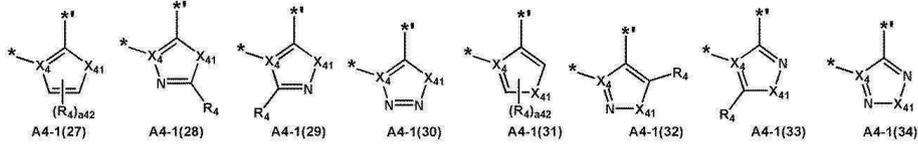
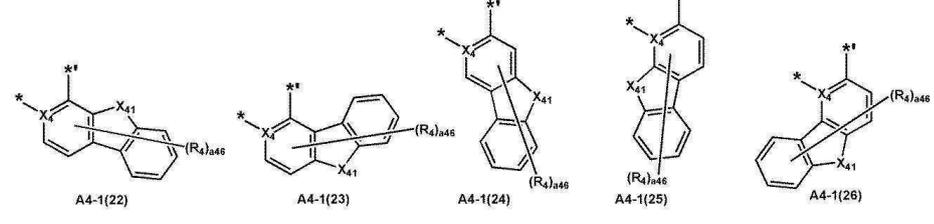
- [0156]



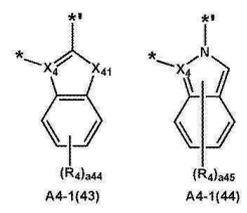
[0157]

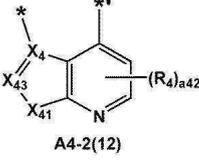
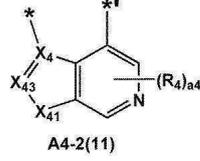
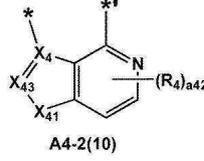
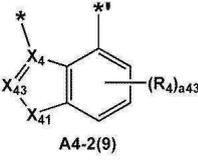
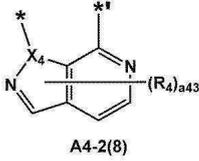
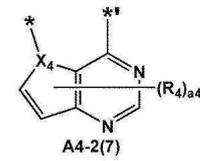
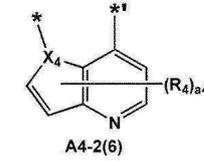
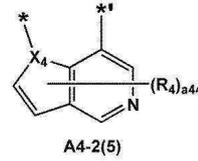
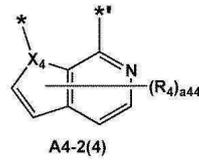
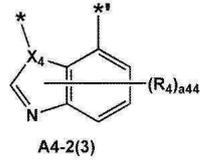
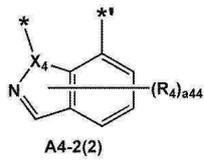
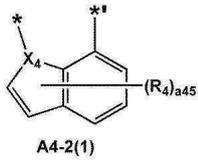


[0158]

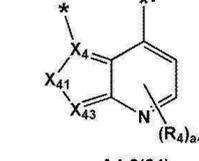
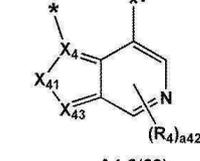
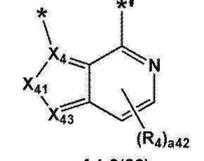
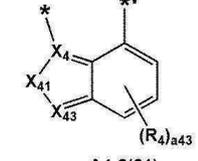
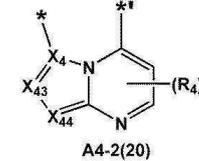
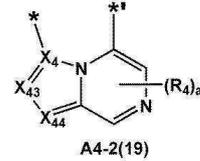
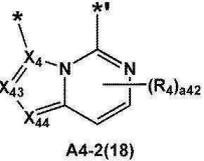
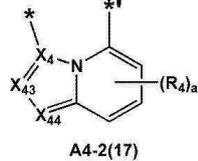
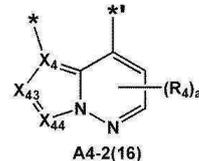
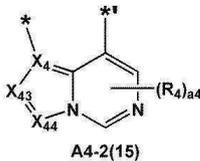
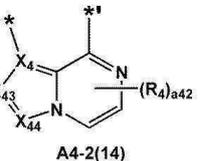
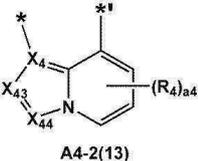


[0159]

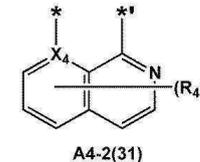
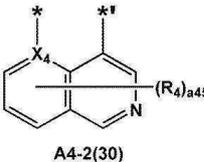
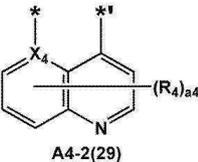
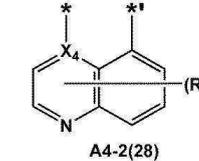
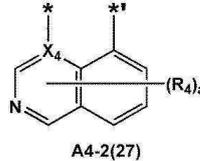
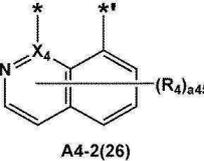
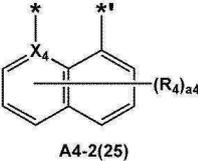




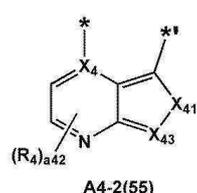
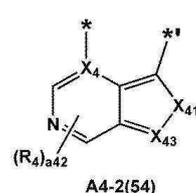
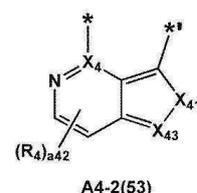
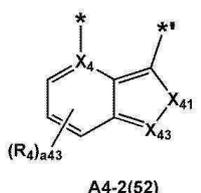
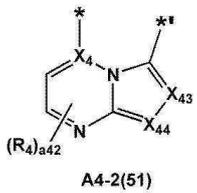
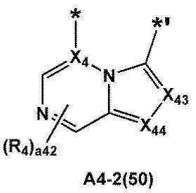
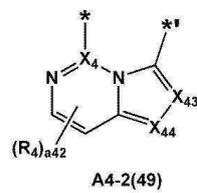
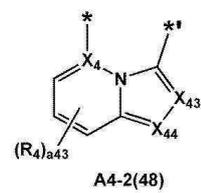
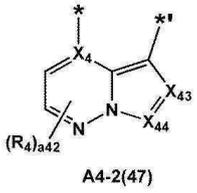
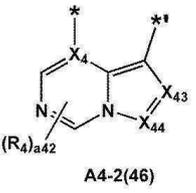
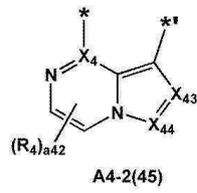
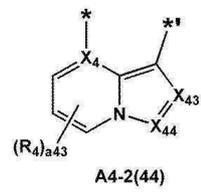
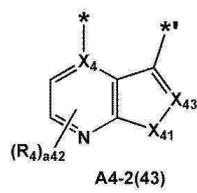
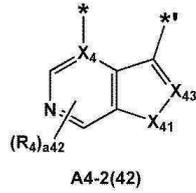
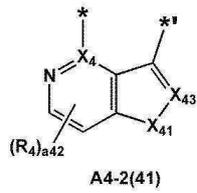
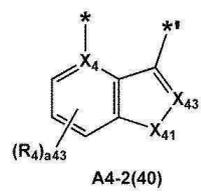
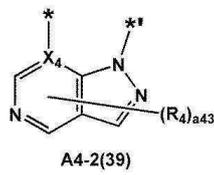
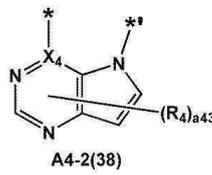
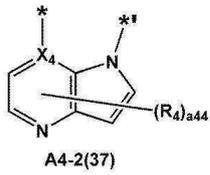
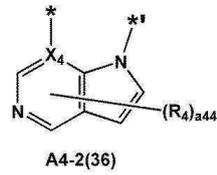
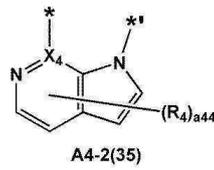
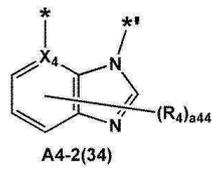
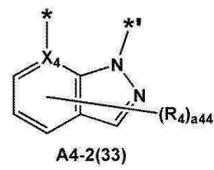
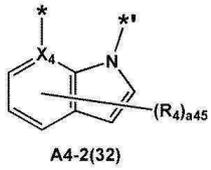
[0160]



[0161]

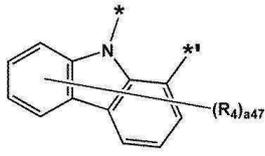


[0162]

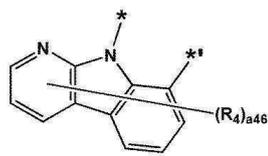


[0163]

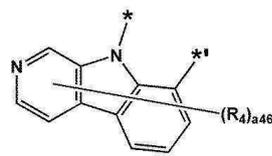
[0164]



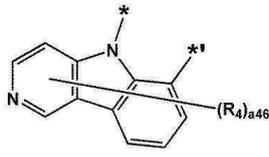
A4-2(56)



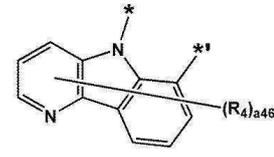
A4-2(57)



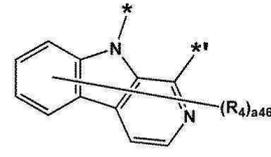
A4-2(58)



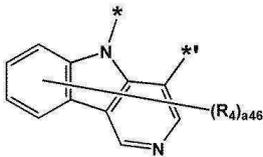
A4-2(59)



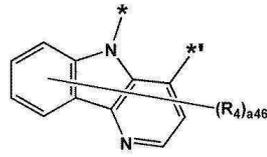
A4-2(60)



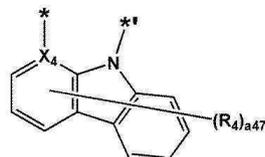
A4-2(61)



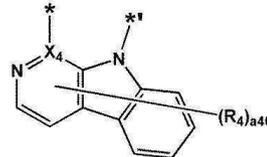
A4-2(62)



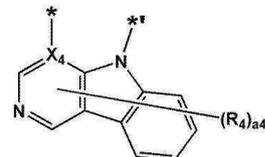
A4-2(63)



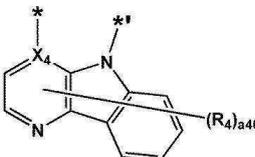
A4-2(64)



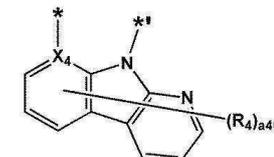
A4-2(65)



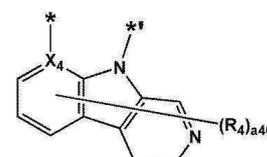
A4-2(66)



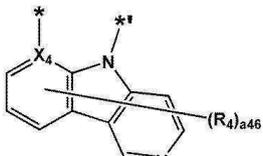
A4-2(67)



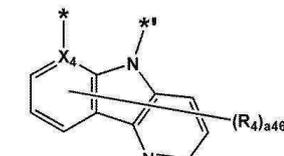
A4-2(68)



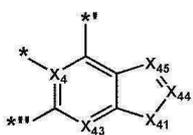
A4-2(69)



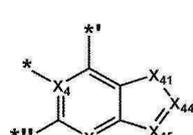
A4-2(70)



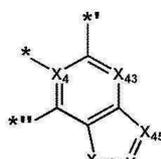
A4-2(71)



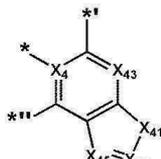
A14-1



A14-2



A14-3

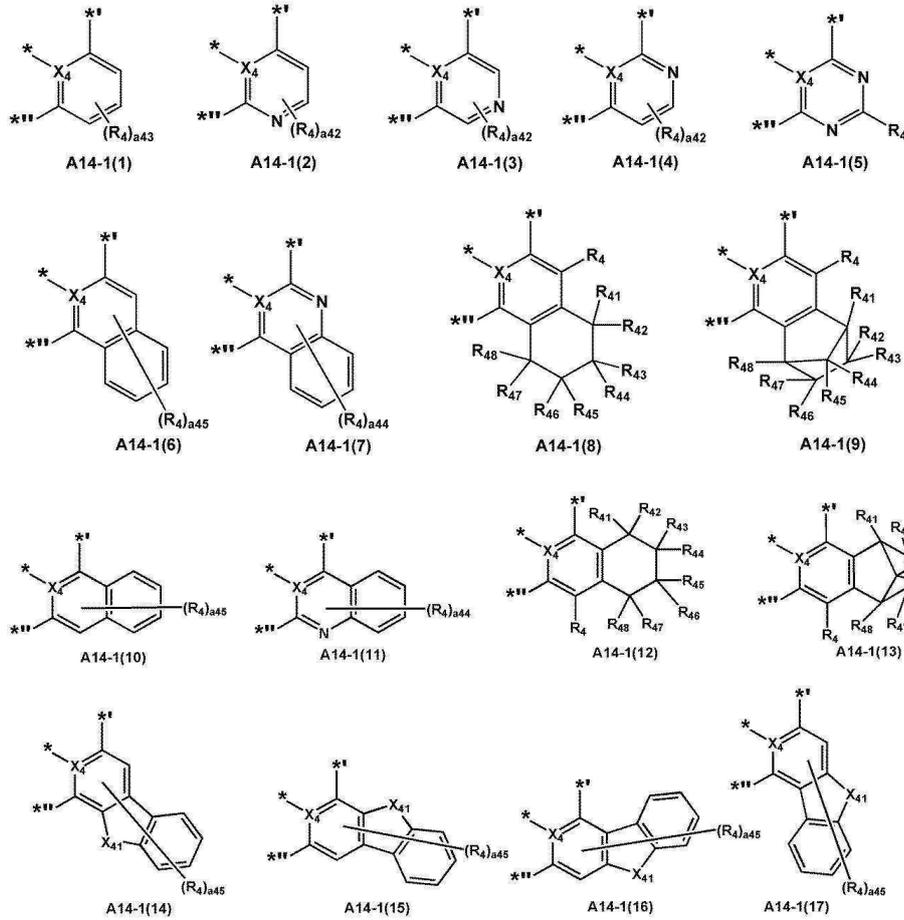


A14-4

[0165]

[0166]

[0167]



[0168]

[0169]

[0170] 상기 화학식 A4-1 내지 A4-6, A4-1(1) 내지 A4-1(44), A4-2(1) 내지 A4-2(71), A14-1 내지 A14-4 및 A14-1(1) 내지 A14-1(17) 중,

[0171] X_4 및 R_4 에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,

[0172] X_{41} 은 O, S, $N(R_{41})$, $C(R_{41})(R_{42})$ 또는 $Si(R_{41})(R_{42})$ 이고,

[0173] X_{42} 는 N 또는 $C(R_{42})$ 이고,

[0174] X_{43} 은 N 또는 $C(R_{43})$ 이고,

[0175] X_{44} 는 N 또는 $C(R_{44})$ 이고,

[0176] X_{45} 는 N 또는 $C(R_{45})$ 이고,

[0177] R_{41} 내지 R_{48} 에 대한 설명은 각각 상기 R_4 에 대한 설명을 참조하고,

[0178] a_{47} 은 0 내지 7의 정수 중에서 선택되고,

[0179] a_{46} 은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

[0180] a_{45} 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0181] a_{44} 은 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0182] a_{43} 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

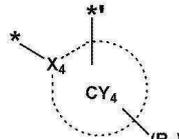
[0183] a_{42} 은 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

[0184] *는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

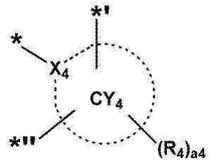
[0185] *'은 화학식 1 중 T_3 와의 결합 사이트이고,

[0186] "*"는 화학식 1 중 T₄와의 결합 사이트이다.

[0187] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중



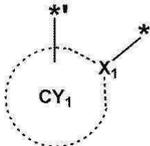
[0188] T₃는 단일 결합이고, n은 0이고, (R₄)_{a4} 로 표시된 모이어티는 상기 화학식 A4-1 내지 A4-6, A4-1(1) 내지 A4-1(44) 및 A4-2(1) 내지 A4-2(71) 중 하나로 표시되거나, 또는



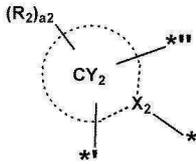
[0189] T₃는 단일 결합이 아니고, n은 1이고, (R₄)_{a4} 로 표시된 모이어티는 상기 화학식 A14-1 내지 A14-4 및 A14-1(1) 내지 A14-1(17) 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0190] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,

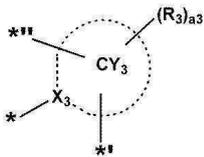
[0191] n은 0이고,



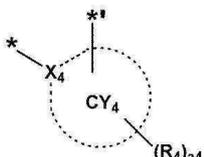
[0192] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 CY1-1 내지 CY1-8로 표시된 그룹 중에서 선택되고 (선택되거나),



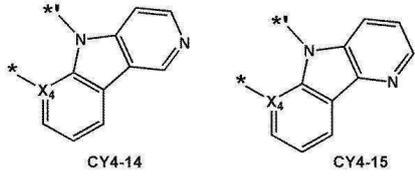
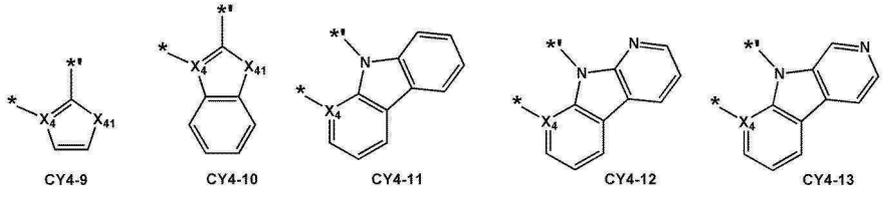
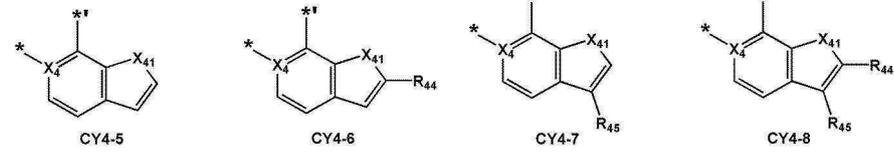
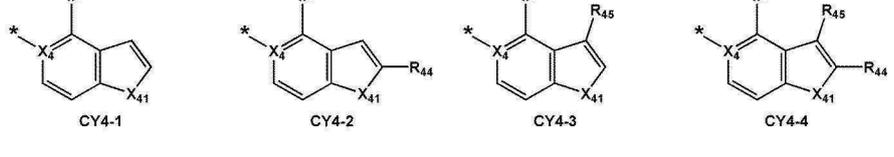
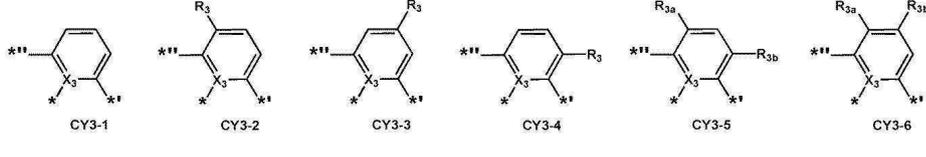
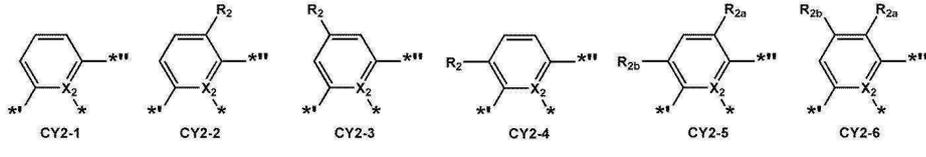
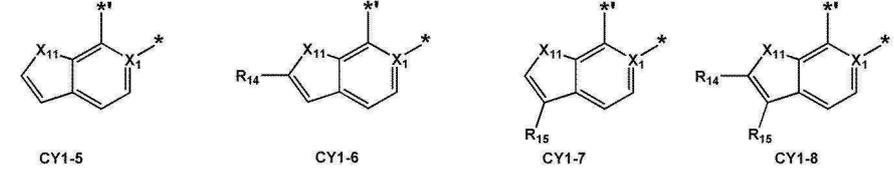
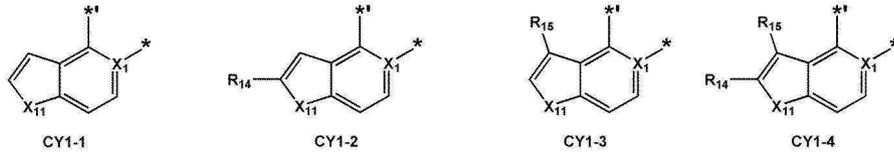
[0193] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 CY2-1 내지 CY2-6으로 표시된 그룹 중에서 선택되고 (선택되거나),



[0194] 로 표시된 모이어티는 하기 화학식 CY3-1 내지 CY3-6으로 표시된 그룹 중에서 선택되고 (선택되거나),



[0195] 나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0196]

[0197]

[0198]

[0199]

[0200]

[0201] 상기 화학식 CY1-1 내지 CY1-8, CY2-1 내지 CY2-6, CY3-1 내지 CY3-6 및 CY4-1 내지 CY4-15 중,

[0202] X₁ 내지 X₄, X₁₁, R₂, R₃, R₁₄ 및 R₁₅에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0203] X₄₁은 O, S, N(R₄₁), C(R₄₁)(R₄₂) 또는 Si(R₄₁)(R₄₂)이고,

[0204] R_{2a} 및 R_{2b}에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₂에 대한 설명을 참조하고,

[0205] R_{3a} 및 R_{3b}에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₃에 대한 설명을 참조하고,

[0206] R₄₁, R₄₂, R₄₄ 및 R₄₅에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₄에 대한 설명을 참조하고,

[0207] R₁₄, R₁₅, R₂, R_{2a}, R_{2b}, R₃, R_{3a}, R_{3b}, R₄₁, R₄₂, R₄₄ 및 R₄₅은 수소가 아니고,

[0208] *는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

[0209] 화학식 CY1-1 내지 CY1-8 중 *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고,

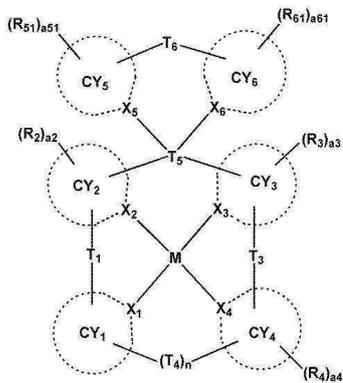
[0210] 화학식 CY2-1 내지 CY2-6 중 *'은 화학식 1 중 T₁과의 결합 사이트이고, *''은 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이고,

[0211] 화학식 CY3-1 내지 CY3-6 중 *'은 화학식 1 중 T₃와의 결합 사이트이고, *''은 화학식 1 중 T₂와의 결합 사이트이고,

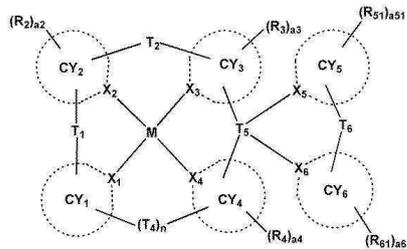
[0212] 화학식 CY4-1 내지 CY4-15 중 *'는 화학식 1 중 T₃와의 결합 사이트이다.

[0213] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1(1) 내지 1(6) 중 하나로 표시될 수 있다:

[0214] <화학식 1(1)>

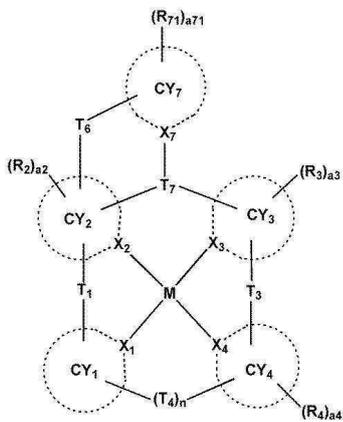


<화학식 1(2)>

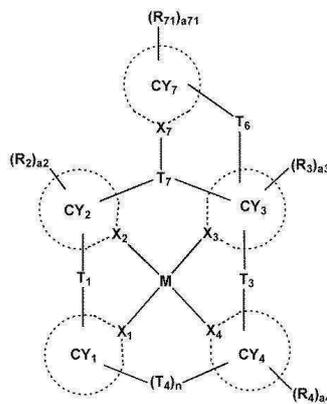


[0215]

[0216] <화학식 1(3)>

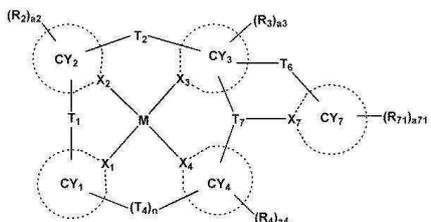


<화학식 1(4)>

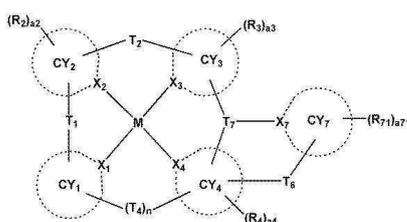


[0217]

[0218] <화학식 1(5)>



<화학식 1(6)>



[0219]

[0220] 상기 화학식 1(1) 내지 1(6) 중

[0221] M, X₁ 내지 X₄, CY₁ 내지 CY₄, T₁ 내지 T₄, n, R₂ 내지 R₄ 및 a₂ 내지 a₄에 대한 설명은 각각, 본 명세서에 기재

된 바를 참조하고,

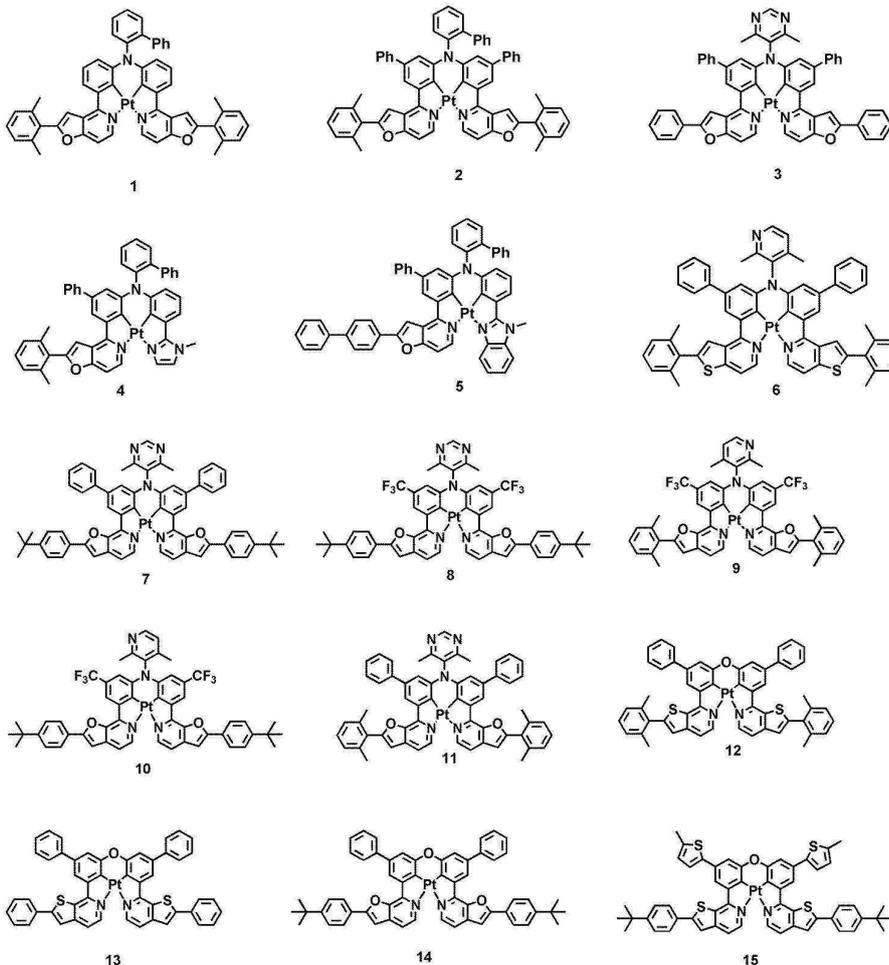
- [0222] CY₅ 내지 CY₇은 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹이고,
 - [0223] X₅ 내지 X₇은 서로 독립적으로, C 또는 N이고,
 - [0224] R₅₁ 내지 R₇₁에 대한 설명은 서로 독립적으로, 본 명세서 중 R₂에 대한 설명을 참조하고,
 - [0225] a₅₁ 내지 a₇₁은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고,
 - [0226] T₅는 C, Si 또는 Ge이고,
 - [0227] T₇은 B, N 또는 P이고,
 - [0228] T₆는 단일 결합, *-N[(L₇)_{c7}-(R₇)]-*, *-B(R₇)-*, *-P(R₇)-*, *-C(R₇)(R₈)-*, *-Si(R₇)(R₈)-*, *-Ge(R₇)(R₈)-*, *-S-*, *-Se-*, *-O-*, *-C(=O)-*, *-S(=O)-*, *-S(=O)₂-*, *-C(R₇)=C(R₈)-*, *-C(=S)-* 및 *-C≡C-*
- 중에서 선택되고,
- [0229] 상기 L₇ 및 c₇에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L₅ 및 c₅에 대한 설명을 참조하고,
 - [0230] 상기 R₇ 및 R₈에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₅에 대한 설명을 참조한다.
 - [0231] 상기 화학식 1(1) 내지 1(6) 중 CY₅ 및 CY₆에 대한 보다 상세한 설명은 각각 본 명세서 중 CY₂ 내지 CY₄에 대한 설명을 참조한다.
 - [0232] 상기 화학식 1 중 i) 서로 이웃한 복수의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, ii) 서로 이웃한 복수의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, iii) 서로 이웃한 복수의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, iv) R₂ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, v) R₅ 및 R₆ 중 하나와 R₂ 내지 R₄ 중 하나는, 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.
 - [0233] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 i) 서로 이웃한 복수의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 형성된 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, ii) 서로 이웃한 복수의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 형성된 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, iii) 서로 이웃한 복수의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 형성된 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, iv) R₂ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 형성된 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 및 v) R₅ 및 R₆ 중 하나와 R₂ 내지 R₄ 중 하나는, 선택적으로, 서로 결합하여, 형성된 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 서로 독립적으로,
 - [0234] 시클로펜타디엔 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헵탄 그룹, 아다만탄 그룹, 비시클로-헵탄(bicycle-heptanes) 그룹, 비시클로-옥탄 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 테트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 디하이드로나프탈렌 그룹, 페날렌 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 인덴 그룹, 인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자인덴 그룹, 아자인돌 그룹 및 아자벤조실롤 그룹;
 - [0235] 적어도 하나의 R_{10a}로 치환된, 시클로펜타디엔 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헵탄 그룹, 아다만탄 그룹, 비시클

로-헵탄(bicycle-heptanes) 그룹, 비시클로-옥탄 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 테트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 디하이드로나프탈렌 그룹, 페날렌 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 인덴 그룹, 인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자인덴 그룹, 아자인돌 그룹 및 아자벤조실롤 그룹;

- [0236] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0237] 상기 R_{10a}에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂에 대한 설명을 참조한다.

[0238] 본 명세서 중 "아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저물 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저물 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹 및 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹"이란 용어는, 각각, "인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저물 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹 및 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹"과 동일한 백분을 갖되, 이들의 고리를 형성하는 탄소들 중 적어도 하나가 질소로 치환된, 헤테로환을 의미한다.

[0239] 상기 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 15 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



- [0241] 상기 화합물 1 내지 15 중 Ph는 페닐기를 나타낸다.
- [0242] 상기 화학식 1 중 X₁과 M 사이의 결합은 배위 결합이고, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 2개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 1개의 결합은 배위 결합이다. 이로써, 상기 유기금속 화합물은 전기적으로 중성(neutral)이 되므로, 분자 안정성 및 열 안정성이 높아질 수 있다.

[0244] 상기 화학식 1 중, i) n이 0일 경우, CY₁은 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 중 하나로 표시된 그룹이고, ii) n이 1일 경우, CY₁은 상기 화학식 A11-1 내지 A11-4 중 하나로 표시된 그룹일 수 있다. 이로써, 상기 유기금속 화합물의 일중항 에너지와 삼중항 에너지 간의 차가 상대적으로 커져, 상기 유기금속 화합물의 대부분의 분자내 에너지가 삼중항 에너지 레벨에 모일 수 있게 되는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 매우 가파른(stiff) 파형(예를 들면, EL 스펙트럼의 최대 발광 파장(즉, 피크 발광 파장)으로부터 -100nm 내지 0nm의 거리(예를 들면, -50nm 내지 0nm의 거리)에 있는 단파장측 테일(tail)의 발광 세기가 현저히 감소된 파형)의 전계발광(EL) 스펙트럼을 가질 수 있다. 이로써, 상기 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면 유기 발광 소자는 향상된 발광 효율 및 우수한 색순도를 가질 수 있다.

[0245] 또한, 상기 화학식 1 중 X₁은 N이고, 상기 화학식 A1-1 내지 A1-6 및 A11-1 내지 A11-4 중 X₁₄는 C(R₁₄)이고, X₁₅는 C(R₁₅)일 경우, R₁₄와 R₁₅는 서로 연결되지 않는다. 이로써, 상기 유기금속 화합물은 예를 들어, 적색광 방출에 효과적인 색순도 및 효율을 제공할 수 있다.

[0246] 예를 들어, 상기 화합물 중 일부에 대한 HOMO, LUMO, 에너지 밴드갭(E_g), 단일항(S₁) 및 삼중항(T₁) 에너지 레벨을 Gaussian 프로그램의 DFT 방법을 이용하여 (B3LYP, 6-31G(d,p) 수준에서 구조 최적화함) 평가한 결과는 하기 표 1과 같다.

표 1

화합물 No.	HOMO(eV)	LUMO(eV)	E _g (eV)	S ₁ 에너지 레벨 (eV)	T ₁ 에너지 레벨 (eV)
1	-4.390	-1.628	2.762	2.146	1.878
2	-4.409	-1.683	2.726	2.150	1.891
3	-4.616	-1.963	-	-	1.878
4	-4.298	-1.480	-	-	1.976
5	-4.351	-1.750	-	-	1.916
6	-4.547	-1.770	2.777	2.165	1.900
7	-4.884	-2.011	-	-	-
13	-4.801	-2.115	-	-	1.944
14	-4.707	-1.976	-	-	1.989
15	-4.681	-2.041	-	-	1.909

[0248] 상기 표 1로부터, 화학식 1로 표시된 유기 금속 화합물은 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 도펀트로 사용하기에 적합한 전기적 특성을 가짐을 확인할 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 인식할 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 유기층, 예를 들면, 상기 유기층 중 발광층의 도펀트로 사용하기 적합할 수 있는 바, 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 적어도 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0249] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한 유기층을 구비함으로써, 저구동 전압, 고효율, 고전력, 고양자 효율, 장수명 및 낮은 롤-오프비와 우수한 색순도를 가질 수 있다.

[0250] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있다. 이 때, 상기 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 하고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함할 수 있다(즉, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 함량은 상기 호스트의 함량보다 작음).

[0251] 본 명세서 중 "(유기층이) 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 유기금속 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 유기금속 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0252] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물

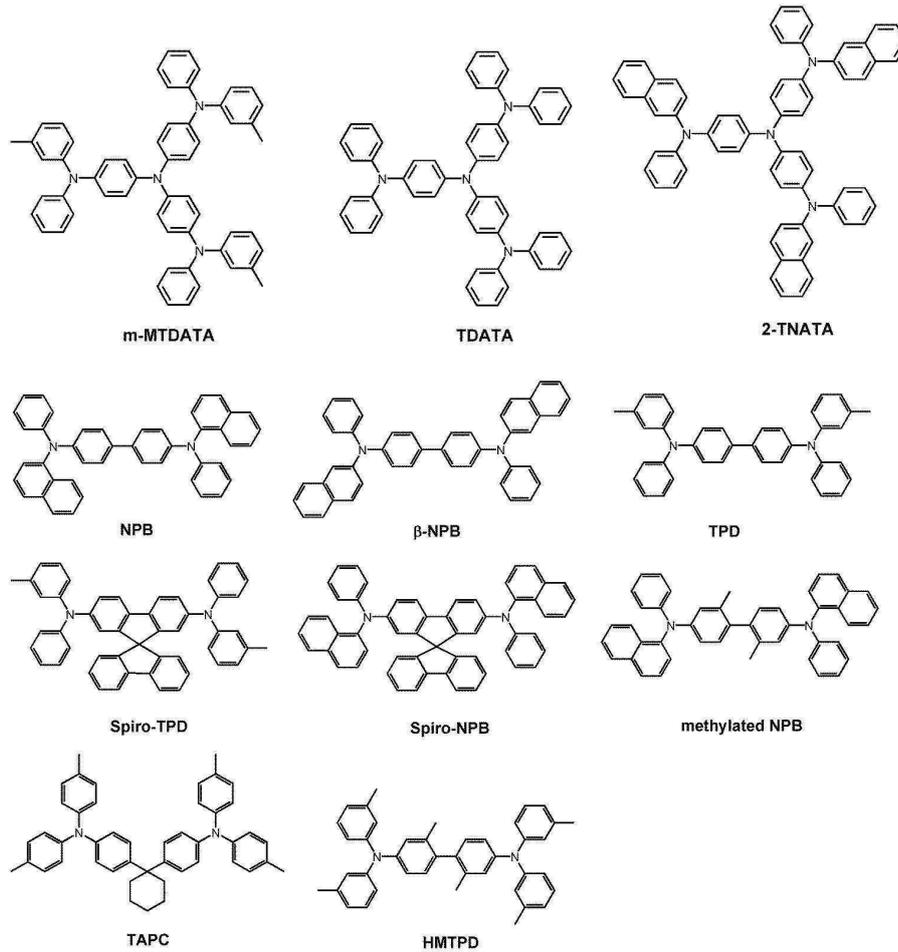
1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)할 수 있다.

- [0253] 상기 제1전극은 정공 주입 전극인 애노드이고 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드이거나, 상기 제1전극은 전자 주입 전극인 캐소드이고 상기 제2전극은 정공 주입 전극인 애노드이다.
- [0254] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자 중 상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고, 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고, 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0255] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"은 유기 화합물뿐만 아니라, 금속을 포함한 유기금속 착체 등도 포함할 수 있다.
- [0256] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다. 유기 발광 소자(10)는 제1전극(11), 유기층(15) 및 제2전극(19)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.
- [0257] 상기 제1전극(11) 하부 또는 제2전극(19) 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0258] 상기 제1전극(11)은 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 애노드일 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등과 같은 금속을 이용할 수 있다.
- [0259] 상기 제1전극(11)은 단일층 또는 2 이상의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(11)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0260] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.
- [0261] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.
- [0262] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.
- [0263] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 버퍼층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0264] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층만을 포함하거나, 정공 수송층만을 포함할 수 있다. 또는, 상기 정공 수송 영역은, 제1전극(11)로부터 차례로 적층된, 정공 주입층/정공 수송층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 구조를 가질 수 있다.
- [0265] 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(11) 상부에 진공증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0266] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500°C, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0267] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것

은 아니다.

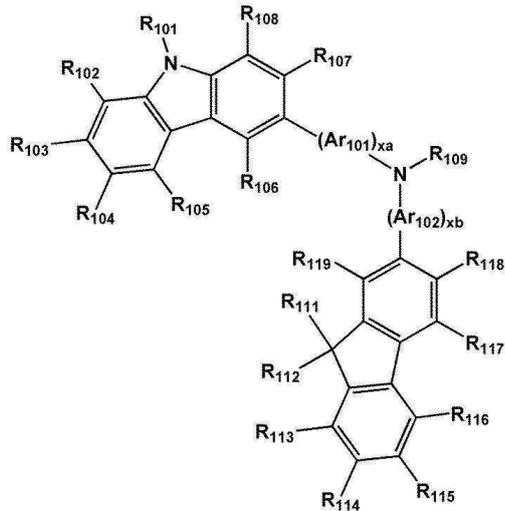
[0268] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.

[0269] 상기 정공 수송 영역은, 예를 들면, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β -NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, methylated-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid: 폴리아닐린/캄퍼술포산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



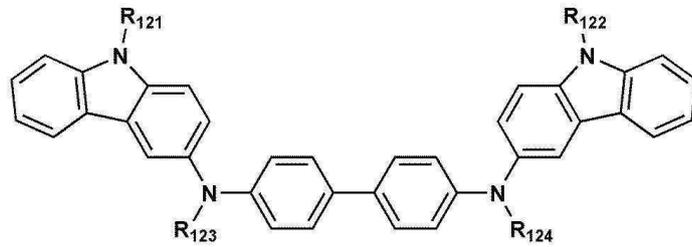
[0271]

[0272] <화학식 201>



[0273]

[0274] <화학식 202>



[0275]

[0276] 상기 화학식 201 중, Ar₁₀₁ 및 Ar₁₀₂는 서로 독립적으로,

[0277] 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 콰이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기; 및

[0278] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 콰이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기;

[0279] 중에서 선택될 수 있다.

[0280] 상기 화학식 201 중, 상기 xa 및 xb는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수, 또는 0, 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, 상기 xa는 1이고, xb는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0281] 상기 화학식 201 및 202 중, 상기 R₁₀₁ 내지 R₁₀₈, R₁₁₁ 내지 R₁₁₉ 및 R₁₂₁ 내지 R₁₂₄는 서로 독립적으로,

[0282] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등) 및 C₁-C₁₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기 등);

[0283] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기,

카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 하나 이상으로 치환된, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기;

[0284] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 및

[0285] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기;

[0286] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0287] 상기 화학식 201 중, R₁₀₉는,

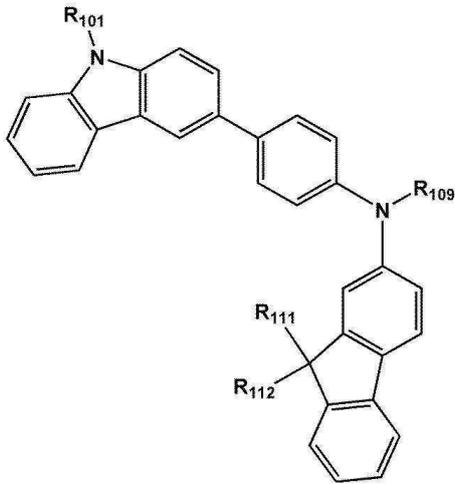
[0288] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기; 및

[0289] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기;

[0290] 중에서 선택될 수 있다.

[0291] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

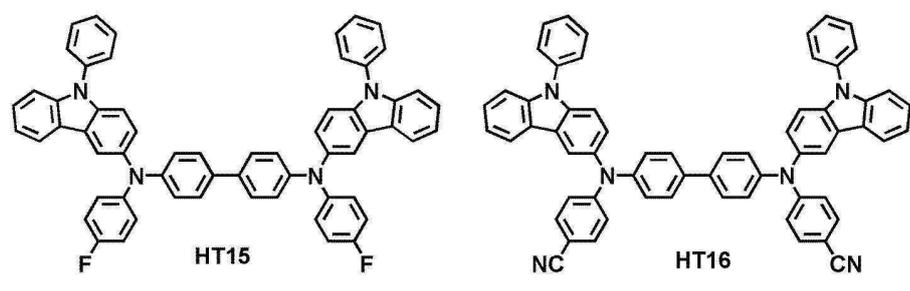
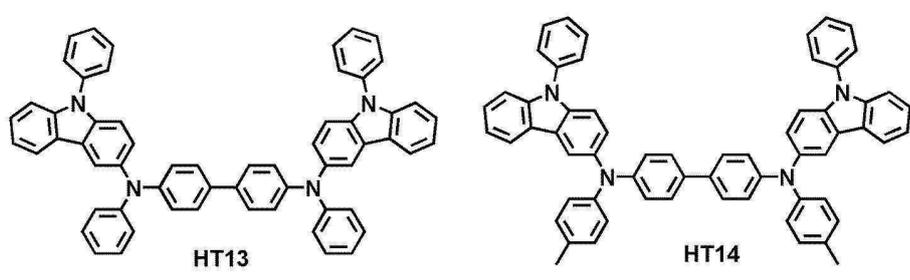
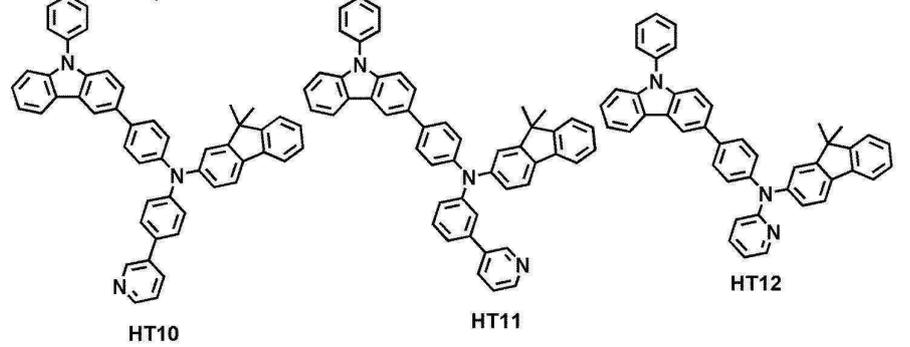
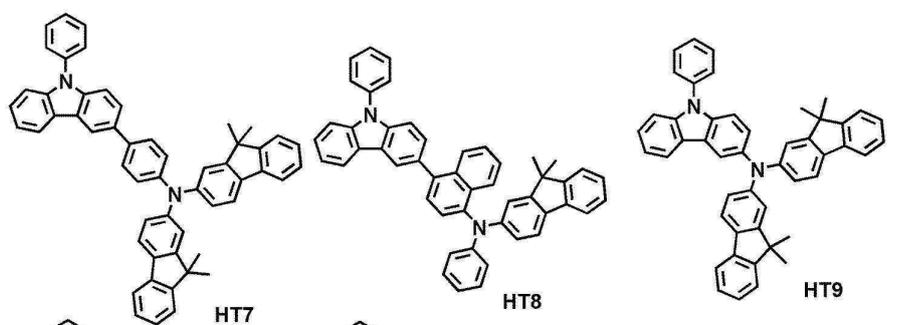
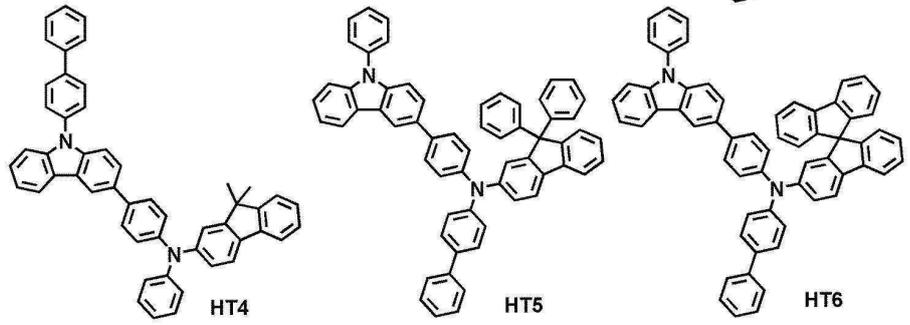
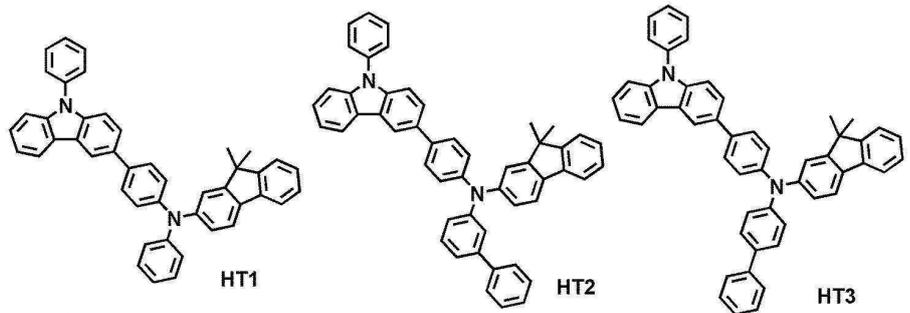
[0292] <화학식 201A>



[0293]

[0294] 상기 화학식 201A 중, R₁₀₁, R₁₁₁, R₁₁₂ 및 R₁₀₉에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

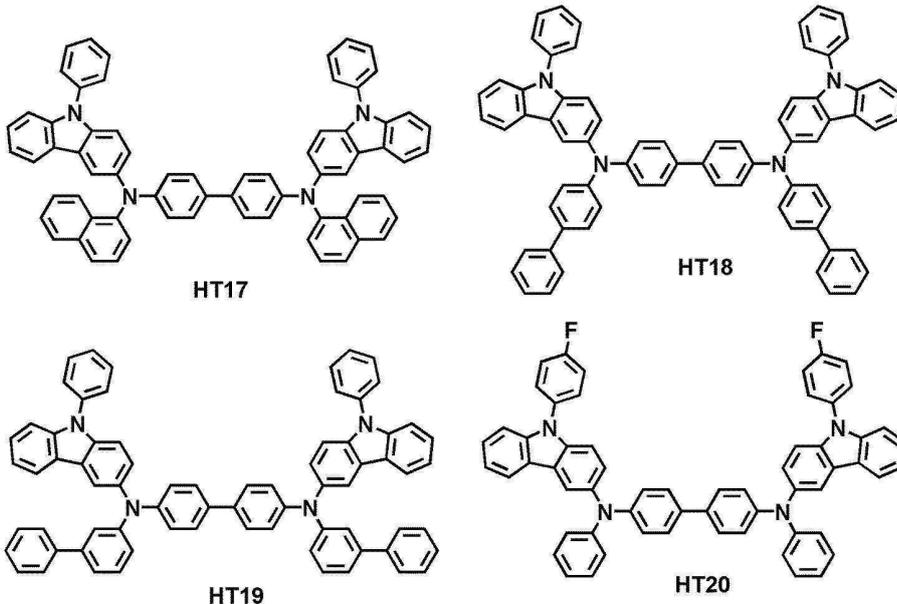
[0295] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0296]

[0297]

[0298]



[0299]

[0300]

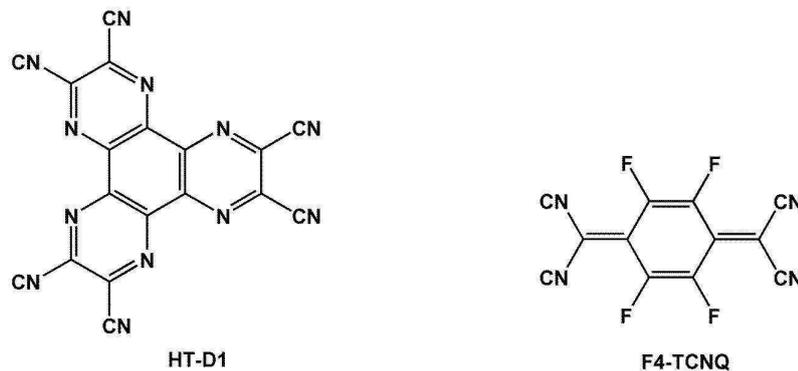
상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 하나를 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0301]

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

[0302]

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



[0303]

상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

[0305]

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

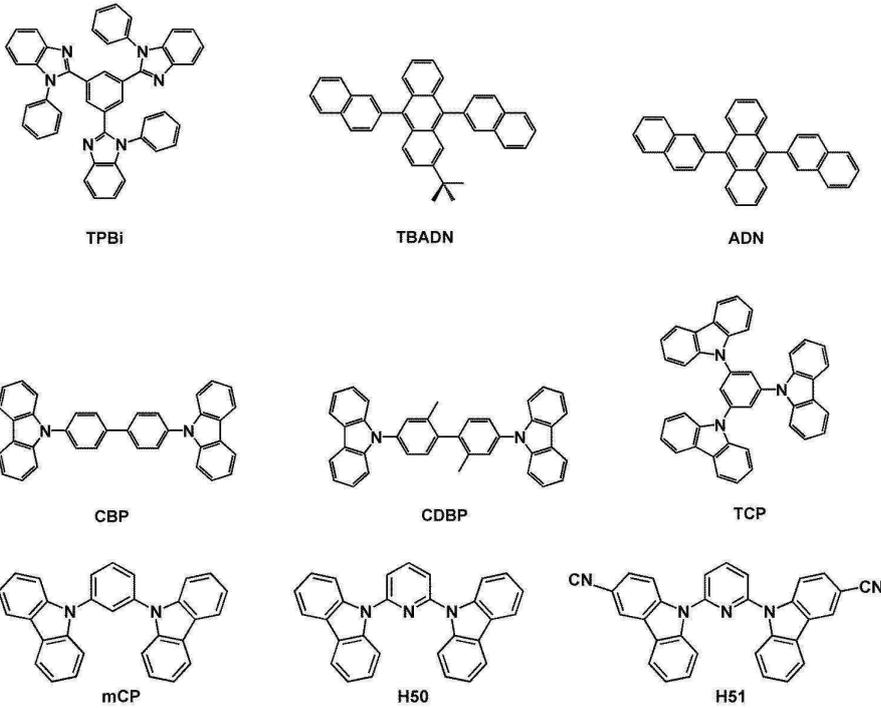
[0306]

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

[0307] 한편, 상기 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 상기 전자 저지층 재료는, 상술한 바와 같은 정공 수송 영역에 사용될 수 있는 물질 및 후술하는 호스트 물질 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 전자 저지층 재료로서, 후술하는 mCP를 사용할 수 있다.

[0308] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한다.

[0309] 상기 호스트는 하기 TPBi, TBADN, ADN("DNA"라고도 함), CBP, CDBP, TCP, mCP, 화합물 H50 및 화합물 H51 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:

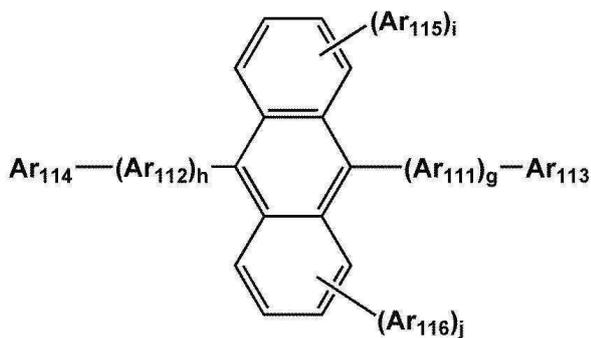


[0310]

[0311]

[0312] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 더 포함할 수 있다:

[0313] <화학식 301>



[0314]

[0315] 상기 화학식 301 중, Ar_{111} 및 Ar_{112} 는 서로 독립적으로,

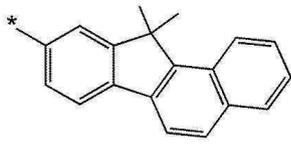
[0316] 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기; 및

[0317] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기;

[0318] 중에서 선택될 수 있다.

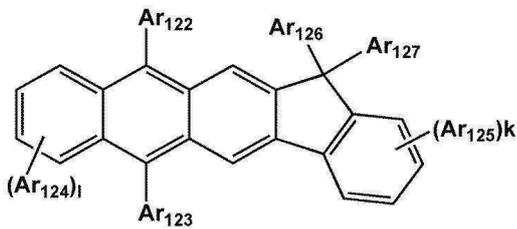
[0319] 상기 화학식 301 중 상기 Ar_{113} 내지 Ar_{116} 은 서로 독립적으로,

- [0320] C₁-C₁₀알킬기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 콰이레닐기; 및
- [0321] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 콰이레닐기;
- [0322] 중에서 선택될 수 있다.
- [0323] 상기 화학식 301 중 g, h, i 및 j는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수, 예를 들면, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0324] 상기 화학식 301 중, Ar₁₁₃ 내지 Ar₁₁₆은 서로 독립적으로,
- [0325] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기;
- [0326] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 콰이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기;
- [0327] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 콰이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 콰이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기; 및



- [0328] ;
- [0329] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0330] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 302로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

<화학식 302>

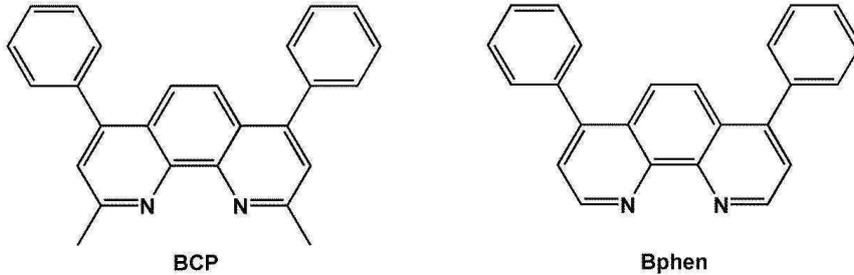


- [0332]
- [0333] 상기 화학식 302 중 Ar₁₂₂ 내지 Ar₁₂₅에 대한 상세한 설명은 상기 화학식 301의 Ar₁₁₃에 대한 설명을 참조한다.
- [0334] 상기 화학식 302 중 Ar₁₂₆ 및 Ar₁₂₇은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기 또는 프로필기)일 수 있다.
- [0335] 상기 화학식 302 중 k 및 l은 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 k 및 l은 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0336] 상기 유기 발광 소자가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및/또는 청색 발광층이 적층된 구조를 가짐으로써, 백색광을 방출할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.
- [0337] 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0338] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.
- [0339] 다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.
- [0340] 전자 수송 영역은 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0341] 예를 들어, 전자 수송 영역은 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층 또는 전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 전자 수송층은 단일층 또는 2 이상의 서로 다른 물질을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

[0342] 상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참조한다.

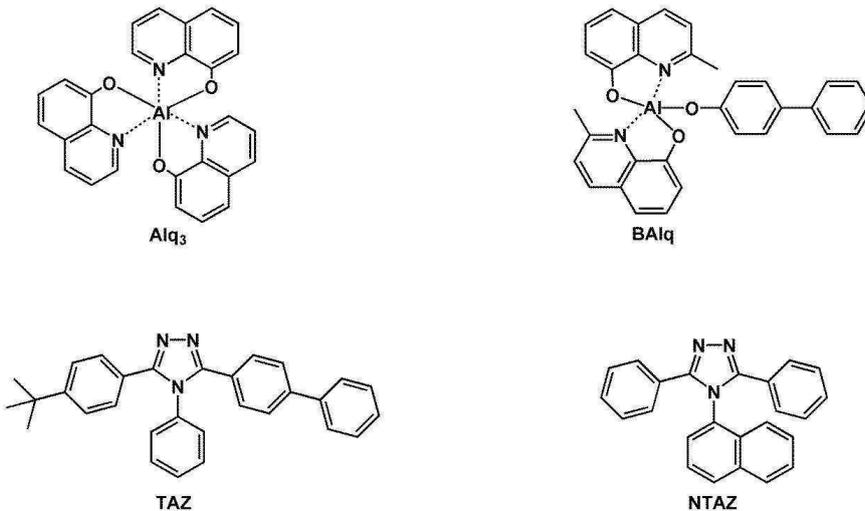
[0343] 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP, Bphen 및 Balq 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0344]

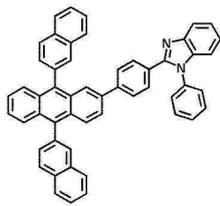
[0345] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0346] 상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq₃, Balq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.

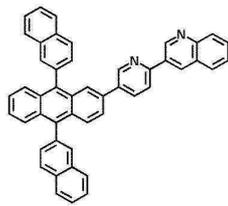


[0347]

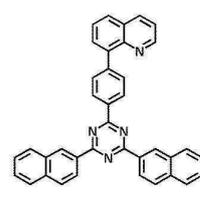
[0348] 또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 내지 ET25 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



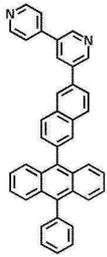
ET1



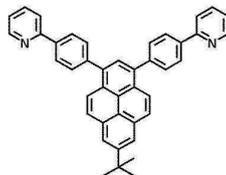
ET2



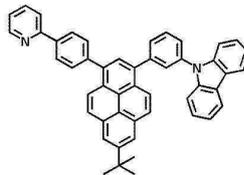
ET3



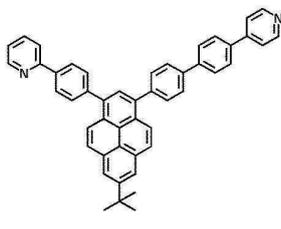
ET4



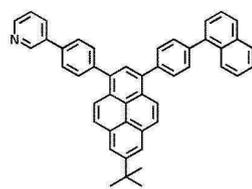
ET5



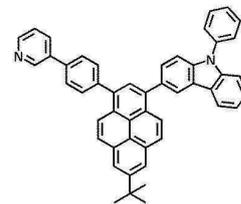
ET6



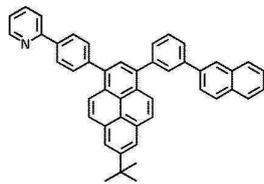
ET7



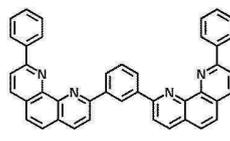
ET8



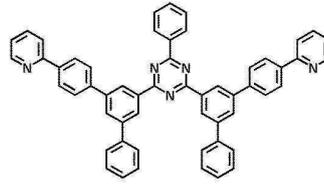
ET9



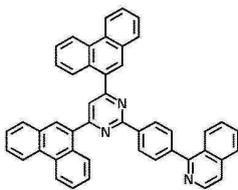
ET10



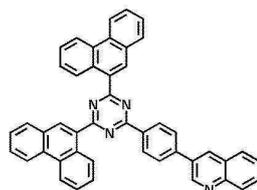
ET11



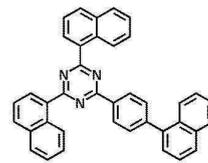
ET12



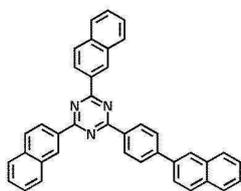
ET13



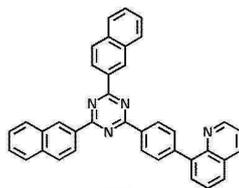
ET14



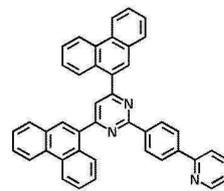
ET15



ET16



ET17

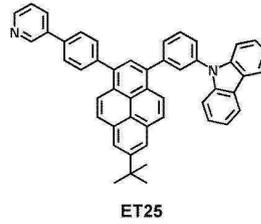
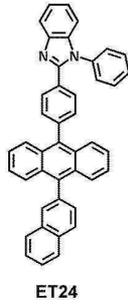
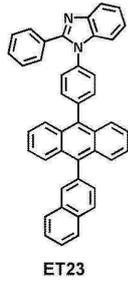
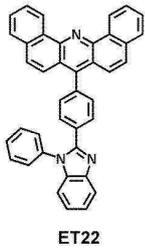
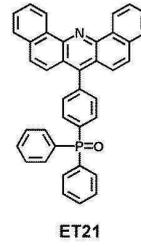
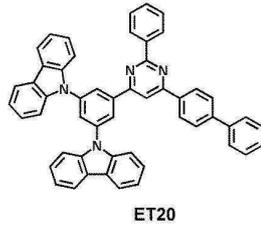
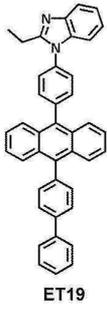


ET18

[0349]

[0350]

[0351]



[0352]

[0353]

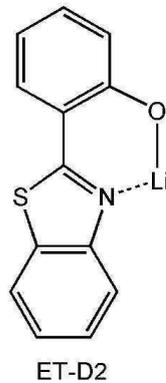
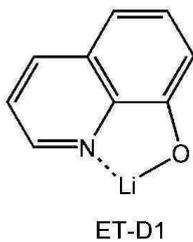
[0354]

[0355]

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

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

상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다.



[0356]

[0357]

[0358]

[0359]

[0360]

[0361]

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

상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li₂O 및 BaO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

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

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

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

- [0362] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.
- [0363] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 고발광 효율을 제공할 수 있으므로, 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물은 높은 진단 효율을 가질 수 있다.
- [0364] 상기 진단용 조성물은, 각종 진단용 키트, 진단 시약, 바이오 센서, 바이오 마커 등에 다양하게 응용될 수 있다.
- [0365] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 포화 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0366] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는 -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0367] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0368] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0369] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0370] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranlyl), 테트라히드로티오펜기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0371] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0372] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-디히드로퓨라닐기, 2,3-디히드로티오펜기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0373] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

- [0374] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.
- [0375] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.
- [0376] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)를 갖는 1가 그룹(예를 들면, 8 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예는 플루오레닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0377] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)를 갖는 1가 그룹(예를 들면, 1 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은, 카바졸일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0378] 본 명세서 중 C₇-C₆₀알킬아릴기 및 C₂-C₆₀알킬헤테로아릴기는 적어도 하나의 C₁-C₆₀알킬기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기 및 C₁-C₆₀헤테로아릴기를 각각 가리킨다.
- [0379] 본 명세서 중 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 5 내지 30개의 탄소만을 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0380] 본 명세서 중 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 1 내지 30개의 탄소 외에, N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 적어도 하나 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0381] 상기 치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₇-C₆₀알킬아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₇-C₆₀알킬헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0382] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0383] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₇-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅), -B(Q₁₆)(Q₁₇)

및 -P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0384] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₇-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0385] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₇-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅), -B(Q₂₆)(Q₂₇) 및 -P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀알킬아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₇-C₆₀알킬헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0386] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), -B(Q₃₆)(Q₃₇) 및 -P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉);

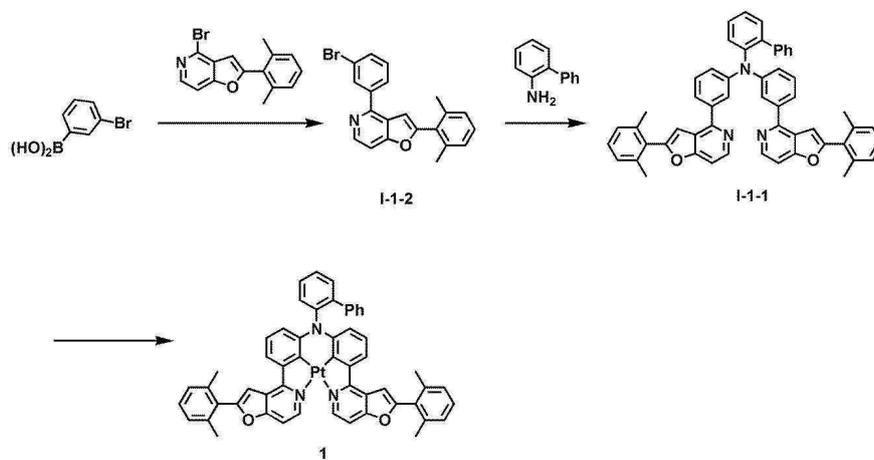
[0387] 중에서 선택되고,

[0388] 상기 Q₁ 내지 Q₉, Q₁₁ 내지 Q₁₉, Q₂₁ 내지 Q₂₉ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0389] 이하, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 하기 합성에 중 'A' 대신 'B'를 사용하였다"란 표현 중 'B'의 사용량과 'A'의 사용량은 몰당량 기준으로 동일하다.

[0390] [실시예]

[0391] **합성에 1: 화합물 1의 합성**



[0392]

[0393] 1) 중간체 I-1-2의 합성

[0394] 반응기에 3-브로모페닐보론산 10.0g (49.8 mmol), 톨루엔 80ml 및 에탄올 15ml을 첨가하였다. 여기에, 4-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[3,2-c]pyridine 12.5g (41.5mmol), Pd(PPh₃)₄ 3.3g (2.90 mmol) 및 2.0M 탄산나트륨 용액 15ml을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 110℃에서 18시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄 100ml에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 중간체 I-1-2 11.8g (31 mmol, 수율 75%)을 수득하였다.

[0395] LC-MS m/z = 378(M+H)⁺

[0396]

[0397] 2) 중간체 I-1-1의 합성

[0398] 반응기에 중간체 I-1-2 10.0g (26.4 mmol) 및 톨루엔 100ml를 첨가하였다. 여기에, 2-Aminobiphenyl 2.0g (12.0mmol), Pd(dba)₂ 1.0g (1.8 mmol) 및 P^t(Bu)₃ 0.8g (3.6 mmol) 및 소듐부톡사이드 3.5g (36.0 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 120℃에서 24시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 중간체 I-1-1 6.4g (8.4 mmol, 수율 70%)을 수득하였다.

[0399] LC-MS m/z = 764(M+H)⁺

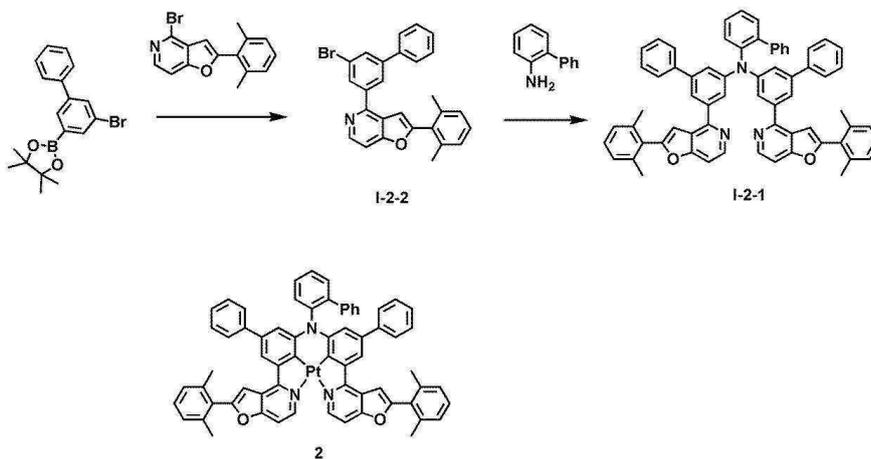
[0400]

[0401] 3) 화합물 1의 합성

[0402] 25℃에서, 반응기에 중간체 I-1-1 1.5g (1.96 mmol), 벤조니트릴 60ml를 첨가하였다. 여기에, PtCl₂(NPh)₂ 0.92g (1.96 mmol)을 첨가한 다음, 18시간 동안 150℃로 가열하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 액체크로마토그래피로 정제하여 화합물 1 0.8g (0.9 mmol, 수율 45%)를 수득하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0403] LC-MS m/z = 957(M+H)⁺

[0404] 합성예 2: 화합물 2의 합성



[0405]

[0406] 1) 중간체 I-2-2의 합성

[0407] 3-브로모페닐보론산 대신 2-(5-bromo-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 I-1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-2-2 (수율 76%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0408] LC-MS m/z = 454(M+H)⁺

[0410] 2) 중간체 I-2-1의 합성

[0411] 중간체 I-1-2 대신 중간체 I-2-2을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 I-1-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-2-1 (수율 70%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

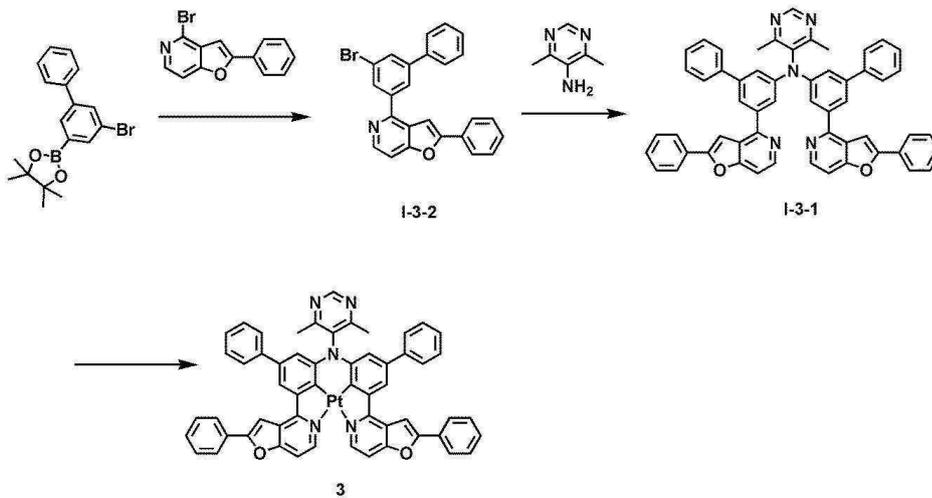
[0412] LC-MS $m/z = 916(M+H)^+$

[0414] 3) 화합물 2의 합성

[0415] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-2-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 2 (수율 32%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS로 확인하였다.

[0416] LC-MS $m/z = 1109(M+H)^+$

[0418] 합성예 3: 화합물 3의 합성



[0420]

[0421] 1) 중간체 I-3-2의 합성

[0422] 4-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[3,2-c]pyridine 대신 4-bromo-2-phenylfuro[3,2-c]pyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 중간체 I-2-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-3-2 (수율 70%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0423] LC-MS $m/z = 426(M+H)^+$

[0425] 2) 중간체 I-3-1의 합성

[0426] 반응기에 중간체 I-3-2 3.0g (7.0 mmol) 및 톨루엔 80ml를 첨가하였다. 여기에 4,6-dimethylpyrimidin-5-amine 0.4g (3.3mmol), $Pd(dba)_2$ 0.1g (0.5 mmol) 및 $P(tBu)_3$ 0.2g (1.0 mmol) 및 소듐부톡사이드 0.95g (9.9 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 120℃에서 36시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 I-3-1 1.4g (1.7 mmol, 수율 53%)을 수득하였다.

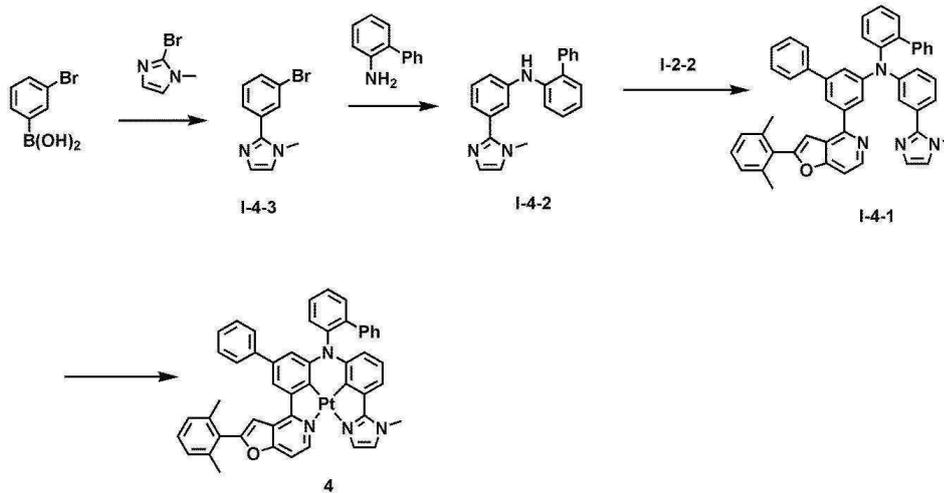
[0427] LC-MS $m/z = 814(M+H)^+$

[0429] 3) 화합물 3의 합성

[0430] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-3-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 3 (수율 20%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0431] LC-MS $m/z = 1007(M+H)^+$

[0433] 합성예 4: 화합물 4의 합성



[0435]

[0436] 1) 중간체 I-4-3의 합성

[0437] 4-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[3,2-c]pyridine 대신 2-bromo-1-methyl-1H-imidazole을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 I-1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-4-3 (수율 70%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0438] LC-MS $m/z = 237(M+H)^+$

[0440] 2) 중간체 I-4-2의 합성

[0441] 반응기에 중간체 I-4-3 2.0g (8.4 mmol) 및 톨루엔 60ml를 첨가하였다. 여기에, 2-Aminobiphenyl 1.5g (9.0mmol), $Pd(dba)_2$ 0.5g (0.8 mmol) 및 $P(tBu)_3$ 0.3g (1.6 mmol) 및 소듐부톡사이드 3.6g (16.8 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 120°C에서 18시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘실페이트로 건조하여 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 중간체 I-4-2 2.1g (6.7 mmol, 수율 85%)을 수득하였다.

[0442] LC-MS $m/z = 326(M+H)^+$

[0444] 3) 중간체 I-4-1의 합성

[0445] 반응기에 중간체 I-4-2 1.0g (3.1 mmol) 및 톨루엔 80ml를 첨가하였다. 여기에, I-2-2 1.4g (3.1mmol), $Pd(dba)_2$ 0.17g (0.3 mmol) 및 $P(tBu)_3$ 0.12g (0.6 mmol) 및 소듐부톡사이드 0.6g (6.2 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 120°C에서 16시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘실페이트로 건조하여 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 중간체 I-4-1 1.1g (1.6 mmol, 수율 52%)을 수득하였다.

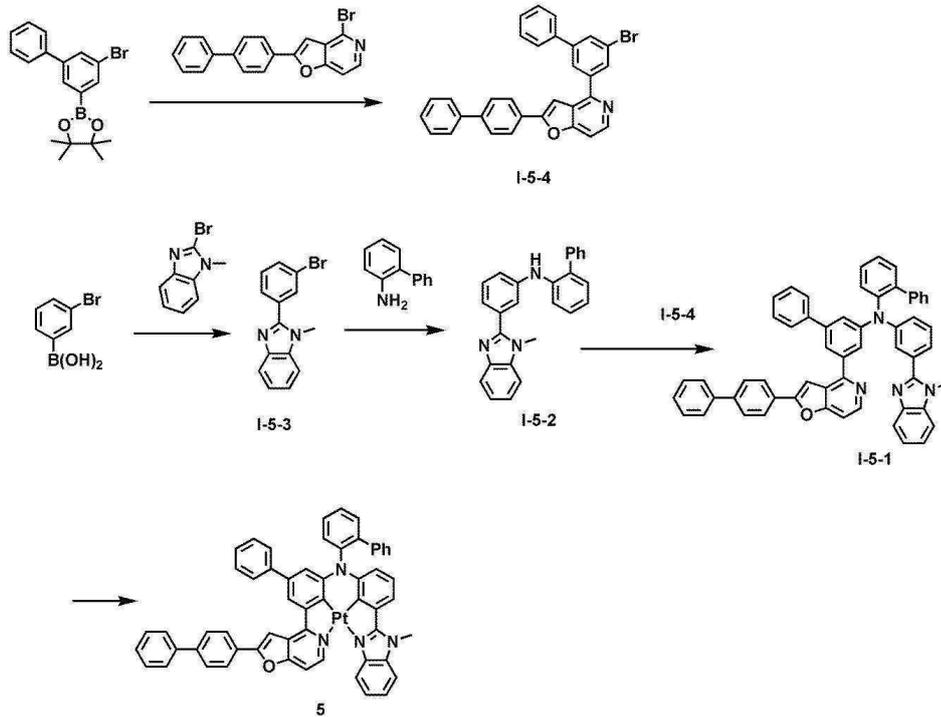
[0446] LC-MS $m/z = 699(M+H)^+$

[0448] 4) 화합물 4의 합성

[0449] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-4-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 4 (수율 50%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0450] LC-MS $m/z = 892(M+H)^+$

[0452] 합성예 5: 화합물 5의 합성



[0454]

[0455] 1) 중간체 I-5-4의 합성

[0456] 4-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[3,2-c]pyridine 대신 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-bromofuro[3,2-c]pyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2의 중간체 I-2-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-5-4 (수율 60%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0457] LC-MS $m/z = 424(M+H)^+$

[0459] 2) 중간체 I-5-3의 합성

[0460] 2-bromo-1-methyl-1H-imidazole 대신 2-bromo-1-methyl-1H-benzo[d]imidazole을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 4의 중간체 I-4-3의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-5-3 (수율 75%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0461] LC-MS $m/z = 287(M+H)^+$

[0463] 3) 중간체 I-5-2의 합성

[0464] 중간체 I-4-3 대신 중간체 I-5-3을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 4의 중간체 I-4-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-5-2 (수율 80%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0465] LC-MS $m/z = 376(M+H)^+$

[0467] 3) 중간체 I-5-1의 합성

[0468] 중간체 I-4-2 대신 중간체 I-5-2를 사용하고, 중간체 I-2-2 대신 중간체 I-5-4를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 4의 중간체 I-4-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-5-1 (수율 70%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

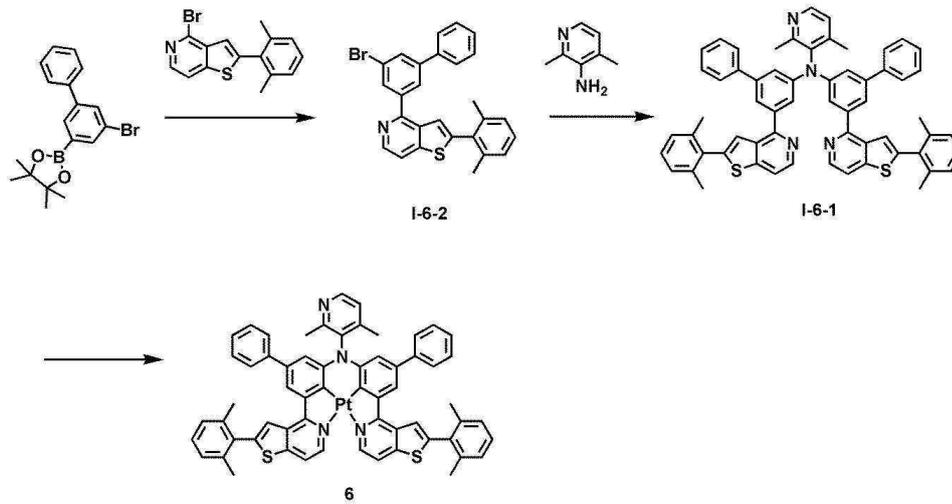
[0469] LC-MS $m/z = 747(M+H)^+$

[0471] 4) 화합물 5의 합성

[0472] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-5-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 5 (수율 40%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0473] LC-MS $m/z = 990(M+H)^+$

[0475] **합성예 6: 화합물 6의 합성**



[0477]

[0478] 1) 중간체 I-6-2의 합성

[0479] 4-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[3,2-c]pyridine 대신 4-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)thieno[3,2-c]pyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2의 중간체 I-2-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-6-2 (수율 70%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0480] LC-MS $m/z = 470(M+H)^+$

[0482] 2) 중간체 I-6-1의 합성

[0483] 2-Aminobiphenyl 대신 2,4-dimethylpyridin-3-amine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 I-1-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-6-1 (수율 56%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

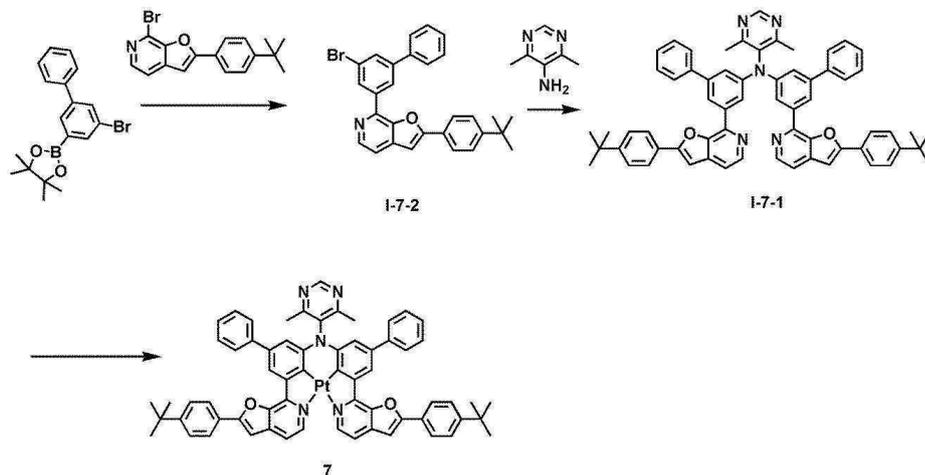
[0484] LC-MS $m/z = 901(M+H)^+$

[0486] 3) 화합물 6의 합성

[0487] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-6-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 6 (수율 28%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS로 확인하였다.

[0488] LC-MS $m/z = 1094(M+H)^+$

[0490] **합성예 7: 화합물 7의 합성**



[0492]

[0493] 1) 중간체 I-7-2의 합성

[0494] 4-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[3,2-c]pyridine 대신 7-bromo-2-(4-(tert-butyl)phenyl)furo[2,3-c]pyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 중간체 I-2-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-7-2 (수율 60%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0495] LC-MS m/z = 482(M+H)⁺

[0497] 2) 중간체 I-7-1의 합성

[0498] 중간체 I-3-2 대신 중간체 I-7-2 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 3의 중간체 I-3-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-7-1 (수율 45%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

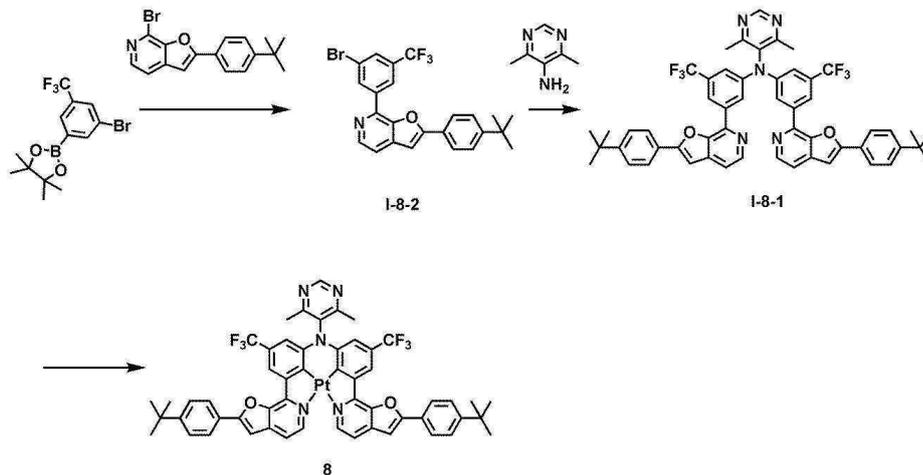
[0499] LC-MS m/z = 926(M+H)⁺

[0501] 3) 화합물 7의 합성

[0502] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-7-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 7 (수율 25%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0503] LC-MS m/z = 1119(M+H)⁺

[0505] **합성예 8: 화합물 8의 합성**



[0507]

[0508] 1) 중간체 I-8-2의 합성

[0509] 2-(5-bromo-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-bromo-5-(trifluoromethyl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 7의 중간체 I-7-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-8-2 (수율 85%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0510] LC-MS m/z = 474(M+H)⁺

[0512] 2) 중간체 I-8-1의 합성

[0513] 중간체 I-7-2 대신 중간체 I-8-2 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 7의 중간체 I-7-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-8-1 (수율 50%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

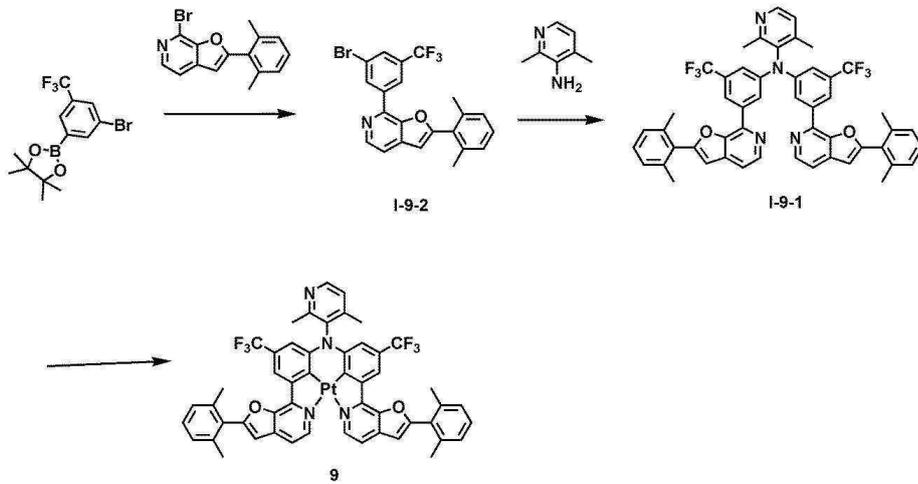
[0514] LC-MS m/z = 910(M+H)⁺

[0516] 3) 화합물 8의 합성

[0517] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-8-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 8 (수율 20%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0518] LC-MS $m/z = 1103(M+H)^+$

[0520] **합성예 9: 화합물 9의 합성**



[0522]

[0523] 1) 중간체 I-9-2의 합성

[0524] 4-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[3,2-c]pyridine 대신 7-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[2,3-c]pyridine을 사용하고 2-(5-bromo-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-bromo-5-(trifluoromethyl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2의 중간체 I-2-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-9-2 (수율 80%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0525] LC-MS $m/z = 446(M+H)^+$

[0527] 2) 중간체 I-9-1의 합성

[0528] 중간체 I-6-2 대신 중간체 I-9-2를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 6의 중간체 I-6-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-9-1 (수율 60%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

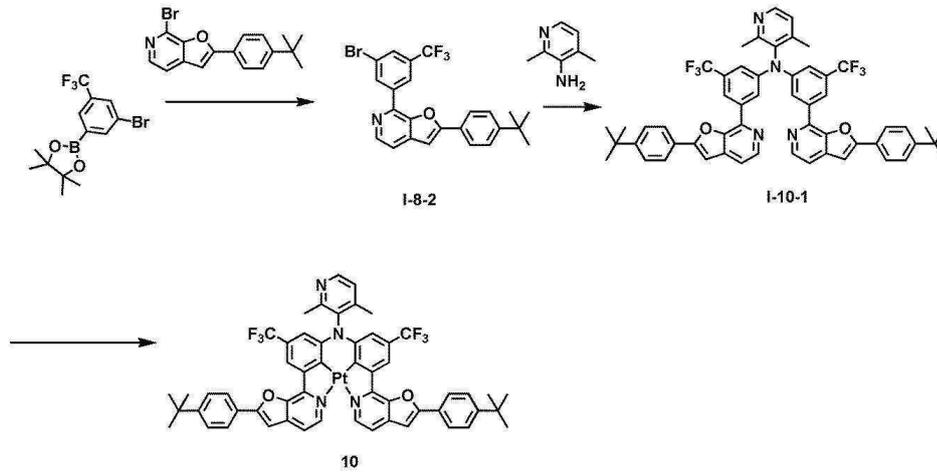
[0529] LC-MS $m/z = 853(M+H)^+$

[0531] 3) 화합물 9의 합성

[0532] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-9-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 9 (수율 35%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS로 확인하였다.

[0533] LC-MS $m/z = 1046(M+H)^+$

[0535] **합성예 10: 화합물 10의 합성**



[0537]

[0538] 1) 중간체 I-10-1의 합성

[0539] 4,6-dimethylpyrimidin-5-amine 대신 2,4-dimethylpyridin-3-amine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 8의 중간체 I-8-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-10-1 (수율 55%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

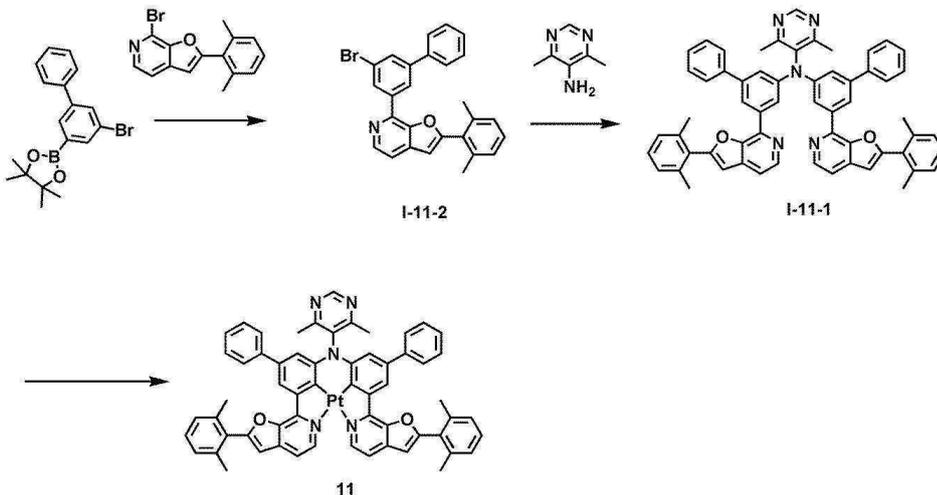
[0540] LC-MS $m/z = 909(M+H)^+$

[0542] 3) 화합물 10 합성

[0543] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-10-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 10 (수율 25%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0544] LC-MS $m/z = 1102(M+H)^+$

[0546] **합성예 11: 화합물 11의 합성**



[0548]

[0549] 1) 중간체 I-11-2의 합성

[0550] 7-bromo-2-(4-(tert-butyl)phenyl)furo[2,3-c]pyridine 대신 7-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)furo[2,3-c]pyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 7의 중간체 I-7-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-11-2 (수율 83%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

[0551] LC-MS $m/z = 454(M+H)^+$

[0553] 2) 중간체 I-11-1의 합성

[0554] 중간체 I-7-2 대신 중간체 I-11-2 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 7의 중간체 I-7-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-11-1 (수율 65%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

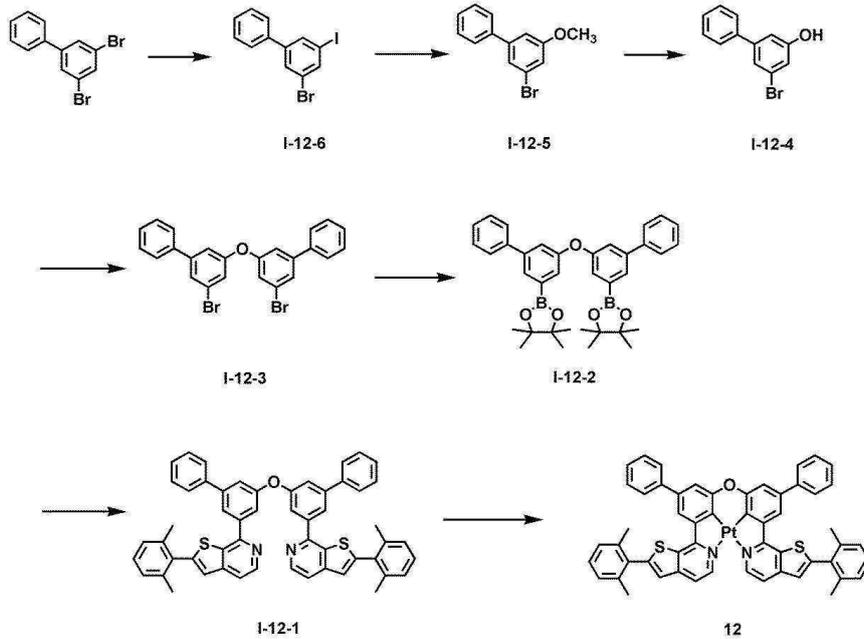
[0555] LC-MS $m/z = 870(M+H)^+$

[0557] 3) 화합물 11의 합성

[0558] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-11-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 11 (수율 40%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0559] LC-MS $m/z = 1063(M+H)^+$

[0561] 합성예 12: 화합물 12의 합성



[0562]

[0563] 1) 중간체 I-12-6의 합성

[0564] 반응기에 3,5-dibromo-1,1'-biphenyl 9.6g (31.0 mmol)을 diethyl ether 250ml에 녹였다. 여기에, 1.6M n-BuLi in Hexane solution을 -78°C에서 천천히 적가하였다. 1시간동안 -78°C에서 교반 한 후, Iodine-solution in THF (9.5g, 37mmol)을 -78°C에서 천천히 적가하여 30분동안 교반하였다. 30분 후, 반응기의 온도를 실온으로 온도를 올리고 18시간동안 교반하였다. 반응이 완료되면, 물과 포화 Sodium thiosulfate 수용액을 가하여 Ethyl acetate로 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 중간체 I-12-6 10.5g (29.4 mmol, 수율 95%)을 수득하였다.

[0565] LC-MS $m/z = 360(M+H)^+$

[0566]

[0567] 2) 중간체 I-12-5의 합성

[0568] Seal-tube에 I-12-6 10.5g (29.4 mmol) 및 메탄올 100ml를 첨가하였다. 여기에, 4,7-Dimethoxyphenanthroline 1.4g (5.9mmol), CuI 0.6g (2.9 mmol) 및 CsCO₃ 19.1g (58.8 mmol)을 첨가한 다음, 상기 혼합물을 100°C에서 24시간 동안 가열환류하였다. 반응이 완료되면, 상기 혼합물을 감압농축하고, 다이클로로메탄에 녹인 다음 규조토를 통과시켜 여과하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하여 감압증류시키고 액체크로마토그래피로 정제하여 중간체 I-12-5 6.6g (25.0 mmol, 수율 85%)을 수득하였다.

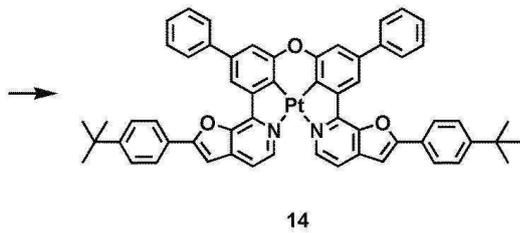
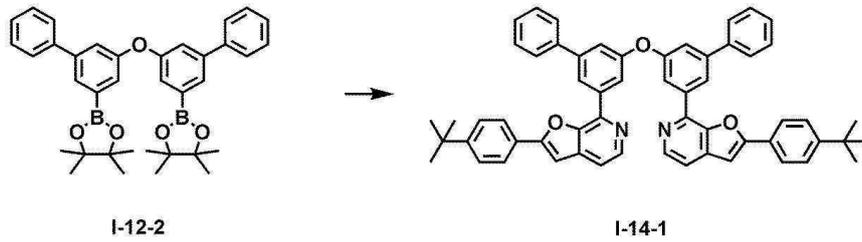
[0569] LC-MS $m/z = 264(M+H)^+$

[0570]

[0595] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-13-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 13 (수율 20%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0596] LC-MS $m/z = 934(M+H)^+$

[0598] **합성예 14: 화합물 14의 합성**



[0599]

[0600] 1) 중간체 I-14-1의 합성

[0601] 7-bromo-2-(2,6-dimethylphenyl)thieno[2,3-c]pyridine 대신 7-bromo-2-(4-(tert-butyl)phenyl)furo[2,3-c]pyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 12의 중간체 I-12-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-14-1 (수율 55%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.

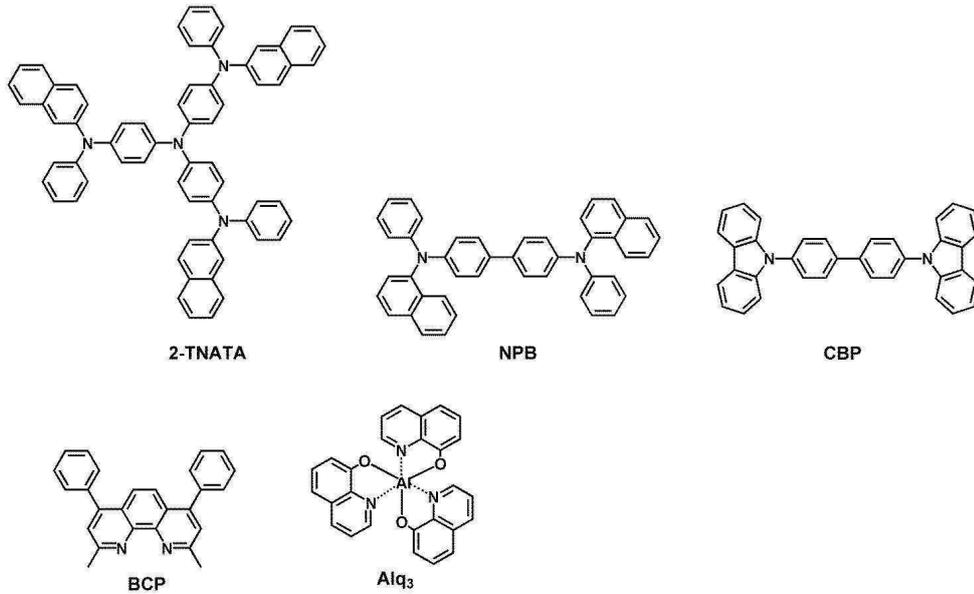
[0602] LC-MS $m/z = 821(M+H)^+$

[0604] 2) 화합물 14의 합성

[0605] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-14-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 14 (수율 25%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.

[0606] LC-MS $m/z = 1014(M+H)^+$

- [0625] LC-MS $m/z = 269(M+H)^+$
- [0627] 5) 중간체 I-15-3의 합성
- [0628] 중간체 I-12-4 대신 중간체 I-15-4을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 12의 중간체 I-12-3의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-15-3 (수율 45%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.
- [0629] LC-MS $m/z = 519(M+H)^+$
- [0631] 6) 중간체 I-15-2의 합성
- [0632] 중간체 I-12-3 대신 중간체 I-15-3을 사용하고 었다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 12의 중간체 I-12-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-15-2 (수율 70%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.
- [0633] LC-MS $m/z = 615(M+H)^+$
- [0635] 7) 중간체 I-15-1의 합성
- [0636] 중간체 I-12-2 대신 중간체 I-15-2를 사용하고 7-bromo-2-phenylthieno[2,3-c]pyridine 대신 7-bromo-2-(4-(tert-butyl)phenyl)thieno[2,3-c]pyridine을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 12의 중간체 I-12-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-15-1 (수율 70%)를 합성하였다. 생성된 화합물은 LC-MS로 확인하였다.
- [0637] LC-MS $m/z = 893(M+H)^+$
- [0639] 7) 화합물 15의 합성
- [0640] 중간체 I-1-1 대신 중간체 I-15-1을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 15 (수율 30%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 LCMS 로 확인하였다.
- [0641] LC-MS $m/z = 1086(M+H)^+$
- [0642]
- [0643] **실시예 1**
- [0644] 애노드로서 ITO/Ag/ITO가 70Å/1000Å/70Å의 두께로 증착된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착 장치에 설치하였다.
- [0645] 상기 애노드 상부에 2-TNATA를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하, NPB)을 증착하여 1350Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.
- [0646] 상기 정공 수송층 상부에 CBP(호스트) 및 화합물 1(도펀트)를 98 : 2의 중량비로 공증착하여, 400Å 두께의 발광층을 형성한 다음, 상기 발광층 상부에 BCP를 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공 저지층 상에 Alq₃를 증착하여, 350Å 두께의 전자 수송층을 형성한 후, 상기 전자 수송층 상에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상에 MgAg를 중량비 90:10의 비율로 증착하여 120Å 두께의 캐소드를 형성함으로써, ITO/Ag/ITO / 2-TNATA (600Å) / NPB (1350Å) / CBP + 화합물 1(2wt%) (400Å) / BCP(50Å) / Alq₃(350Å) / LiF(10Å) / MgAg(120Å) 구조를 갖는 유기 발광 소자(적색광을 방출하는 배면 발광 소자)를 제작하였다.



[0647]

[0649]

실시예 2 내지 15 및 비교예 A 내지 C

[0650]

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

[0652]

평가예 1 : EL 스펙트럼 평가

[0653]

실시예 1 내지 15 및 비교예 A 내지 C의 유기 발광 소자 각각에 대하여, 제논(Xenon) 램프가 장착되어 있는 ISC PC1 스펙트로플로로메터 (Spectrofluorometer)를 이용하여, 상온에서 EL 스펙트럼을 측정후, 상기 EL 스펙트럼의 최대 발광 파장(λ_{max})으로부터 -50nm의 거리에 있는 단파장측 tail의 발광 세기(발광 세기(at λ_{max} -50nm))(a.u.)를 측정하여 그 결과를 표 2에 요약하였다. 한편, 도 2에는 실시예 1, 3 및 6과 비교예 A, B 및 C 각각의 EL 스펙트럼을 나타내었다.

표 2

[0654]

OLED	도펀트 화합물 No.	발광 세기 (at λ_{max} -50nm) (a.u.)
실시예 1	1	0.0365
실시예 2	2	0.0372
실시예 3	3	0.0377
실시예 4	4	0.0559
실시예 5	5	0.0430
실시예 6	6	0.0290
실시예 7	7	0.0497
실시예 8	8	0.0245
실시예 9	9	0.0550
실시예 10	10	0.0326
실시예 11	11	0.0555
실시예 12	12	0.0270
실시예 13	13	0.0270
실시예 14	14	0.0273
실시예 15	15	0.0405
비교예 A	Ref 1	0.1159
비교예 B	Ref 2	0.1868
비교예 C	Ref 3	0.2105

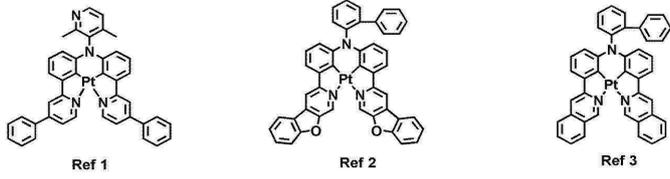
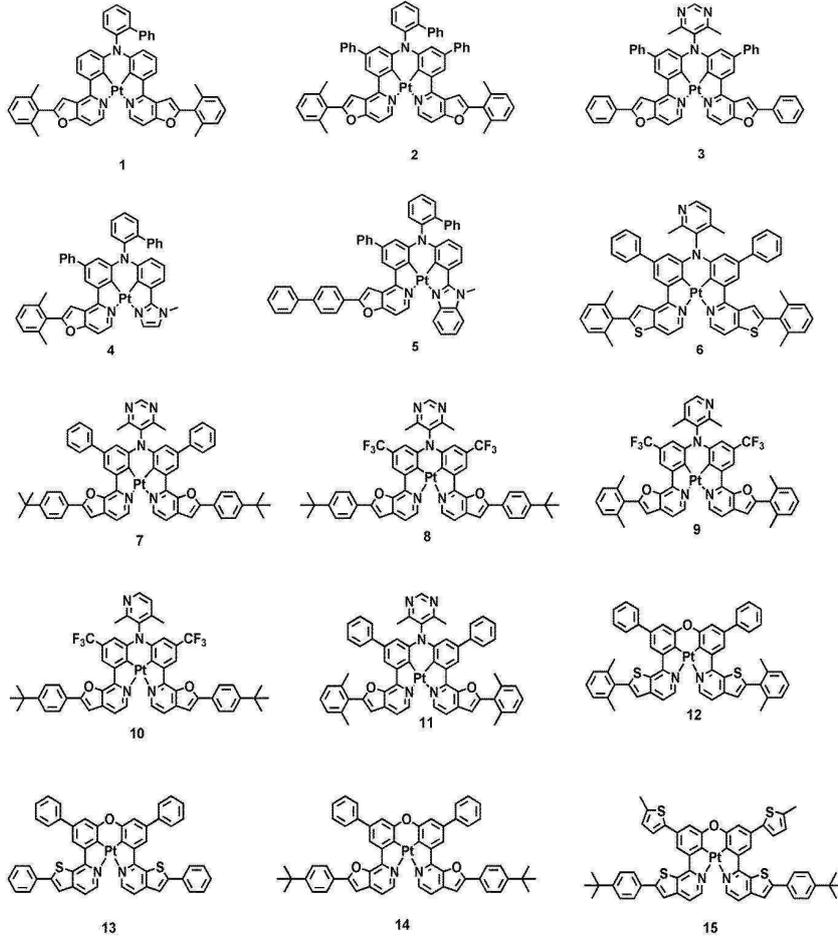


표 2로부터, 화합물 1 내지 15 각각을 도펀트로 채용한 실시예 1 내지 15의 유기 발광 소자는 화합물 Ref1, Ref2 및 Ref3 각각을 도펀트로 채용한 비교예 A 내지 C의 유기 발광 소자에 비하여, 최대 발광 파장으로부터 -50nm의 거리에 있는 tail의 발광 세기(발광 세기 (at λ_{max} -50nm))가 현저히 감소된 파형의 EL 스펙트럼을 가짐을 확인할 수 있다.

평가예 2: 유기 발광 소자(배면 발광)의 특성 평가

상기 실시예 1, 3, 6, 13, 14 및 15와 및 비교예 A 및 C에서 제조된 각각의 유기 발광 소자에 대하여 구동 전압, 최대 양자 발광 효율, EL 스펙트럼의 FWHM(반폭치비), EL 스펙트럼의 최대 발광 파장으로부터 -50nm의 거리에 있는 단파장측 tail의 발광 세기(발광 세기 (at λ_{max} -50nm))(a.u.) (표 2의 데이터와 동일함), EL 스펙트럼 중 최대 발광 파장 및 수명(LT₉₅)을 평가하여 그 결과를 표 3에 나타내었다. 평가 장치로서 전류-전압계(Keithley 2400) 및 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 사용하였다. 수명(LT₉₅)은 초기 휘도 100% 대비 95%의 휘도가 되는데 걸리는 시간을 평가한 것이다.

표 3

[0662]

	도펀트 화합물 No.	구동 전 압 (V)	최대 양자 발광 효율 (%)	발광색	FWHM (nm)	발광 세기 (at $\lambda_{max}-50nm$) (a.u.)	최대 발 광 파장 (nm)	LT ₉₅ (hr)
실시예 1	1	4.8	22.1	적색	64.5	0.0365	629	~1000
실시예 3	3	4.7	21.5	적색	45.0	0.0377	624	~1000
실시예 6	6	4.7	23.8	적색	44.6	0.0290	628	~1500
실시예 13	13	4.2	20.4	적색	49.9	0.0270	610	~1500
실시예 14	14	4.0	23.8	적색	42.0	0.0273	590	~1500
실시예 15	15	4.7	23.3	적색	50.0	0.0405	620	~1000
비교예 A	Ref1	5.2	19.1	적색	70.9	0.1159	627	~1000
비교예 C	Ref3	4.5	19.8	적색	96.8	0.2105	582	~1000

[0663]

상기 표 3로부터, 실시예 1, 3, 6, 13, 14 및 15의 유기 발광 소자는, 실시예 A 및 C의 유기 발광 소자에 비하여, 우수하거나 동등 수준의 구동 전압, 최대 양자 발광 효율 및 수명을 가지며, 동시에, 상대적으로 작은 FWHM을 갖고, 발광 세기(at $\lambda_{max}-50nm$)가 상대적으로 작은 적색광을 방출함을 확인할 수 있다.

[0665]

실시예 16

[0666]

애노드로서 ITO/Al가 70Å/1000Å의 두께로 증착된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 이소프로필알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착 장치에 설치하였다.

[0667]

상기 애노드 상부에 2-TNATA를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하, NPB)을 증착하여 900Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0668]

상기 정공 수송층 상부에 CBP(호스트) 및 화합물 1(도펀트)를 98 : 2의 중량비로 공증착하여, 400Å 두께의 발광층을 형성한 다음, 상기 발광층 상부에 BCP를 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공 저지층 상에 Alq₃를 증착하여, 350Å 두께의 전자 수송층을 형성한 후, 상기 전자 수송층 상에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상에 MgAg를 중량비 90:10의 비율로 증착하여 120Å 두께의 캐소드를 형성함으로써, ITO/Al / 2-TNATA (600Å) / NPB (900Å) / CBP + 화합물 1(2wt%) (400Å) / BCP(50Å) / Alq₃(350Å) / LiF(10Å) / MgAg(120Å) 구조를 갖는 유기 발광 소자(적색광을 방출하는 전면 발광 소자)를 제작하였다. 상기 캐소드 상에 NPB를 추가로 증착하여 800Å 두께의 캐핑층을 형성하였다.

[0670]

실시예 17 내지 18 및 비교예 D 내지 F

[0671]

발광층 형성시 도펀트로서 화합물 1 대신 표 4에 기재된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 16과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0673]

평가예 3: 유기 발광 소자(전면 발광)의 특성 평가

[0674]

상기 실시예 16 내지 18 및 비교예 D 내지 F에서 제조된 각각의 유기 발광 소자에 대하여, 평가예 1에 기재된 방법과 동일한 방법을 이용하여 EL 스펙트럼의 최대 발광 파장으로부터 -50nm의 거리에 있는 단파장측 tail의 발광 세기(발광 세기 (at $\lambda_{max}-50nm$))(a.u.)를 측정하고, 발광 효율(at CIE_x=0.685)을 평가하여 그 결과를 각각 표 4에 나타내었다. 발광 효율 평가 장치로서 전류-전압계(Keithley 2400) 및 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 사용하였다.

표 4

[0675]

	도펀트 화합물 No.	발광 세기 (at $\lambda_{max}-50nm$) (a.u.)	발광 효율(at CIE _x =0.685) (cd/A)
실시예 16	1	0.035	34.6
실시예 17	3	0.026	34.3
실시예 18	6	0.030	34.5
비교예 D	Ref1	0.117	30.7
비교예 E	Ref2	0.203	18.1

비교예 F	Ref3	0.226	12.6
-------	------	-------	------

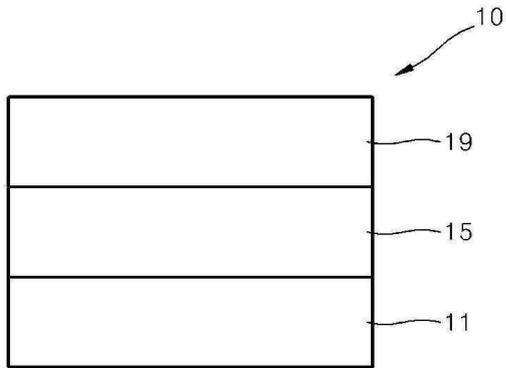
[0676] 상기 표 4로부터, 실시예 16 내지 18의 유기 발광 소자는, 실시예 D 내지 F의 유기 발광 소자에 비하여, 최대 발광 파장으로부터 -50nm의 거리에 있는 tail의 발광 세기(발광 세기 (at $\lambda_{max}-50nm$))가 현저히 감소된 파형의 EL 스펙트럼과 우수한 발광 효율을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

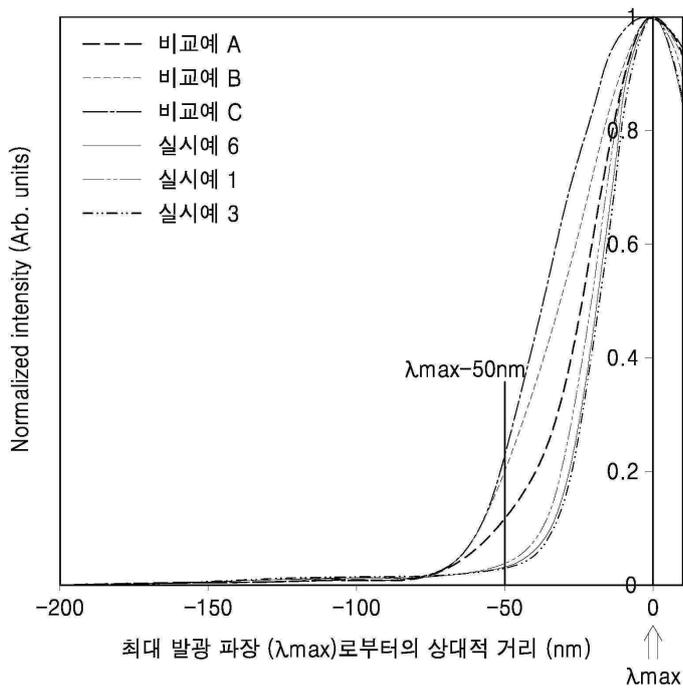
- [0677] 10: 유기 발광 소자
- 11: 제1전극
- 15: 유기층
- 19: 제2전극

도면

도면1



도면2



도면3

