

(19)대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(51) Int. Cl. C07F 15/00 (2006.01) C07F 7/24 (2006.01)	(45) 공고일자 (11) 등록번호 (24) 등록일자	2006년08월11일 10-0611885 2006년08월04일
--	-------------------------------------	--

(21) 출원번호 (22) 출원일자	10-2005-0033083 2005년04월21일	(65) 공개번호 (43) 공개일자
------------------------	--------------------------------	------------------------

(73) 특허권자	삼성에스디아이 주식회사 경기 수원시 영통구 신동 575  재단법인서울대학교산학협력재단 서울특별시 관악구 봉천동 산 4-2
(72) 발명자	박수진 서울특별시 동대문구 답십리1동 대우아파트 103동502호  신대엽 경기도 수원시 팔달구 우만1동 528-2 102호  정동현 경기도 수원시 팔달구 우만동 300 주공아파트 401-906  권태혁 서울 강남구 수서동 삼익아파트 405-108  김명기 충북 제천시 신백동 203-56  홍종인 서울 관악구 신림2동 현대아파트 107-1004
(74) 대리인	신영무

(56) 선행기술조사문헌 JP2003073387 A KR1020050058922 A * 심사관에 의하여 인용된 문헌	KR1020050053994 A
---	-------------------

심사관 : 김용

(54) 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속화합물, 이를 이용한 유기 전계 발광 소자 및 그의제조방법

요약

본 발명은 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물, 이를 이용한 유기 전계 발광 소자 및 그의 제조 방법에 관한 것이다. 본 발명에 따른 화합물은 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물로 발광 특성이 우수하며, 또한 호스트용 화합물과 도판트용 화합물의 연결에 따른 분자량 증가로 용해성을 높일 수 있다. 이러한 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 유기 전계 발광 소자에 적용하는 경우, 발광 효율, 휘도, 색순도 및 수명 특성을 개선시킬 수 있다.

**대표도**

도 1

**색인어**

유기 전계 발광 재료, 유기 금속 화합물

**명세서**

**도면의 간단한 설명**

도 1은 합성에 1에서 합성한 화학식 7로 표기되는 화합물의 THF 용액에서의 PL (photoluminescence) 스펙트럼을 나타내는 도면이다.

도 2는 비교합성에 1에서 합성한 화학식 16으로 표기되는 화합물의 THF 용액에서의 PL (photoluminescence) 스펙트럼을 나타내는 도면이다.

도 3은 합성에 1에서 합성한 화학식 7로 표기되는 화합물의 PMMA 고분자 필름에 20% 도핑하였을 때 PL 스펙트럼을 비교하여 나타낸 도면이다.

도 4는 합성에 2에서 합성한 화학식 11로 표기되는 화합물의 PMMA 고분자 필름에 20% 도핑하였을 때 PL 스펙트럼을 비교하여 나타낸 도면이다.

도 5는 합성에 1에서 제조된 화학식 7과 비교합성에 1에서 제조된 화학식 16의 클로로포름 용액에서의 PL 스펙트럼을 비교하여 나타낸 도면이다.

도 6은 합성에 1에서 제조한 화학식 7의 화합물을 용매에 용해시켜 스핀코팅을 통해 얻은 막의 AFM-물포로지 이미지를 보여주는 도면이다.

도 7은 합성에 2에서 제조한 화학식 11의 화합물을 용매에 용해시켜 스핀코팅을 통해 얻은 막의 AFM-물포로지 이미지를 보여주는 도면이다.

도 8은 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조를 나타낸 도면이다.

**<도면의 주요부분에 대한 부호의 설명>**

10 ... 기판 20 ... 애노드 전극

30 ... 정공 주입층 40 ... 정공 수송층

50 ... 발광층 60 ... 전자 수송층

70 ... 전자 주입층 80 ... 캐소드 전극

**발명의 상세한 설명**

**발명의 목적**

**발명이 속하는 기술 및 그 분야의 종래기술**

본 발명은 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물, 이를 사용한 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자의 제조방법에 관한 것이다. 보다 상세하게는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물을 연결시켜 한 분자 내에서 호스트와 도판트 간에 에너지 전달을 가능하게 하는 유기 금속 화합물, 이를 사용한 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자의 제조방법에 관한 것이다.

전기발광소자(electroluminescent device : EL 소자)는 자발광형 표시소자로 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답 시간이 빠르다는 장점을 가지고 있다.

EL 소자는 발광층(emitting layer) 형성용 재료에 따라 무기 EL 소자와 유기 EL 소자로 구분된다. 여기에서 유기 EL 소자는 무기 EL 소자에 비하여 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

일반적인 유기 EL 소자는 기관 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가지고 있다. 여기에서 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층은 유기 화합물로 이루어진 유기 박막들이다.

상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 EL 소자의 구동 원리는 다음과 같다.

상기 애노드 및 캐소드 간에 전압을 인가하면 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송층을 경유하여 발광층에 이동된다. 한편, 전자는 캐소드로부터 전자 수송층을 경유하여 발광층에 주입되고 발광층 영역에서 캐리어들이 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저 상태로 변화되고, 이로 인하여 발광층의 분자가 발광함으로서 화상이 형성된다. 발광 재료는 그 발광 메커니즘에 따라 일중항 상태의 엑시톤을 이용하는 형광 재료와 삼중항 상태를 이용하는 인광 재료로 나뉜다. 인광 재료는 일반적으로 무거운 원자를 함유하는 유기무기 화합물 구조를 가지고 있으며 무거운 원자에 의해 원래 금지 전이이던 삼중항 상태의 엑시톤이 허용 전이를 거쳐 인광 발광 하게 된다. 인광 재료는 75% 생성 확률을 갖는 삼중항 엑시톤을 사용할 수 있게 되어 25% 일중항 엑시톤을 이용하는 형광 재료보다 매우 높은 발광 효율을 가질 수 있다.

인광 재료를 이용한 발광층은 호스트 물질과 이로부터 에너지를 전이 받아 발광하는 도판트 물질로 구성되어 있는데, 도판트 물질로는 이리듐 금속 화합물을 이용한 여러 재료들이 보고 되고 있다. 이리듐 화합물을 이용한 유기 전계 발광 재료에 대한 연구로는 프린스턴 대학, 남캘리포니아 대학 등에서 이리듐(Iridium), 플래티늄(platinum) 금속 화합물을 이용한 여러 인광 재료들이 발표되고 있으나, 좀더 발광 특성이 우수하고 안정한 재료 개발이 진행되고 있다.

저분자 유기 EL 재료는 주로 증착 기술을 이용하여 소자를 구성하는 반면, 고분자 EL 재료는 스핀 코팅 등의 습식 방법을 이용하여 소자를 만들고 있다. 저분자 EL 재료는 그의 용해성이 낮기 때문에 보다 용이한 습식 공정으로 소자를 구성할 수 없으며, 고분자 EL 재료는 용해성이 높기 때문에 습식 공정을 이용하여 소자를 구성하지만, 발광 특성 특히 수명이 저분자 대비 낮다는 문제점을 가지고 있다. 따라서 증착 보다 공정이 용이한 습식 방법으로 소자를 구성할 수 있는 용해성이 높은 유기 EL 재료 이면서 저분자 수준의 발광 특성을 갖는 재료 개발이 요구되고 있다.

이에 본 발명자들은 발광 효율이 높은 저분자 유기 EL 재료를 증착 보다 공정이 용이한 습식 방법으로 소자를 구성할 수 있는 방법을 연구하면서, 도판트용 화합물에 에너지 갭이 같거나 차이가 존재하는 호스트용 화합물을 연결하는 경우 발광 효율을 증대시킬 수 있으면서 동시에 분자량 증가에 따라 용해성을 증가시킬 수 있기 때문에 습식 방법으로 소자를 구성할 수 있음을 발견하고 본 발명을 완성하였다.

**발명이 이루고자 하는 기술적 과제**

따라서, 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 제공하는 것이다.

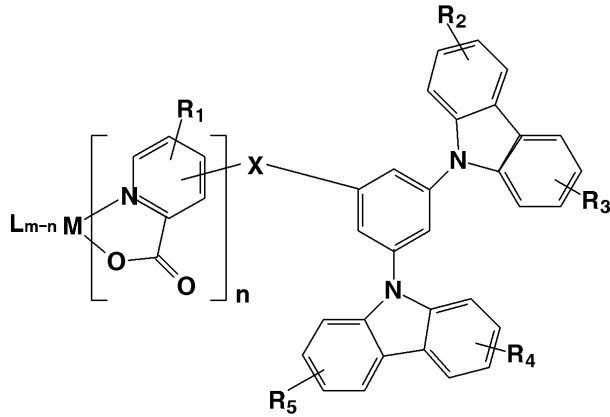
또한, 본 발명이 이루고자 하는 다른 기술적 과제는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 사용한 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

또한, 본 발명이 이루고자 하는 또 다른 기술적 과제는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 사용한 발광 소자의 제조방법을 제공하는 것이다.

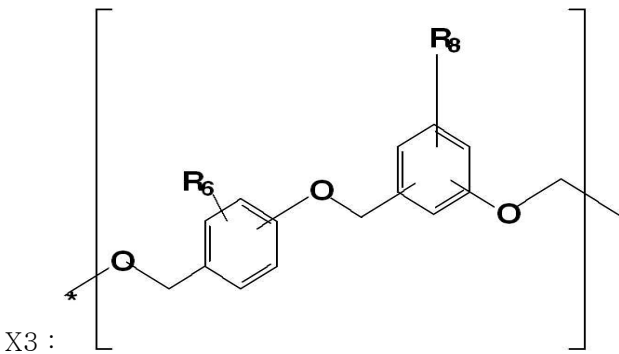
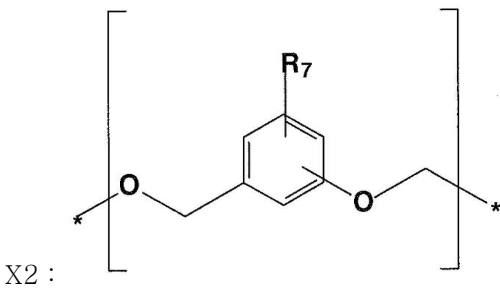
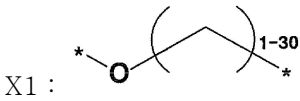
**발명의 구성 및 작용**

따라서, 상기 첫번째 기술적 과제를 달성하기 위해, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 제공한다:

화학식 1



상기 식에서, X는 하기 X1, X2 또는 X3로 나타내어지는 기이고;



$R_1$  내지  $R_8$ 는 각각 독립적으로 일치환(mono-substituted) 또는 다치환(multi-substituted) 작용기로서, 수소, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의

헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, C1-C30의 알킬티오기 또는 -Si(R')(R'')(R''')(상기 식중, R' 내지 R'''는 서로에 관계없이 수소 또는 C1-C30의 알킬기), -N(R')(R'')(상기 식중, R'과 R''는 서로에 관계없이 수소 또는 C1-C30의 알킬기)기이고, 또한 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>의 작용기중 서로 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고;

M은 Ir, Os, Pt, Pb, Re 또는 Ru이고; 및

L은 두자리 리간드이고, m은 3이고, n은 1 또는 2이다.

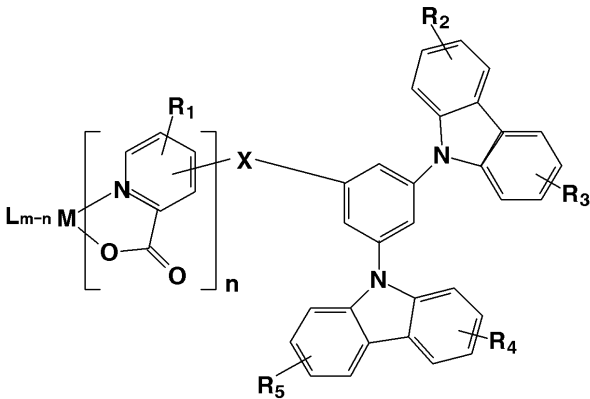
상기 두 번째 기술적 과제를 달성하기 위해, 본 발명은 한 쌍의 전극 사이에 구비되어 있는 유기막을 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 유기막이 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 상기 화학식 1의 유기 금속 화합물을 포함하고 있는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

또한, 상기 세 번째 기술적 과제를 달성하기 위해, 본 발명은 기관 상에 제 1 전극을 형성하는 단계; 제 1 전극 상부에 유기막을 형성하는 단계; 및 유기막 상부에 제 2 전극을 형성하는 단계를 포함하고, 상기 유기막은 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 상기 화학식 1의 유기 금속 화합물을 도핑하여 형성되는 것인 유기 전계 발광 소자의 제조방법을 제공하는 것이다.

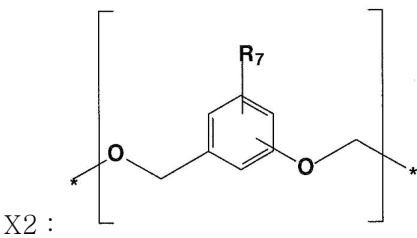
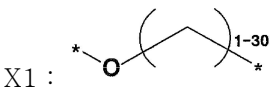
이하, 본 발명을 더욱 상세히 설명한다.

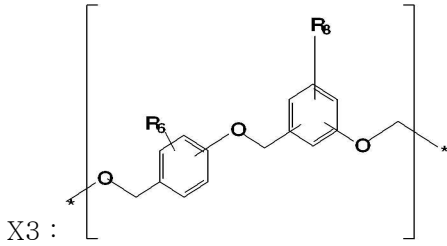
본 발명에 따른 하기 화학식 1의 유기 금속 화합물은 호스트용 화합물을 도판트용 화합물에 연결한 유기 금속 화합물이다.

화학식 1



상기 식에서, X는 하기 X1, X2 또는 X3로 나타내어지는 기이고;





R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 일치환(mono-substituted) 또는 다치환(multi-substituted) 작용기로서, 수소, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, C1-C30의 알킬티오기 또는 -Si(R')(R'')(R''')(상기 식중, R'내지 R'''는 서로에 관계없이 수소 또는 C1-C30의 알킬기), -N(R')(R'')(상기 식중, R'과 R''는 서로에 관계없이 수소 또는 C1-C30의 알킬기)기이고, 또한 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>의 작용기중 서로 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고;

M은 Ir, Os, Pt, Pb, Re 또는 Ru이고; 및

L은 두자리 리간드이고 m은 3이고, n은 1 또는 2이다.

본 발명에 따른 상기 화학식 1의 유기 금속 화합물은 HOMO-LUMO 간의 에너지 갭의 차이가 존재하는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물을 연결한 유기 금속 화합물이다. 이 경우, 호스트용 화합물의 에너지 갭은 도판트용 화합물의 에너지 갭 이상이거나 또는 도판트용 화합물의 에너지 갭은 호스트용 화합물의 에너지 갭 이상이어야 하며, 바람직하게는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물 사이의 에너지 갭의 차이는 0 내지 400nm이어야 한 분자내에서 호스트용 분자와 도판트용 분자간의 에너지 전달이 가능해 지고, 또한 발광효율을 증대시킬 수 있다. 이와 같이 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물은 발광특성을 우수하게 할 뿐만 아니라 분자량의 증대를 가져오기 때문에 용해성을 향상시킬 수 있다.

본 발명에 따른 유기 금속 화합물은 특정 연결기에 의해 호스트용 화합물과 도판트용 화합물을 연결할 수 있으며, 연결기에 따라서 도판트용 화합물에 다수개의 호스트용 화합물이 연결될 수 있다.

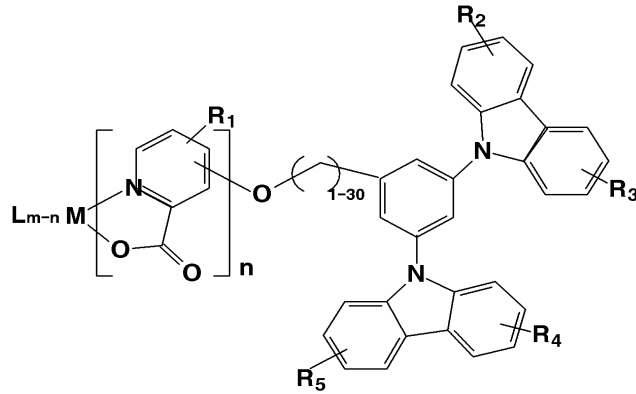
상기 연결기로는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물을 연결할 경우 π-컨쥬게이션으로 연결되지 않도록 끊을 수 있는 구조이어야 하고, 또한 호스트용 분자와 도판트용 분자 간의 에너지 전달을 방해하지 않는 다작용기를 갖는 화합물이 바람직하다. 예를 들면, 산소 원자를 포함하는 화합물이 바람직하다. 구체적으로 히드로퀴논, 3,5-디히드록시벤질 알코올 등이 사용될 수 있다.

이와 같은 연결기에 의해 도판트용 화합물에 연결되는 호스트용 화합물의 수를 조절할 수 있으며, 이는 유기 전계 발광 소자에 적용시 도핑 농도를 조절할 수 있다. 보다 구체적으로 연결기는 상기 화학식 1에서 X1, X2, 또는 X3의 구조를 갖는 것이 바람직하다.

본 발명에 따른 상기 화학식 1의 화합물은 연결기 X에 따라 하기 화학식 2 내지 4로 표시되는 대표적인 구조를 갖는다.

제 1 구조는 상기 화학식 1에서 X가 X1인 화합물로서 하기 화학식 2로 표시된다.

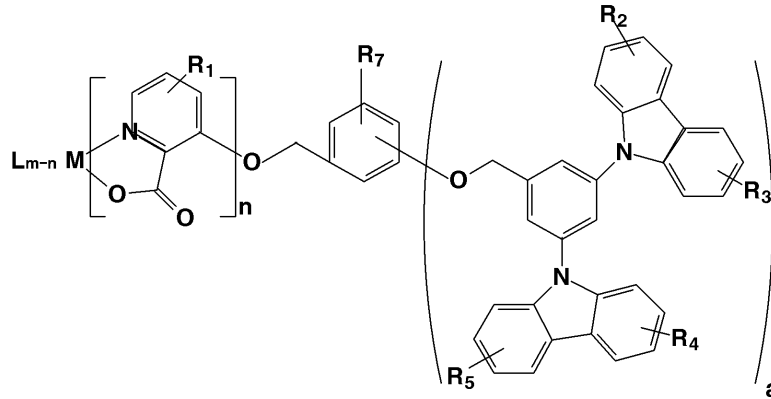
화학식 2



상기 식중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, L, M, m 및 n 모두 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

제 2 구조는 상기 화학식 1에서 X가 X2인 화합물로서, 하기 화학식 3으로 표시된다.

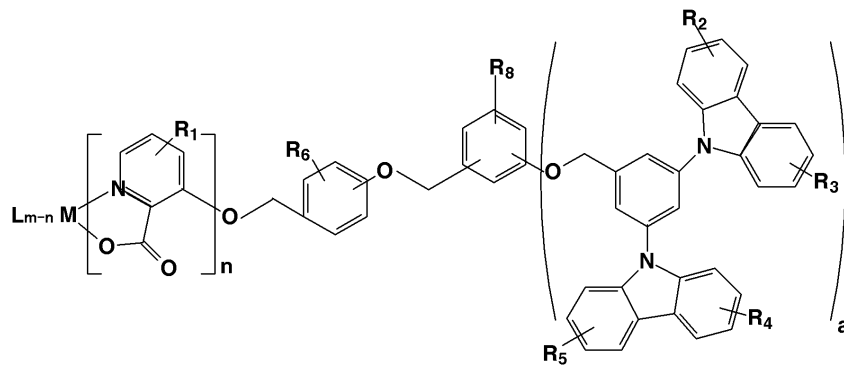
화학식 3



상기 식중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub> 및 R<sub>7</sub>는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, L, M, m 및 n 모두 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, a는 1 내지 3의 정수이다

제 3 구조는 상기 화학식 1에서 X가 X3인 화합물로서, 하기 화학식 4로 표시된다.

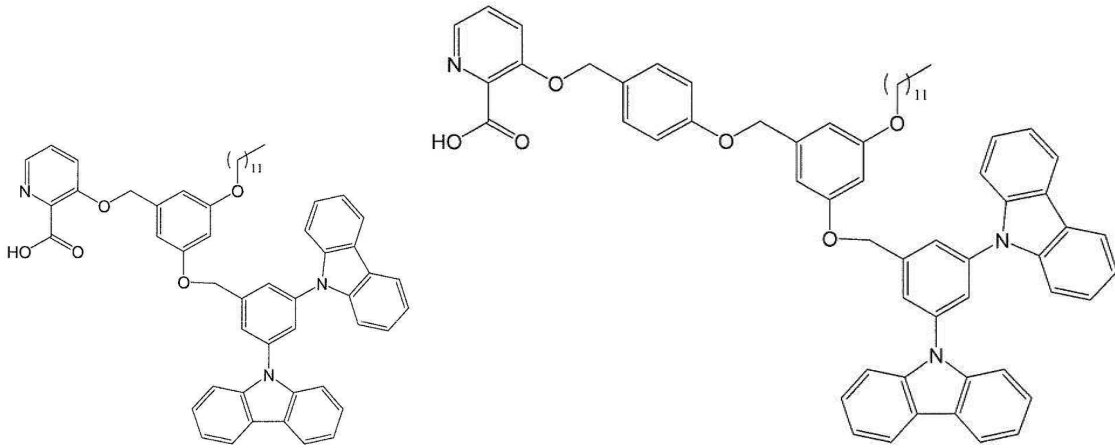
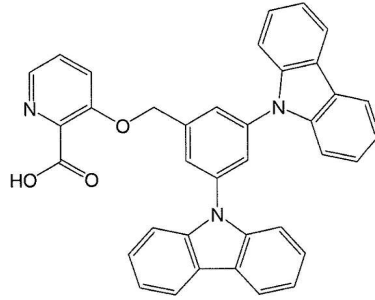
화학식 4



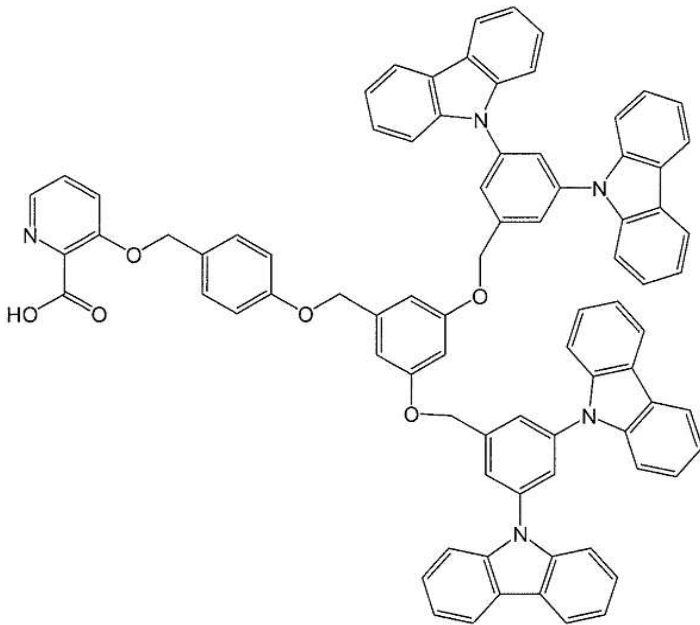
상기 식중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub> 및 R<sub>8</sub>은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, L, M, m 및 n 모두 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, a는 1 내지 3의 정수이다.

리간드가 결합되기 전의 바람직한 발광 화합물의 구조는 다음과 같다.

화학식 5



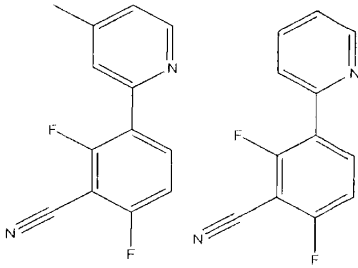
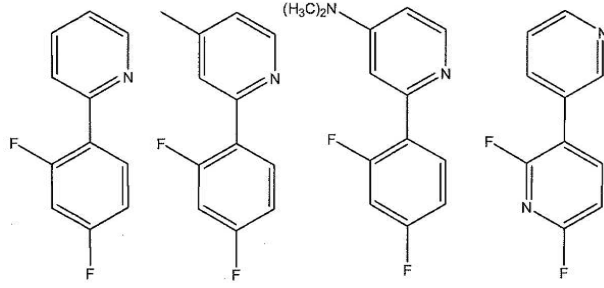
삭제



본 발명에 따른 상기 화학식 1의 화합물에서, L의 구체적인 예로는, 이것으로 제한되는 것은 아니지만, 하기 화학식 6으로 표시된 바와 같은 구조를 갖는다.

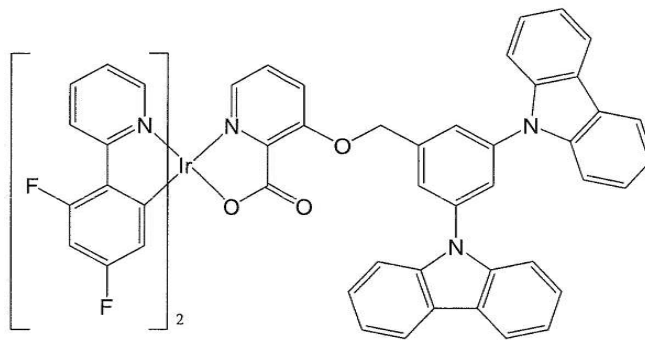


화학식 6

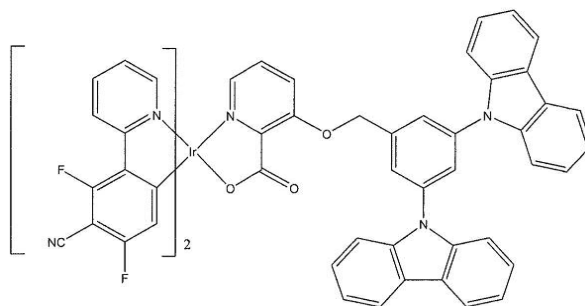


본 발명에 따른 상기 화학식 1의 화합물중 바람직한 화합물은 하기 화학식 7 내지 15로 표시되는 유기 금속 화합물들을 포함한다:

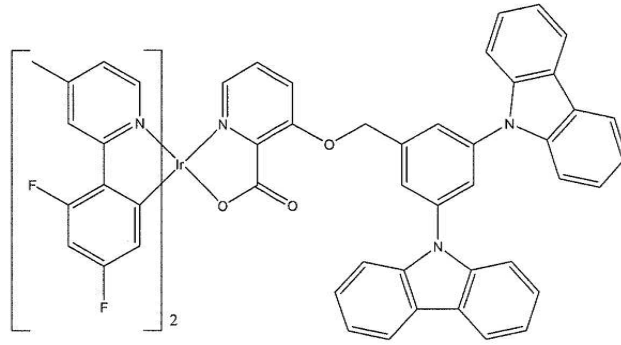
화학식 7



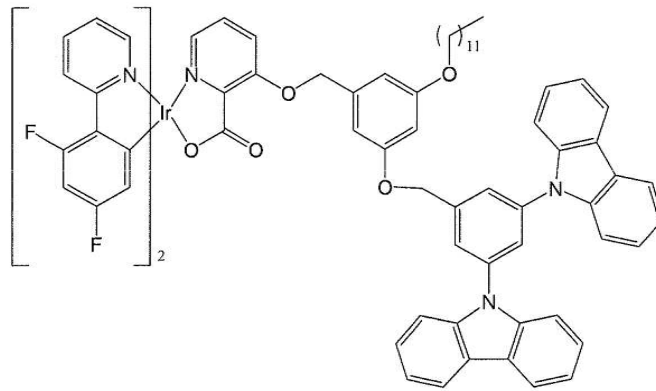
화학식 8



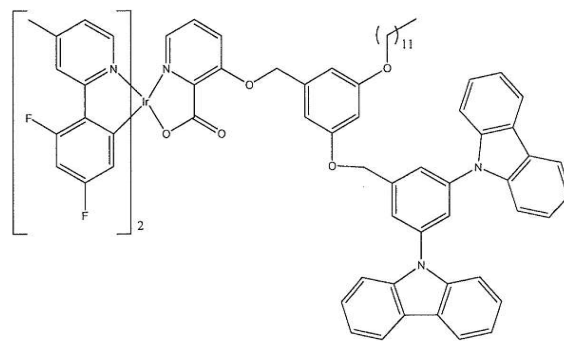
화학식 9



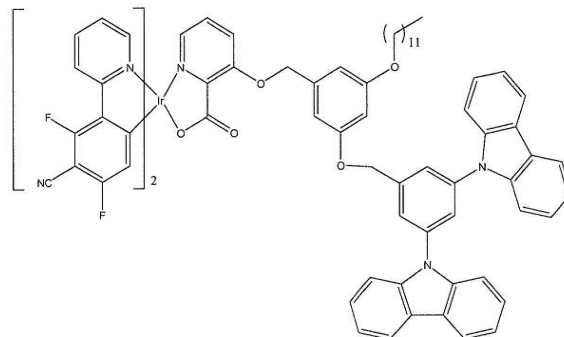
화학식 10



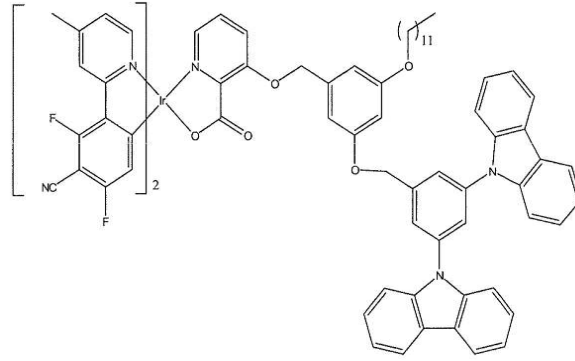
화학식 11



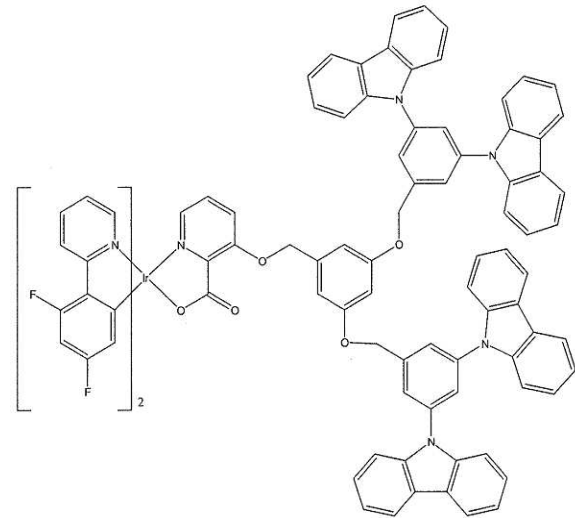
화학식 12



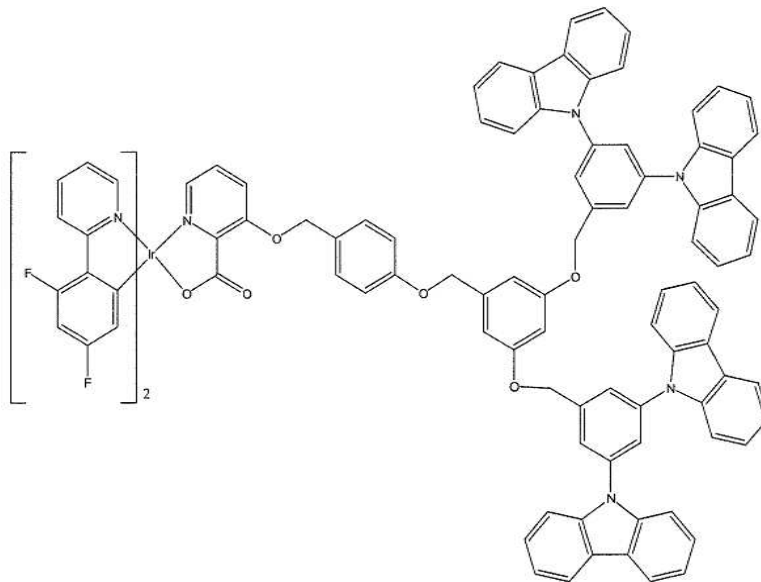
화학식 13



화학식 14



화학식 15



상기 화학식에서, "비치환된 알킬기" 또는 "비치환된 알콕시"는 그의 알킬부분이 탄소수 1 내지 30개의 알킬기(예를 들면, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 노닐, 데실, 운데실, 도데실, 트리데실, 테트라데실, 펜타데실, 등등 및 이들의 이성체)를 의미하며, "치환된 알킬기" 또는 "치환된 알콕시"는 상술한 비치환된 알킬 부분의 수소 원자중 적어도 하나

가 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, C1-C30의 알킬기, C1-C30의 알케닐기, C1-C30의 알킬닐기, C6-C30의 아릴기, C7-C30의 아릴알킬기, C2-C20의 헤테로아릴기, 또는 C3-C30의 헤테로알킬기로 치환되는 것을 의미한다.

또한, "비치환된 알케닐기"는 이중 결합이 적어도 하나 이상인 탄소수 2 내지 30개의 알케닐(예를 들면, 에텐, 프로텐, 부텐, 펜텐, 헥센, 등등 및 이들의 이성체)를 의미하며, "치환된 알케닐기"는 상술한 비치환된 알케닐기의 적어도 하나의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 아릴기"는 단독 또는 조합하여 사용되어, 하나 이상의 고리를 포함하는 탄소수 6 내지 30개의 방향족 탄소 고리를 의미하며 상기 고리들은 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합될 수 있다. "치환된 아릴기"는 비치환된 아릴기중 어느 하나의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 아릴알킬기"는 상기 정의된 바와 같은 아릴기에서 수소 원자 중 일부가 저급알킬, 예를 들어 메틸, 에틸, 프로필 등과 같은 그룹으로 치환된 것을 의미한다. "치환된 아릴알킬기"는 상기 비치환된 아릴알킬기중 하나 이상의 수소원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 아릴옥시기"는 상기 정의된 바와 같은 아릴기에 산소가 치환된 것, 예를 들면 페닐옥시, 나프틸렌옥시, 디페닐옥시 등을 의미한다. "치환된 아릴옥시기"는 상기 비치환된 아릴옥시기중 하나 이상의 수소원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 헤테로아릴기"는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 고리원자가 C인 고리원자수 2 내지 30의 1가 모노사이클릭 또는 비사이클릭 방향족 2가 유기 화합물을 의미하며, 그의 구체적인 예로는, 티에닐, 피리딜, 퓨릴(furyl) 등이 있다. "치환된 헤테로아릴기"는 상기 비치환된 헤테로아릴기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 헤테로아릴알킬기"는 상술한 헤테로아릴기의 수소 원자중 일부가 저급알킬기로 치환된 것을 의미하며, "치환된 헤테로아릴알킬기"는 상기 비치환된 헤테로아릴알킬기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 헤테로아릴옥시기"는 상기 정의된 바와 같은 헤테로아릴기에 산소가 결합된 것을 의미한다. "치환된 헤테로아릴옥시기"는 상기 비치환된 헤테로아릴옥시기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 사이클로알킬기"는 탄소수 4 내지 30개의 1가 모노사이클릭을 의미하며, 구체적으로 사이클로헥실기, 사이클로펜틸기 등을 포함한다. "치환된 사이클로알킬기"는 상기 비치환된 사이클로알킬기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 헤테로사이클로알킬기"는 N,O,P 또는 S중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 고리원자가 C인 고리원자수 1 내지 30개의 1가 모노사이클릭을 의미하며, 상기 사이클로알킬기의 수소 원자 일부가 저급 알킬기로 치환된 것을 의미한다. "치환된 헤테로사이클로알킬기"는 상기 비치환된 헤테로사이클로알킬기중 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 알킬카르보닐기"의 구체적인 예로서, 아세틸, 에틸카르보닐, 이소프로필카르보닐, 페닐카르보닐, 나프탈렌카르보닐, 디페닐카르보닐, 시클로헥실카르보닐 등이 있고, "치환된 알킬카르보닐기"는 상기 비치환된 알킬카르보닐기중 적어도 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

"비치환된 아릴카르보닐기"의 구체적인 예로서, 페닐카르보닐, 나프탈렌카르보닐, 디페닐카르보닐, 등이 있고, "치환된 아릴카르보닐기"는 상기 비치환된 아릴카르보닐기중 적어도 하나 이상의 수소 원자가 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

본 발명에 따른 상술한 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물은 한 분자내 에너지 갭의 차이가 있는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물의 연결 구조로 인하여 에너지 전달이 우수하며, 이로 인한 높은 발광 효율을 나타낸다.

이하, 본 발명에 따른 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 채용한 유기 전계 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명한다.

본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 통상의 유기 전계 발광 소자의 구조를 채용할 수 있으며, 필요에 따라 구조가 변경될 수 있다. 기본적으로 발광 소자는 제 1 전극(애노드 전극)과 제 2 전극(캐소드 전극) 사이에 유기막(발광층)을 포함하는 구조를 가지며, 필요에 따라서, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 억제층, 전자 주입층 또는 전자 수송층이 더 포함될 수 있다. 본 발명의 발광 소자의 구조를 설명하기 위하여 도 8을 참조한다.

도 8을 참조하면, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 애노드 전극(20)과 캐소드 전극(80) 사이에 발광층(50)을 포함하는 구조를 가지며, 애노드 전극(20)과 발광층(50) 사이에 정공 주입층(30)과 정공 수송층(40)을 포함하고 있으며, 또한, 발광층(50)과 캐소드 전극(80) 사이에 전자 수송층(50)과 전자 주입층(70)을 포함하고 있다.

한편, 본 발명의 일예에 따른 도 8의 발광 소자는 다음과 같은 공정을 통해 제조된다.

먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드 전극(20)을 형성한다. 여기서, 기판(10)으로는 이 분야에서 일반적으로 사용되는 기판을 사용할 수 있으며, 특히 투명성, 표면평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 또한, 상기 기판위에 형성된 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 등이 사용될 수 있다.

상기 애노드 전극(20)의 상부에 정공 주입층(HIL)(30)을 선택적으로 형성할 수 있다. 이때 정공 주입층은 진공 증착 또는 스핀 코팅과 같은 통상적인 방법을 통해 형성한다. 정공 주입층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만 CuPc(구리 프탈로시아닌) 또는 IDE 406(Idemitsu Kosan사)이 사용될 수 있다.

이어서, 상기 정공 주입층(30) 상부에 상기 정공 수송층(HTL)(40)을 진공 증착 또는 스핀 코팅과 같은 통상적인 방법으로 통해 형성할 수 있다. 상기 정공 수송층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐벤지딘( $\alpha$ -NPD) 등이 사용될 수 있다.

이어서 정공 수송층(40) 상부에 발광층(EML)(50)을 형성한다. 상기 발광층 형성 재료로는 상술한 화학식 1로 표시되어지는 본 발명에 따른 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 단독으로 이용하거나, 또는 본 발명에 따른 유기 금속 화합물을 도판트로서 통상적인 호스트 물질, 예를 들면 CBP(4,4'-비스(카바졸-9-일)-비페닐) 등과 병용하는 것도 가능하다.

상기 유기 금속 화합물은 진공 증착방법으로 형성될 수 있으며, 또한 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 구조이기 때문에 저분자량의 도판트일지라도 분자량 증가에 따라 용해성이 증가되기 때문에 스핀 코팅과 같은 습식공정을 통해서 증착될 수 있으며, 레이저 열전사법(LITI)이 이용될 수도 있다.

본 발명에 따른 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 사용하는 경우, 그 도핑 농도는 도판트용 화합물에 연결되는 호스트용 분자의 수에 따라 조절될 수 있다.

선택적으로 상기 발광층(50)의 상부에는 발광 물질에서 형성되는 엑시톤이 전자수송층으로 이동되는 것을 막아주거나 정공이 전자 수송층(60)으로 이동되는 것을 막아주는 정공 억제층(HBL)이 형성될 수 있으며, 정공 억제층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만, 페난트롤린계 화합물(예를 들면, BCP) 등을 사용할 수 있다. 이것은 진공 증착 방법 또는 스핀 코팅 방법을 통해 형성될 수 있다.

또한 발광층(50)위에 전자 수송층(ETL)(60)이 형성될 수 있으며, 이는 진공 증착 방법 또는 스핀 코팅 방법이 이용될 수 있다. 전자 수송층용 재료로서는 특별히 제한되지 않지만 알루미늄 착물(예를 들면, Alq<sub>3</sub>(트리스(8-퀴놀리놀라토)-알루미늄))을 사용할 수 있다.

상기 전자 수송층(60) 상부에 전자 주입층(EIL)(70)이 진공증착 또는 스핀코팅과 같은 방법을 이용하여 형성될 수 있으며, 전자 주입층(70)용 재료로는 특별히 제한되지 않지만 LiF, NaCl, CsF 등의 물질을 이용할 수 있다.

이어서, 전자 주입층(70) 상부에 캐소드 전극(80)이 진공 증착을 통하여 형성됨으로써 발광 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등이 이용된다.

또한, 본 발명에 따른 발광 소자는 도 8에 나타난 바와 같은 적층 구조를 가지며, 필요에 따라서는 한층 또는 2층의 중간층, 예를 들면 정공 억제층 등을 더 형성하는 것도 가능하다. 또한 발광 소자의 각 층의 두께는 이 분야에서 일반적으로 사용되는 범위에서 필요에 따라 결정될 수 있다.

이하, 본 발명을 실시예를 들어 더욱 상세히 설명하지만, 본 발명이 하기 실시예로 한정되는 것은 아니다.

**사용되는 시약**

알드리치(Aldrich)사 제품 : 2-브로모피리딘, 2,4-디플루오로페닐 보론산, 2-메톡시 에탄올, 2-히드록시피콜린산, 18-크라운-6, 아세톤, 카바졸, 1,3-디브로모-5-메틸벤젠, NBS, 및 AIBN.

악로스(Acros)사 제품 : 요오드화 구리, (+, -)-트랜스-1,2-디아미노-시클로헥산, 3,5-디히드록시벤질 알콜

덕산 화학 제품 : 황산 마그네슘; 사염화 탄소; 헥산; 및 디에틸에테르

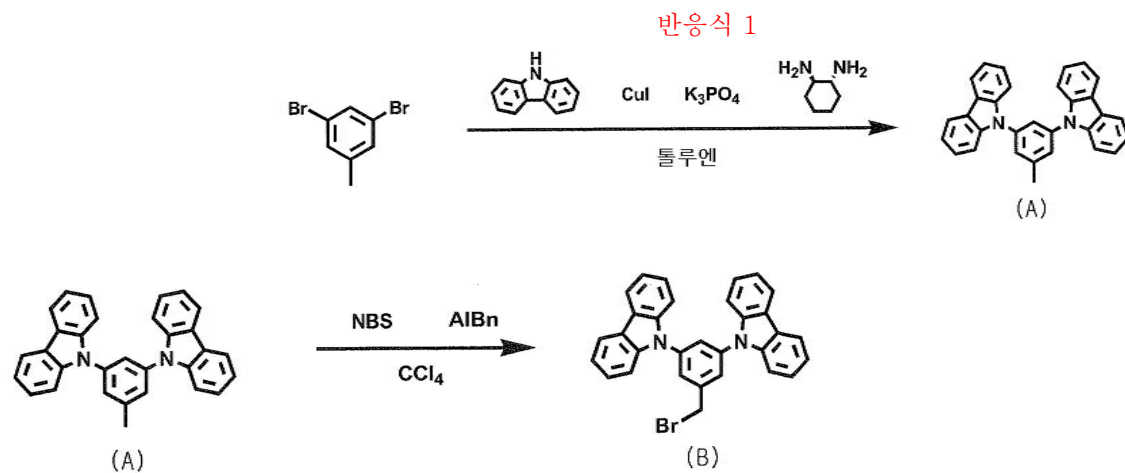
기타 : Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(대정의 제품), MeI(성약 주식회사), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(TCL 사의 제품), DME 및 2-에톡시 에탄올(JUNSEI 사 제품)

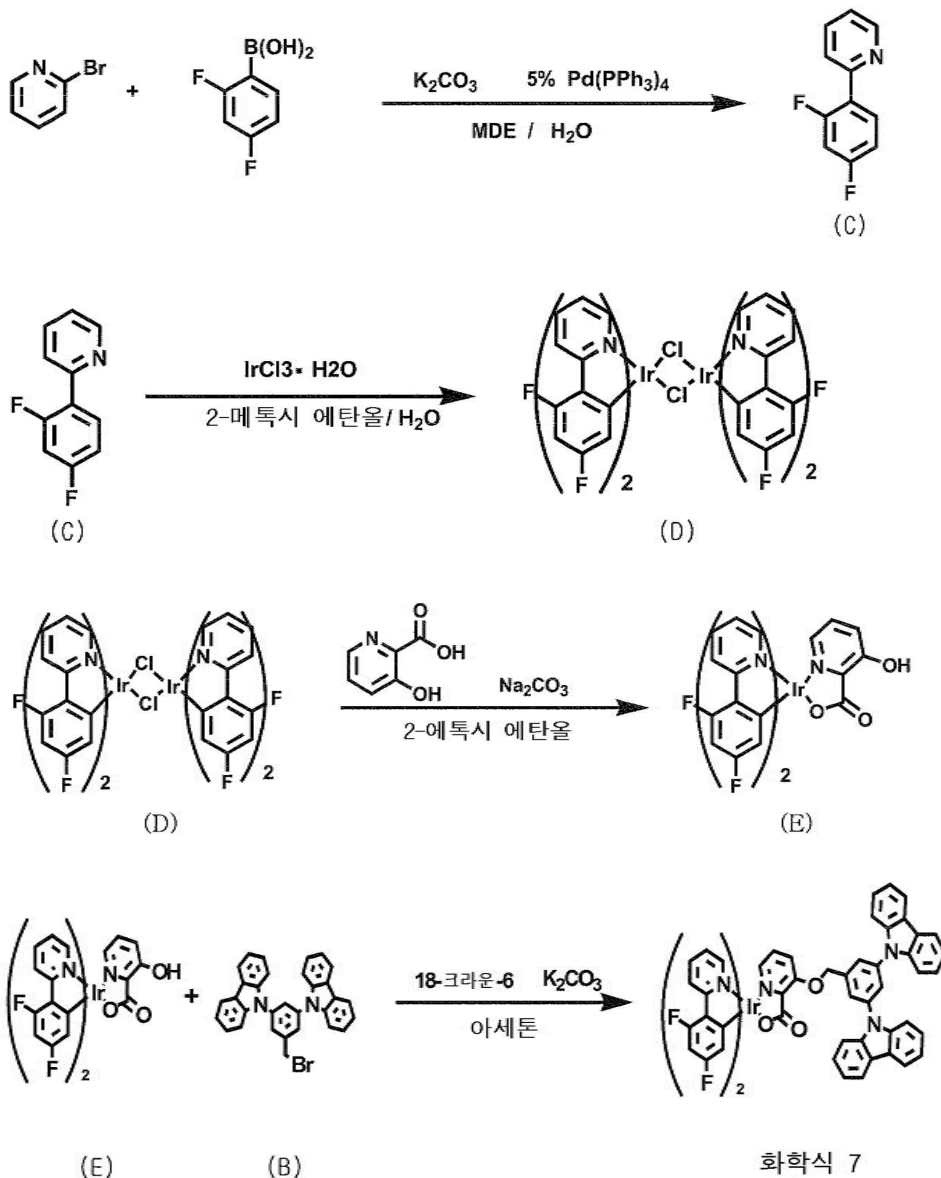
**화합물 확인 방법**

모든 새로운 화합물은 <sup>1</sup>H-NMR과 <sup>13</sup>C-NMR 그리고 UV 와 스펙트로플루오로미터로 구조를 확인하였다. <sup>1</sup>H-NMR과 <sup>13</sup>C-NMR은 브루커(Bruker) AM-300 분광기를 사용하여 기록하였고 UV는 베크만(BECKMAN) DU-650, 스펙트로플루오로미터로는 JASCO FP-7500을 사용하였다. 모든 화학적 이동도는 용매를 기준으로 ppm단위로 기록되었다.

**합성예 1**

본 발명에 따른 화학식 2에서, M이 Ir이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>은 수소인 화학식 7의 화합물을 합성하였고, 이것의 합성 반응식은 다음과 같다.





(A)의 합성

밀폐된 튜브에 요오드화 구리(0.01mmol)와 포타시움 포스페이트 트리베이직 모노하이드레이트(1.2mmol), 카바졸(1.2mmol), 1,4-디옥산(10mL)을 넣고, 질소를 주입하여 30분간 교반한뒤, 1,3-디브로모-5-메틸벤젠, (+, -)-트랜스-1,2-디아미노-시클로헥산(0.1mmol)을 넣은 뒤 마개를 닫아 110°C에서 약 24시간 가열하며 교반하였다.

TLC로 반응을 확인한 후 유리 필터로 걸러진 용매를 고진공 감압증류로 용매를 제거한 후 염화 메틸렌으로 후레쉬 컬럼(fresh column)하여 고체 물질을 얻은 후 진공펌프 하에 3시간 정도 건조하여 화합물(A)를 얻었다. 수율은 60% 이었다.

<sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, ((CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO)): δ(ppm) 8.24 (d, J = 3.8 Hz, 4H), 7.71 (s, 1H), 7.70-7.64 (m, 6H), 7.48 (t, J = 7.7 Hz, 4H), 7.31 (t, J = 8.5 Hz, 4H) 2.68 (s, 3H)

(B)의 합성

(A) 화합물(0.1mmol), NBS(0.1mmol), AIBN을 CCl<sub>4</sub> 용매에 넣고 12시간 정도 80°C에서 가열하면서 교반하였다. TLC로 반응을 확인한 뒤 여과하고, 여과액을 물과 NaCl로 씻어준 다음 고진공 하에서 용매를 제거한 다음 헥산과 디에틸 에테르로 재결정하여 갈색의 고체 화합물(B)를 40% 수율로 얻었다.

<sup>1</sup>H-NMR(CDCl<sub>3</sub>, 300MHz): δ(ppm) 8.18 (d, J = 3.8 Hz, 4H), 7.80 (s, 1H), 7.76 (s, 2H), 7.58(d, J = 4.2 Hz, 4H), 7.48 (t, J = 8.2 Hz, 4H), 7.35 (t, J = 7.7 Hz, 4H), 4.69 (s, 2H)

(C)의 합성

등근 바닥 플라스크에 2-브로모피리딘(1mmol), 2,4-디플루오로페닐보론산 (1.2mmol), 탄산칼슘(2.7mmol), 디메톡시에탄(1.5mL)을 넣고 질소를 주입하여 30분간 교반한 뒤, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.05mmol)을 넣고 환류 컨덴서를 연결하여 90℃에서 18시간 동안 환류시켰다.

TLC로 반응을 확인한 후 용매를 고진공 감압증류로 용매를 제거한 다음 에틸 아세테이트로 추출한 후 후레쉬 컬럼하여 액체의 화합물(C)을 얻었다. 수율은 93%이었다.

(D)의 합성

화합물 (C) (10mmol)을 등근 바닥 플라스크에 넣고 2-메톡시 에탄올을 13.1ml 넣고 질소를 주입하여 30분간 교반한 뒤, IrCl<sub>3</sub>·H<sub>2</sub>O(4.5mmol) 을 넣고 6시간 동안 환류시켰다. 물을 첨가하여 고체화한 다음 뷰흐너 깔때기를 통해 거른 뒤 적외선 램프에서 건조시켜, 노란색 고체의 화합물(D)을 얻었다. 수율은 70%이었다.

(E)의 합성

3-히드록시피콜린산(3mmol)과 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>를 등근바닥 플라스크에 넣고 2-에톡시에탄올을 100ml 넣고 질소를 주입하여 30분간 교반한 뒤, 화합물(D) (1mmol)을 넣고 4시간 동안 환류시켰다.

반응을 TLC로 확인한 후 용매를 고진공 감압증류로 용매를 제거한 후 염화 메틸렌으로 추출하였다. 염화메틸렌을 통해 불순물을 제거하여, 형광색의 고체 화합물(E)을 얻었다. 수율은 95%이었다.

(화학식 7)의 합성

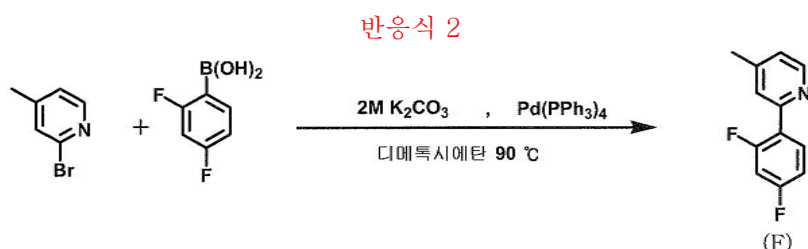
화합물(E)(1mmol)와 화합물(B) (1mmol)을 등근바닥 플라스크에 넣고 18-크라운-6(0.1mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(1.2mmol)을 넣은 다음 아세톤 30ml를 넣고 7시간 동안 환류 시켰다.

반응을 TLC로 확인한 다음 염화메틸렌으로 추출을 하고, 컬럼을 통해 분리를 하여, 녹색 고체의 화학식 6의 화합물을 얻었다. 수율은 43%이었다.

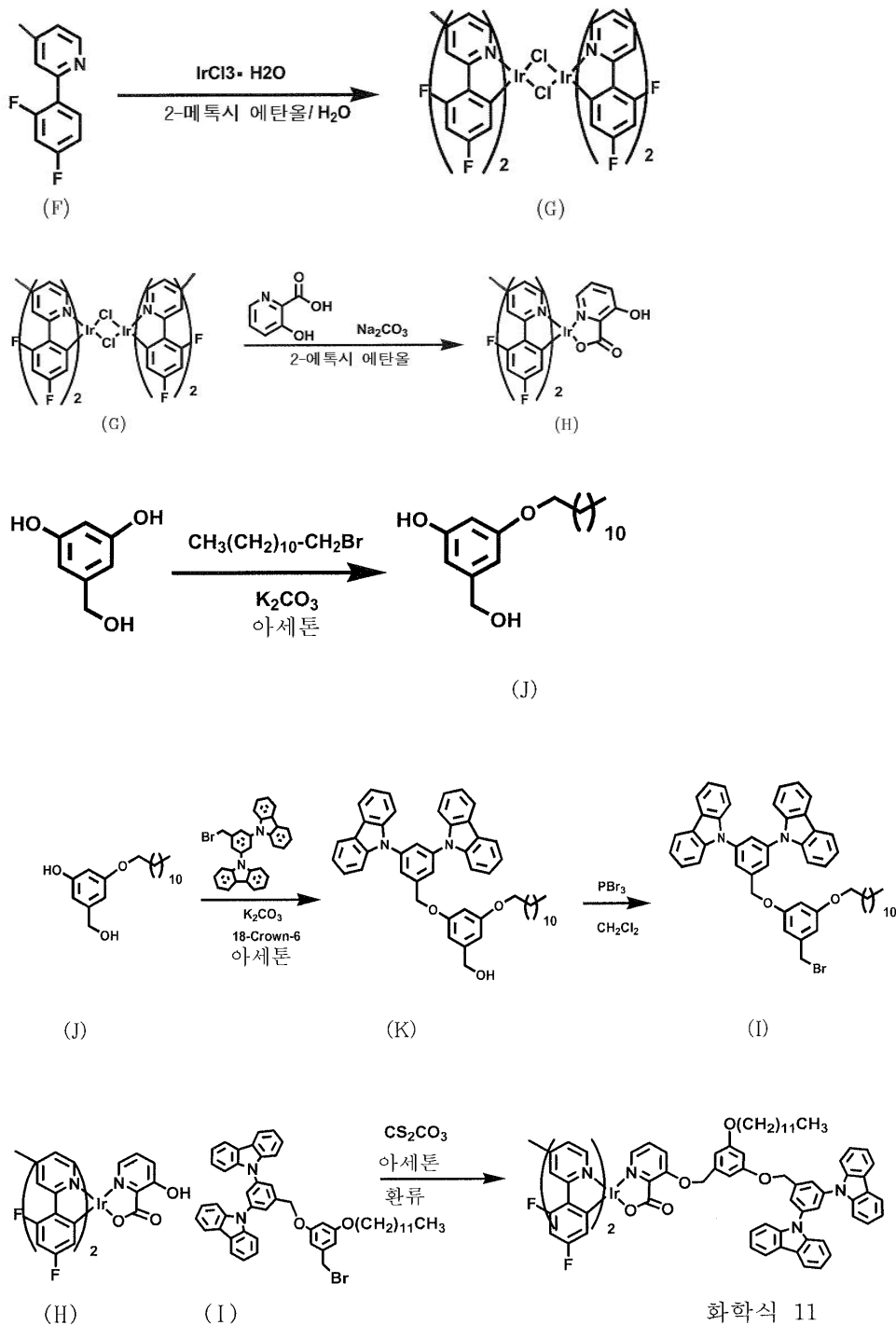
<sup>1</sup>H-NMR(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO, 300MHz): δ(ppm) 8.701(d, 5.4Hz, 1H) 8.840(d, 1.2Hz, 1H) 8.318(s, 1H) 8.246(q, 6Hz, 4H) 8.068(t, 6Hz, 3H) 7.937(m, 3H) 7.785(d, 6Hz, 1H) 7.764(s, 5.4Hz, 5H) 7.575(s, 1H) 7.432(q, 8.1Hz, 4H) 7.333(q, 7.8Hz 4H) 7.123(m, 1H) 6.579(f, 9.3Hz, 2H) 5.826(q, 2.7Hz, 1H) 5.569(s, 2H) 5.553(d, 8.8Hz, 1H)

**합성예 2**

본 발명에 따른 화학식 3에서, M이 Ir이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>은 수소이고, R<sub>7</sub>이 탄소수 11개의 알콕시인 화학식 11의 화합물을 합성하였고, 이것의 합성 반응식은 다음과 같다.







(F)의 합성

둥근 바닥 플라스크에 2-브로모-4-메틸피리딘(1mmol), 2,4-디플루오로페닐보론산(1.2mmol), 탄산칼슘(2.7mmol), 디메톡시에탄(1.5ml)을 넣고 질소를 주입하여 30분간 교반한 뒤, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.05mmol)을 넣고 환류 컨덴서를 연결하여 90°C에서 18시간 동안 환류시킨다. TLC로 반응을 확인 한 후 용매를 고진공 감압증류로 용매를 제거한 다음 에틸 아세테이트로 추출한 후 후레쉬 컬럼하여 액체 물질(F)을 얻었다. 이것의 수율은 93%였다.

<sup>1</sup>H-NMR(300MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ(ppm) 8.59(d, J=3.0 Hz, 1H), 7.99(dd, J = 6, 1.5Hz, 1H), 7.60(s, 1H), 7.13(d, J = 3Hz, 1H), 7.03(d, J = 3.9Hz, 1H), 6.97-6.90(m, 2H), 2.45(s, 3H)

(G)의 합성

화합물 (F) (10mmol)을 둥근 바닥 플라스크에 넣고 2-메톡시 에탄올을 13.1ml 넣고 질소를 주입하여 30분간 교반한 뒤,  $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (4.5mmol) 을 넣고 6시간 동안 환류시켰다. 물을 첨가하여 고체화한 다음 뷰흐너 깔때기를 통해 거른 뒤 적외선 램프에서 건조시켜, 노란색 고체의 화합물(G)를 얻었다. 수율은 70%이었다.

#### (H)의 합성

3-히드록시피콜린산(3mmol)과  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ 를 둥근바닥 플라스크에 넣고 2-에톡시에탄올을 100ml 넣고 질소를 주입하여 30분간 교반한 뒤, 화합물(G) (1mmol)을 넣고 4시간 동안 환류시켰다.

반응을 TLC로 확인한 후 용매를 고진공 감압증류로 용매를 제거한 후 염화 메틸렌으로 추출하였다. 염화메틸렌을 통해 불순물을 제거하여, 형광색의 고체 화합물(H)을 얻었다. 수율은 95%이었다.

#### (J)의 합성

둥근바닥 플라스크에 3,5 디히드록시벤질알콜(10 mmol)과 도데실브로마이드(10 mmol),  $\text{K}_2\text{CO}_3$  (10mmol)을 넣고 아세톤을 200ml 넣고 12시간 동안 환류하였다. 반응을 TLC로 확인한 다음 유리 필터로 무기물들을 제거하고 메틸렌클로라이드로 씻어주었다. 용매를 모두 제거한 후 컬럼을 통해 분리하여 화합물 (J)을 얻었다. 수득률은 50%이었다.

#### (K)의 합성

화합물 (J)(1 mmol)에 화합물 (B) (1mmol)을 둥근바닥 플라스크에 넣고 18-크라운-6(0.1mmol),  $\text{K}_2\text{CO}_3$  (1.2mmol)을 넣은 다음 아세톤 30ml를 넣고 7시간 동안 환류시켰다. TLC로 반응을 확인한 후 용매를 제거한 후 컬럼을 통해 화합물 (K)을 점성이 있는 액체로 얻었다. 수득률은 72%이었다.

#### (I)의 합성

0°C 에서 화합물 (K) (1mmol)에  $\text{PBr}_3$ (1.5mmol)을  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  용매에 넣고 2시간 동안 교반하였다. TLC로 확인한 후 컬럼을 통해 분리하여 화합물 (I)을 얻었다. 수득률은 68%이었다.

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300MHz):  $\delta$ (ppm) 8.18(d,  $J=3.9$  Hz, 4H), 7.81-7.79(br m, 3H), 7.54(d,  $J=4.1$  Hz, 4H), 7.54(t,  $J=8.2$  Hz, 4H), 7.54(t,  $J=8.2$  Hz, 4H), 7.34(t,  $J=7.92$  Hz, 4H), 6.67(s, 1H), 6.63(s, 1H), 6.54 (s, 1H), 5.32(s, 2H), 4.46(s, 2H), 3.95(t,  $J=6.5$  Hz, 2H), 1.83-1.74(m, 4H), 1.45 1.40(br, s, 2H), 1.28(s, 16H), 0.91(t,  $J=10.3$  Hz, 2H).

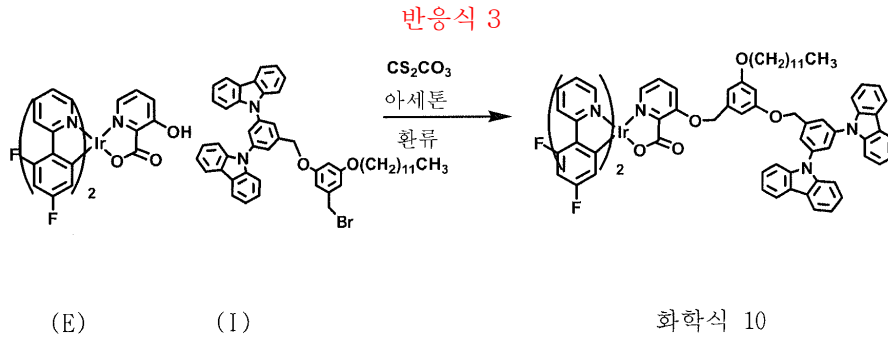
#### (화학식 11)의 합성

화학식 (H)(0.5mmol)과 화학식 (I)(0.5mmol)을 둥근바닥 플라스크에 넣고 18-크라운-6(0.05mmol),  $\text{CS}_2\text{CO}_3$  (0.6mmol)을 넣은 다음 아세톤 20ml를 넣고 7시간 동안 환류시켰다. 반응을 TLC로 확인한 다음 컬럼을 통해 분리하여 화학식 11을 얻었다. 수득률은 50%이었다.

$^1\text{H-NMR}$  ( $(\text{CD}_3)_2\text{CO}$ , 300MHz):  $\delta$ (ppm) 8.53(d,  $J=3.0$  Hz, 1H), ) 8.25 (d,  $J=3.5$  Hz, 4H), 8.11(s, 2H), 7.89 7.32 (m, 3H), 7.82(d,  $J=1.9$  Hz, 1H), 7.6(d,  $J=4.1$  Hz, 4H), 7.54(d,  $J=3.0$  Hz, 1H), 7.48(d,  $J=3.0$  Hz, 2H), 7.40(t,  $J=8.3$  Hz, 5H), 7.26(t,  $J=7.9$  Hz, 4H), 7.17(d,  $J=2.5$  Hz, 1H), 6.98 8.96(m, 2H), 6.60 6.49(m, 3H), 5.83(dd,  $J=1.2$  Hz, 4.4 Hz, 1H), 5.60(s, 3H), 5.32(s, 2H), 3.99(t,  $J=5.7$  Hz, 2H), 2.57(s, 3H), 2.52 (s, 3H), 1.85(t,  $J=2.3$  Hz, 2H), 1.38(br s, 2H), 1.25(s, 16H), 0.86(t,  $J=6.7$  Hz, 3H)

#### 합성예 3

본 발명에 따른 화학식 3에서, M이 Ir이고,  $R_1$  내지  $R_5$ 은 수소이고,  $R_7$ 이 탄소수 11개의 알콕시인 화학식 10의 화합물을 합성하였고, 이것의 합성 반응식은 다음과 같다.



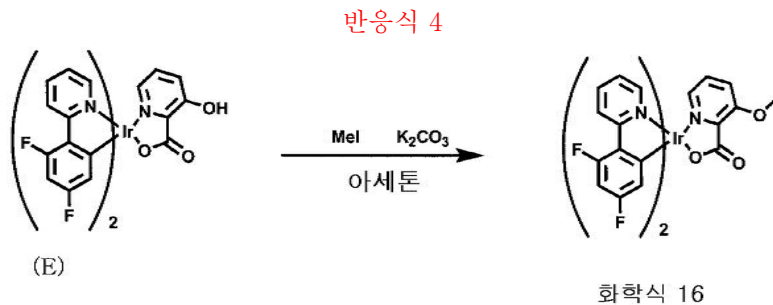
(화학식 10)의 합성

합성에 1에서 얻어진 화학식 (E)(0.5mmol)와 합성에 2에서 얻어진 화학식 (I)(0.5mmol)를 둥근바닥 플라스크에 넣고 18-크라운-6(0.05mmol), CS<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (0.6mmol)을 넣은 다음 아세톤 20mL를 넣고 7시간 동안 환류시켰다. 반응을 TLC로 확인한 다음 컬럼을 통해 분리 하여 화학식 10을 얻었다. 수득률은 50%이었다.

<sup>1</sup>H-NMR ((CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO, 300MHz): δ(ppm) 8.74(d, *J* = 2.8 Hz, 1H), 8.30(t, *J* = 6.7 Hz, 2H), 8.22(d, *J* = 3.9 Hz, 4H), 7.98(q, *J* = 3.9 Hz, 2H), 7.90 7.84(m, 4H), 7.78(d, *J* = 4.1 Hz, 1H), 7.64(d, *J* = 4.1 Hz, 4H), 7.51 7.49(m, 2H), 7.51 7.49(m, 2H), 7.44 7.34(m, 6H), 7.27(t, *J* = 7.5 Hz, 4H), 7.21(t, *J* = 5.9 Hz, 1H), 6.97(s, 1H), 6.66 6.53(m, 3H), 5.82 (dd, *J* = 1.2 Hz, 4.4 Hz, 1H), 5.61(s, 3H), 5.40(s, 2H), 3.99(t, *J* = 6.1 Hz, 2H), 1.85(t, *J* = 2.2 Hz, 2H), 1.35(br s, 2H), 1.25(s, 16H), 0.86(t, *J* = 6.7 Hz, 3H)

**비교합성에 1**

(화학식 16)의 반응식



둥근바닥 플라스크에 화합물(E)(1mmol)와 MeI(3mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2mmol)을 넣고 아세톤을 30ml 넣고 5시간 동안 환류하였다. 반응을 TLC로 확인한 다음 메틸렌클로라이드로 추출하고, 컬럼을 통해 분리하였다. 레몬색의 고형물로서 화학식 16을 얻었다. 이것의 수율은 50%이었다.

<sup>1</sup>H-NMR(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO, 300MHz): δ(ppm) 8.773(d, 4.8 Hz, 1H), 8.335(t, 9.3 Hz, 2H), 8.049(t, 4.8 Hz, 2H), 7.511(m, 1.2 Hz, 3H), 7.295(t, 7.2 Hz, 1H), 6.548(m, 2.4 Hz, 2H), 5.840(q, 8.7 Hz, 1H), 5.590(q, 8.7 Hz, 1H)

상기 합성에 1 내지 2에서 합성한 화학식 7, 11의 화합물의 광발광(PL) 특성을 조사하고, 또한, 비교 합성에 1에서 합성한 화학식 16의 화합물의 광발광 특성을 조사하였다.

도 1은 합성에 1에서 합성한 화합물(화학식 7)의 THF 용액에서의 광발광(PL) 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 2는 비교합성에 1에서 합성한 화합물(화학식 16)의 THF 용액에서의 광발광 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 3은 합성에 1에서 화학식 7의 화합물을 PMMA 고분자 필름에 20% 도핑했을 때 광발광 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 4는 합성에 2에서 화학식 11의 화합물을 PMMA 고분자 필름에 20% 도핑했을 때 광발광 스펙트럼을 나타낸 것이고, 도 5는 합성에 1의 화합물과 비교합성에 1의 클로로포름 용액중에서 광발광 스펙트럼을 비교한 것이다.

도 1과 2를 통해서 알 수 있는 바와 같이, 화학식 7의 화합물은 470nm에서 청색 발광을 보이고, 화학식 16의 화합물은 475nm에서 청색 발광을 보였고, 도 3과 도 4에서 보여지는 바와 같이, 화학식 7와 화학식 11의 화합물은 472nm 및 479nm에서 청색 발광을 보였다. 또한, 도 5를 통해 알 수 있는 바와 같이, 합성에 1과 같이 호스트용 화합물과 도판트용 화합물을 연결한 유기 금속 화합물을 사용한 경우가 도판트만을 나타낸 화학식 16을 사용한 경우보다 월등히 우수한 광발광 특성을 보여주고 있다.

또한, 상기 합성에 1 내지 2에서 합성한 화학식 7 및 11의 화합물을 각각 용매에 용해시켜 스펀코팅을 통해 얻은 막의 AFM-물포로지 이미지를 도 6 및 7에 나타내었다.

### 실시예 1

에노드는 코닝사의 10Ω/cm<sup>2</sup> ITO 기판을 사용하였고, 상기 기판 상부에 IDE 406을 진공 증착하여 정공 주입층을 600Å 두께로 형성하였다. 이어서, 상기 정공 주입층 상부에 TDP 화합물을 300Å의 두께로 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 정공 수송층을 형성한 후, 이 정공 수송층 상부에 화학식 7의 화합물을 호스트 물질 CBP에 12% 도핑하여 200Å의 두께로 발광층을 형성하였다. 그 후 상기 발광층 상부에 BCP를 진공 증착하여 50Å 두께의 정공 억제층을 형성하였다. 그 후 그 위에 Alq<sub>3</sub>를 진공 증착하여 200Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 이 전자 수송층 상부에 LiF 10Å와 Al 3000Å을 순차적으로 진공 증착하여 LiF/Al 전극을 형성함으로써 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

상기 실시예 1에 따라 제조된 유기 전계 발광 소자에 있어서, 효율, 구동전압, 색순도 및 수명 특성을 조사하였다. 그 결과, 실시예 1의 유기 전계 발광 소자의 효율, 구동전압, 색순도 및 수명 특성이 우수하다는 것을 확인할 수 있었다.

### 발명의 효과

본 발명은 다음과 같은 효과를 갖는다.

첫 번째, 본 발명에 따른 유기 금속 화합물은 저분자 수준의 발광 특성을 갖기 때문에 발광 소자의 발색 재료로 유용하게 사용될 수 있다.

두 번째, 본 발명에 따른 유기 금속 화합물은 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 구조이기 때문에, 각각이 저분자량일지라도 연결을 통해 분자량을 증대시킬 수 있기 때문에 용해성을 향상시킬 수 있다. 이에 따라, 스펀 코팅과 같은 습식 공정을 통해 소자에 적용될 수 있다.

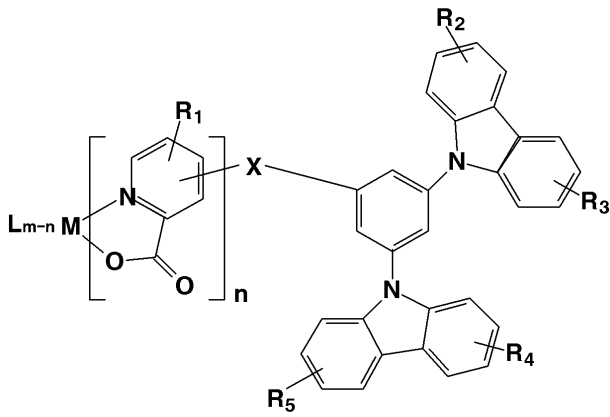
세 번째, 본 발명에 따른 유기 금속 화합물을 이용하여 발광 소자를 구성할 경우, 효율, 휘도, 구동 전압 등 EL 특성이 개선될 수 있다.

### (57) 청구의 범위

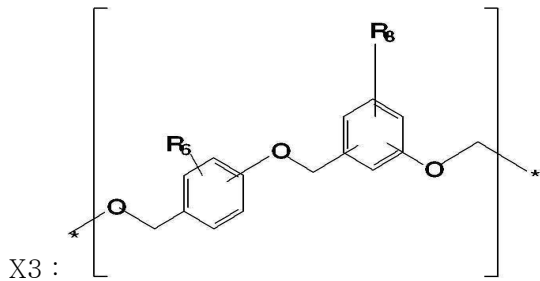
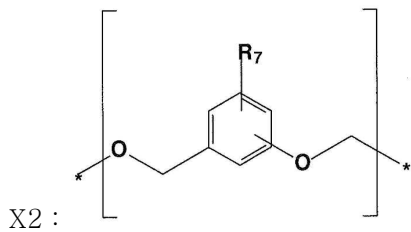
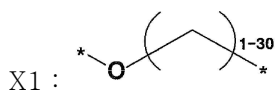
#### 청구항 1.

하기 화학식 1로 표시되는 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물:

#### 화학식 1



상기 식에서, X는 하기 X1, X2 또는 X3로 나타내어지는 기이고;



R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>는 각각 독립적으로 일치환(mono-substituted) 또는 다치환(multi-substituted) 작용기로서, 수소, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C30의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, C1-C30의 알킬티오기 또는 -Si(R')(R'')(R''')(상기 식중, R' 내지 R'''는 서로에 관계없이 수소 또는 C1-C30의 알킬기), -N(R')(R'')(상기 식중, R'과 R''는 서로에 관계없이 수소 또는 C1-C30의 알킬기)기이고, 또한 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>의 작용기중 서로 인접한 기는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고;

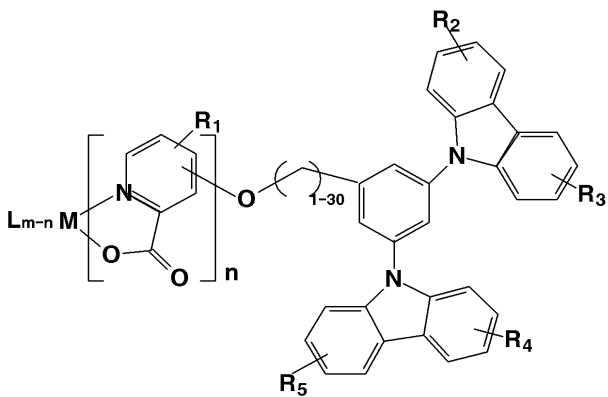
M은 Ir, Os, Pt, Pb, Re 또는 Ru이고; 및

L은 두자리 리간드이고, m은 3이고, n은 1 또는 2이다.

## 청구항 2.

제 1항에 있어서, 상기 화학식 1에서 X가 X1인 하기 화학식 2로 표시되는 유기 금속 화합물:

화학식 2

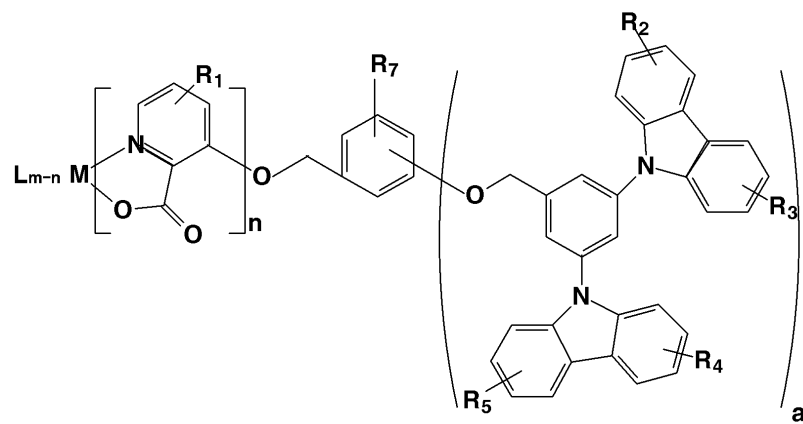


상기 식중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, L, M, m 및 n 모두 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

**청구항 3.**

제 1항에 있어서, 상기 화학식 1에서 X가 X1인 하기 화학식 3으로 표시되는 유기 금속 화합물:

화학식 3

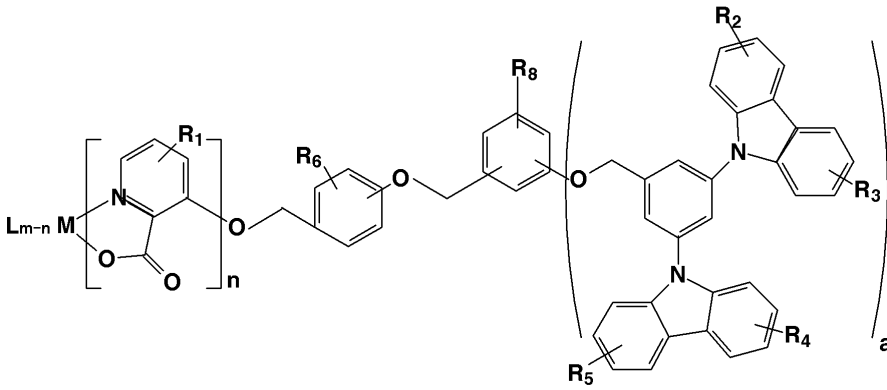


상기 식중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub> 및 R<sub>7</sub>은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, L, M, m 및 n 모두 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, a는 1 내지 3의 정수이다.

**청구항 4.**

제 1항에 있어서, 상기 화학식 1에서 X가 X2인 하기 화학식 4로 표시되는 유기 금속 화합물:

화학식 4

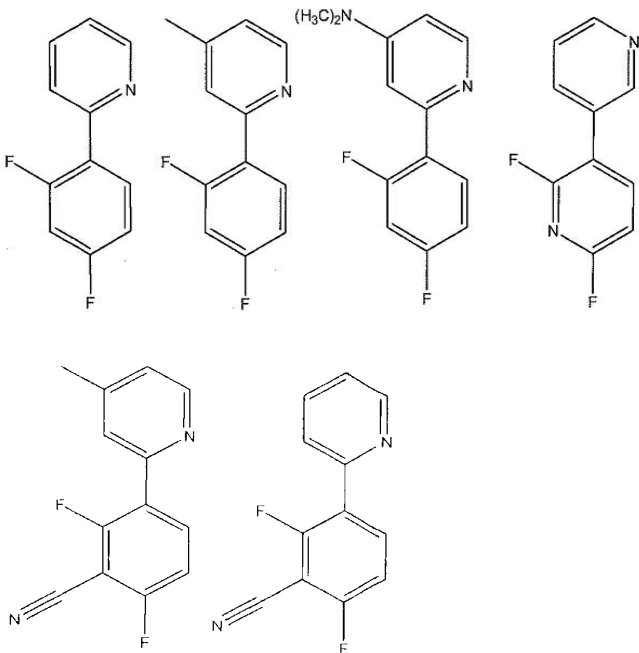


상기 식중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub> 및 R<sub>8</sub>은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, L, M, m 및 n 모두 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, a는 1 내지 3의 정수이다.

**청구항 5.**

제 1항에 있어서, 상기 L은 다음과 같은 구조를 갖는 것인 유기 금속 화합물:

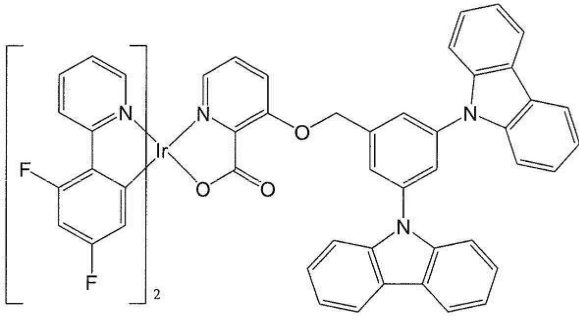
화학식 6



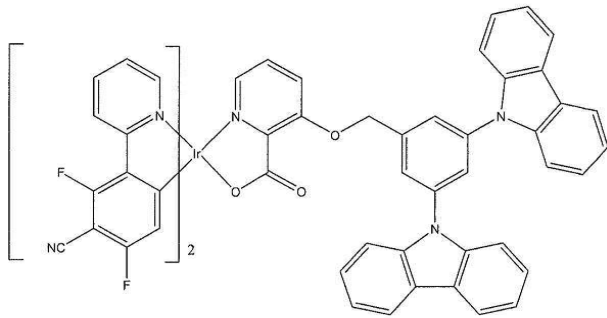
**청구항 6.**

제 1항에 있어서, 상기 유기 금속 화합물은 다음과 같은 구조의 화합물을 포함하는 유기 금속 화합물:

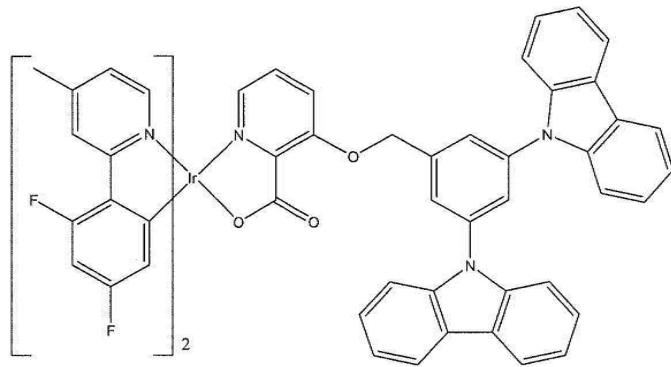
화학식 7



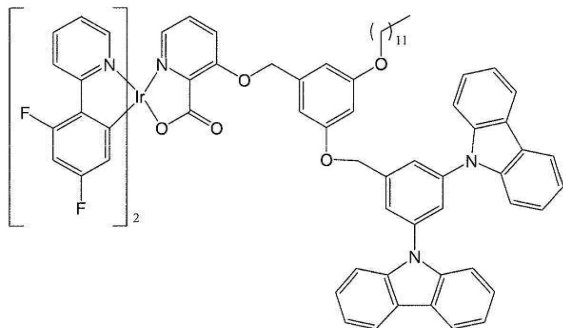
화학식 8



화학식 9

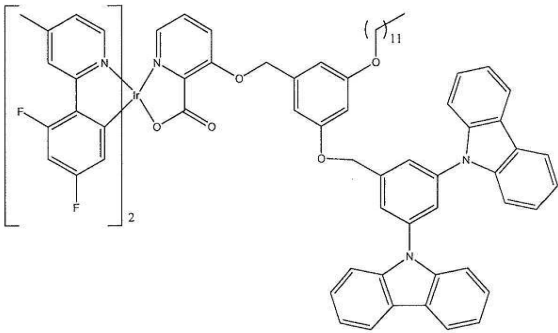


화학식 10

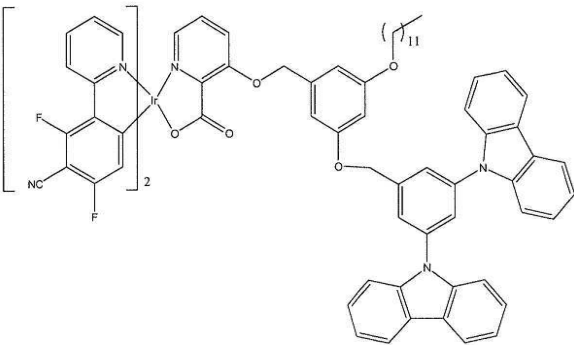


화학식 11

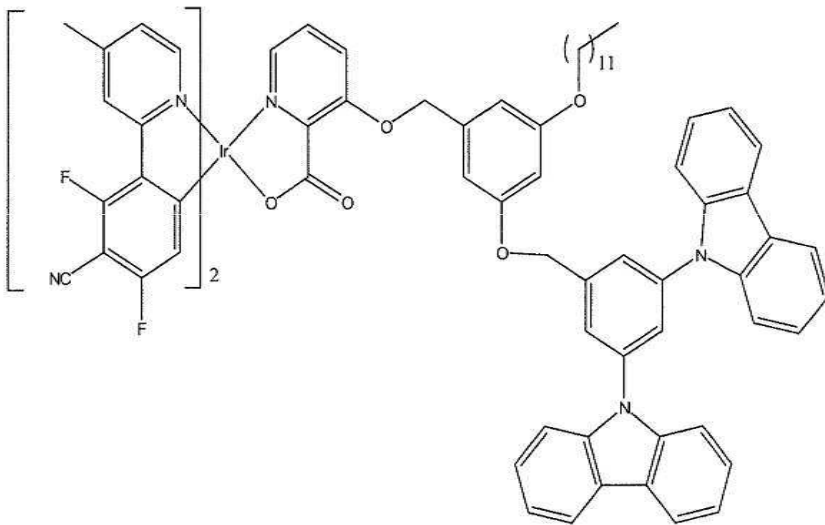




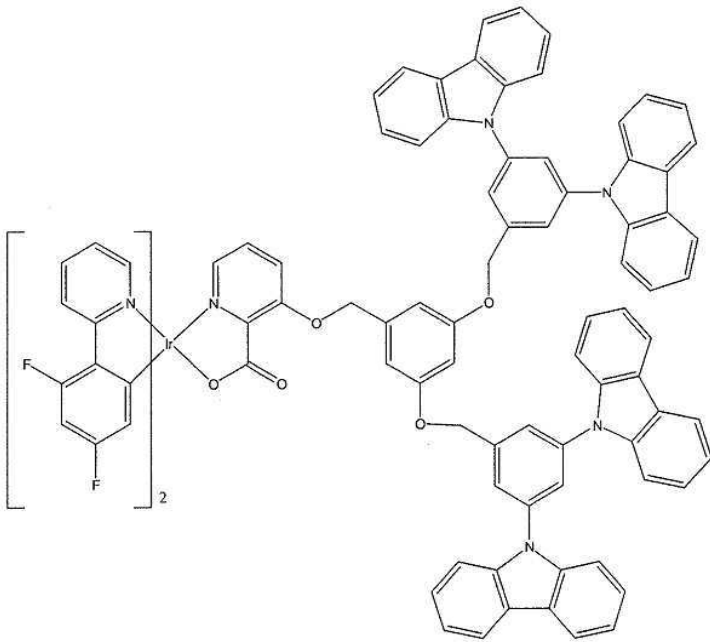
화학식 12



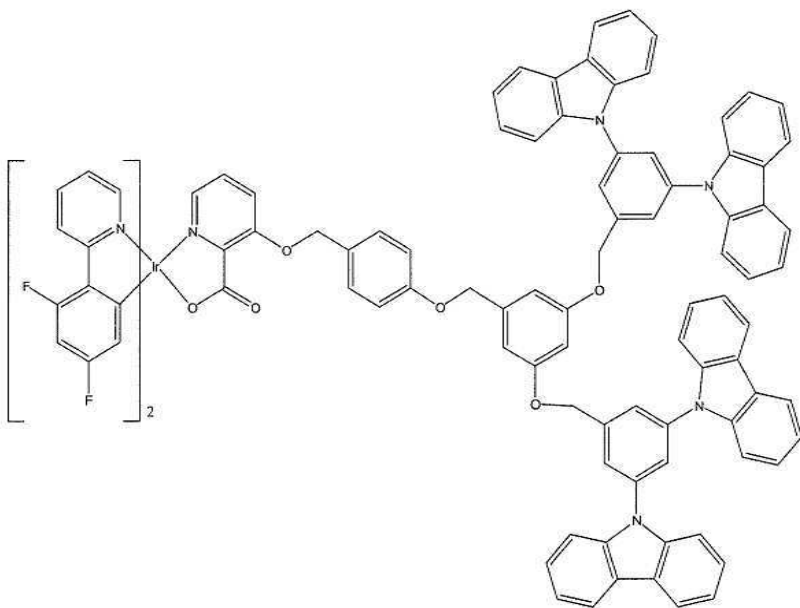
화학식 13



화학식 14



화학식 15



청구항 7.

한 쌍의 전극 사이에 유기막을 포함하는 발광 소자에 있어서, 상기 유기막이 제 1항 내지 제 6항중 어느 하나의 항에 따른 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 8.

제 7항에 있어서, 상기 유기막은 발광층인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 9.**

기판상에 제 1 전극을 형성하는 단계; 제 1 전극 상부에 유기막을 형성하는 단계; 및 유기막 상부에 제 2 전극을 형성하는 단계를 포함하고, 상기 유기막은 제 1항 내지 제 6항중 어느 하나의 항에 따른 호스트용 화합물과 도판트용 화합물이 연결된 유기 금속 화합물을 도핑하여 형성하는 것인 유기 전계 발광 소자의 제조방법.

**청구항 10.**

제 9항에 있어서, 제 1 전극은 애노드이고, 제 2 전극은 캐소드이고, 유기막은 발광층인 발광 소자의 제조방법.

**청구항 11.**

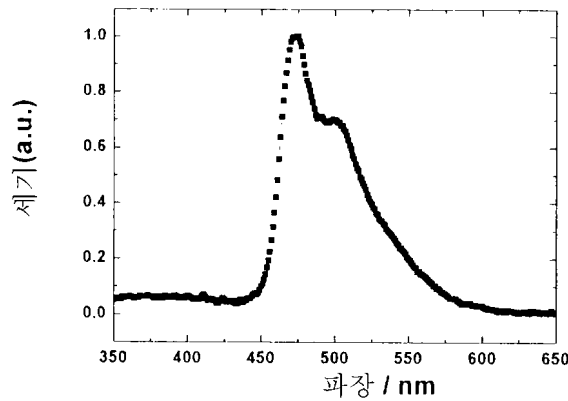
제 9항에 있어서, 상기 유기막은 스�핀 코팅 방법을 이용하여 형성되는 것인 발광 소자의 제조방법.

**청구항 12.**

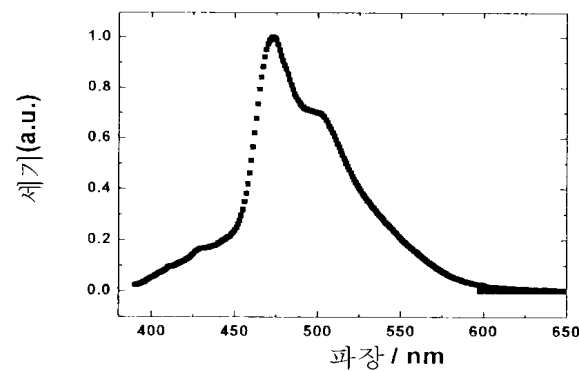
제 9항에 있어서, 상기 유기 금속 화합물의 도핑 농도는 도판트용 화합물에 연결된 호스트용 화합물의 수에 따라 조절될 수 있는 것인 발광 소자의 제조방법.

**도면**

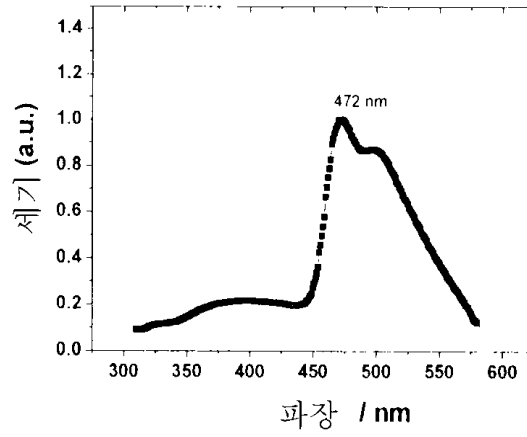
도면1



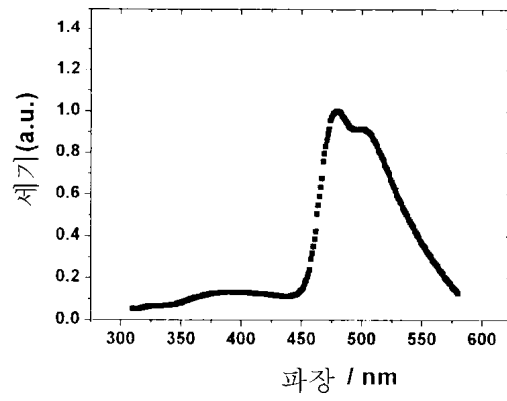
도면2



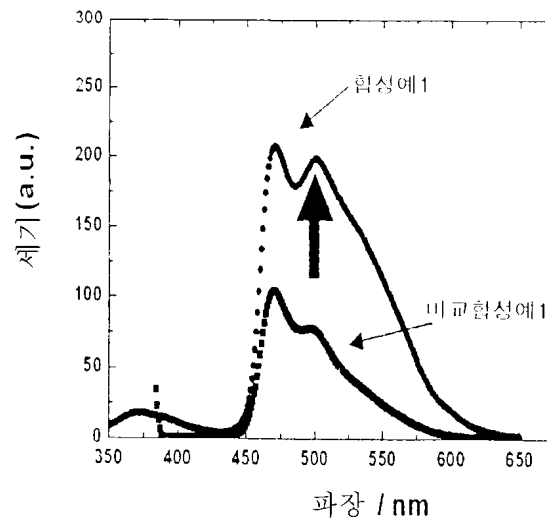
도면3



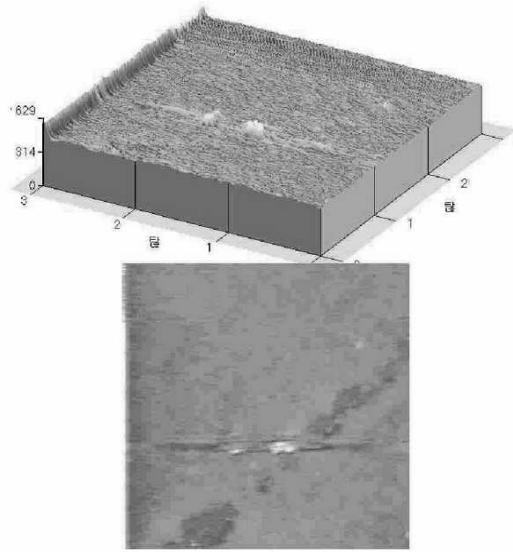
도면4



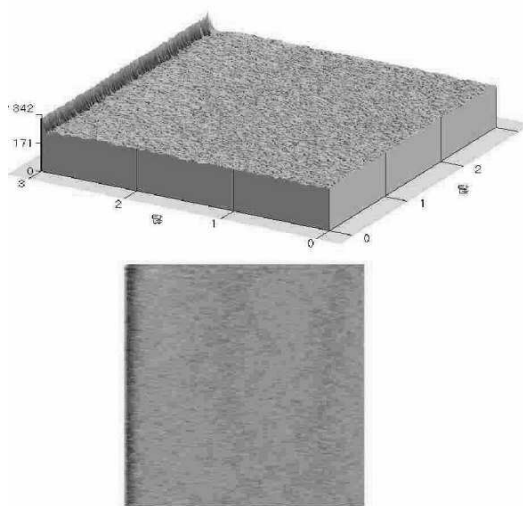
도면5



도면6



도면7



도면8

캐소드 전극	80
전자 주입층 (EIL)	70
전자 수송층 (ETL)	60
발광층 (EML)	50
정공 수송층 (HTL)	40
정공 주입층 (HIL)	30
애노드 전극	20
기판	10