



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2021년12월29일  
(11) 등록번호 10-2344883  
(24) 등록일자 2021년12월24일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07F 15/00 (2006.01) C07F 7/30 (2006.01)  
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2014-0182552  
(22) 출원일자 2014년12월17일  
심사청구일자 2019년12월11일  
(65) 공개번호 10-2016-0073788  
(43) 공개일자 2016년06월27일  
(56) 선행기술조사문헌  
JP2014509587 A\*  
KR1020140020277 A\*  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
삼성전자주식회사  
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)  
(72) 발명자  
최화일  
서울특별시 성동구 성수일로8길 47, 103동 2503호  
(성수동2가, 성수동 롯데캐슬파크)  
곽승연  
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95, A동 317호 (농서동)  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

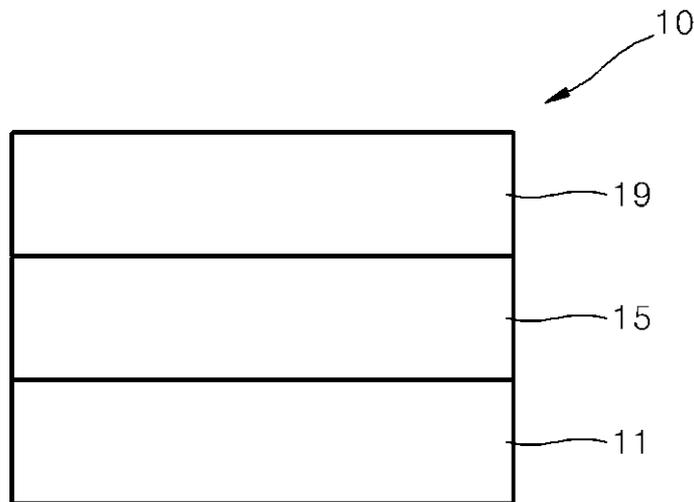
심사관 : 김지은

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

(57) 요약

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

대표도 - 도1



(72) 발명자

**곽윤현**

서울특별시 강남구 도산대로30길 16-2, 401호 (논현동)

**권오현**

경기도 용인시 기흥구 한보라2로 141, 801동 405호 (공세동, 화성파크드림프라브아파트)

**최현호**

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

**황규영**

경기도 안산시 상록구 건건8길 10, 106동 702호 (건건동, 건건e-편한세상아파트)

**김상동**

경기도 화성시 영통로27번길 20, 407동 1004호 (반월동, 신영통현대4차아파트)

**박영재**

서울특별시 도봉구 시루봉로15길 63, 1층 (방학동)

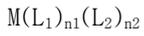
명세서

청구범위

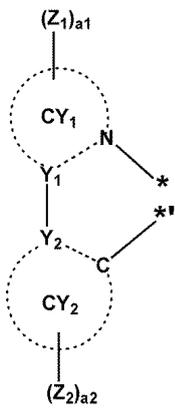
청구항 1

하기 화학식 1로 표시된 유기금속(organometallic) 화합물:

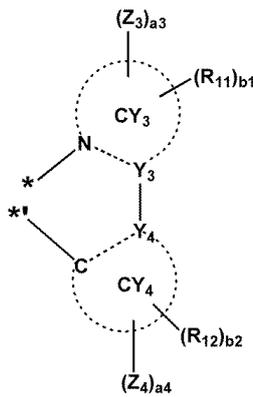
<화학식 1>



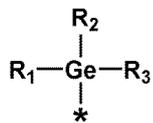
<화학식 2A>



<화학식 2B>



<화학식 2C>



상기 화학식 1 중 M은 이리듐(Ir)이고,

상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>은 상기 화학식 2A로 표시되는 리간드 중에서 선택되고,

상기 화학식 1 중 L<sub>2</sub>는 상기 화학식 2B로 표시되는 리간드 중에서 선택되고,

상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>과 L<sub>2</sub>는 서로 상이하고,

상기 화학식 1 중 n<sub>1</sub> 및 n<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고, n<sub>1</sub>과 n<sub>2</sub>의 합은 3이고,

상기 화학식 2A 및 2B 중 Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>4</sub>는 탄소(C)이고,

상기 화학식 2A 및 2B 중 CY<sub>1</sub> 및 CY<sub>3</sub>는 피리딘이고, CY<sub>2</sub> 및 CY<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 벤젠, 카바졸, 디벤조퓨란 및 디벤조티오펜 중에서 선택되고,

상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 아다만타닐기, 치환 또는 비치환된 노르보나닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 및 -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>) 중에서 선택되고,

a<sub>1</sub> 내지 a<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

상기 화학식 2B 중 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2C로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

b1은 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

b2는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기 및 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 중에서 선택되고,

상기 화학식 2A 및 2B 중 \* 및 \*'는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고, 상기 화학식 2C 중 \*는 화학식 2B의 CY<sub>3</sub> 또는 CY<sub>4</sub>와의 결합 사이트이고,

상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 아다만타닐기, 치환된 노르보나닐기 및 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 치환기는,

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 아다만타닐기, 노르보나닐기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기;

C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 아다만타닐기, 노르보나닐기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 아다만타닐기, 노르보나닐기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 아다만타닐기, 노르보나닐기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기; 및

-Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>);

중에서 선택되고,

상기 Q<sub>3</sub> 내지 Q<sub>5</sub> 및 Q<sub>33</sub> 내지 Q<sub>35</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기 및 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 중에서 선택된다.

## 청구항 2

제1항에 있어서,

상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, 시아노기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기; 및

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기;

중에서 선택된, 유기금속 화합물.

## 청구항 3

제1항에 있어서,

상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기; 및

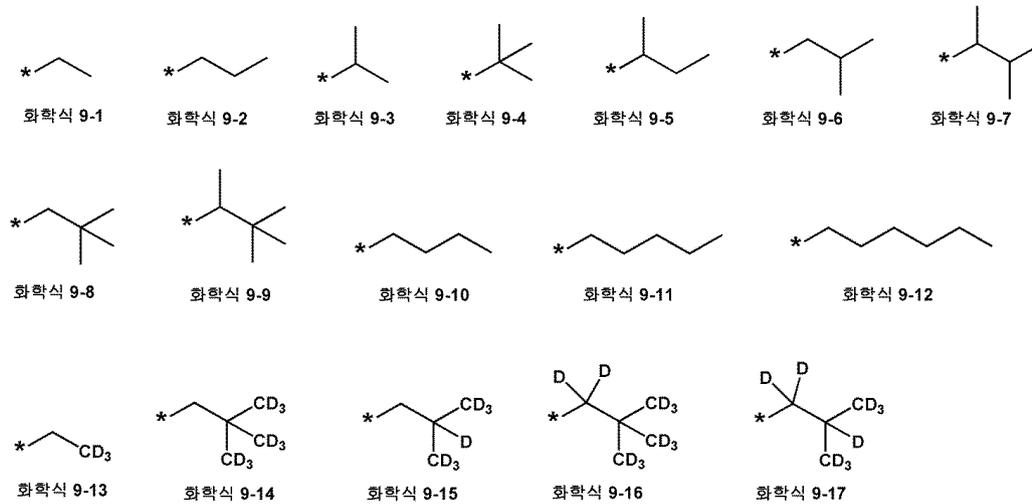
중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기;

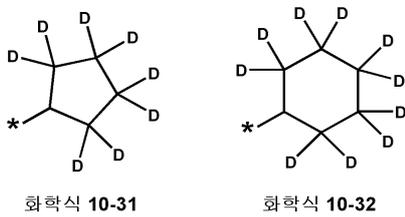
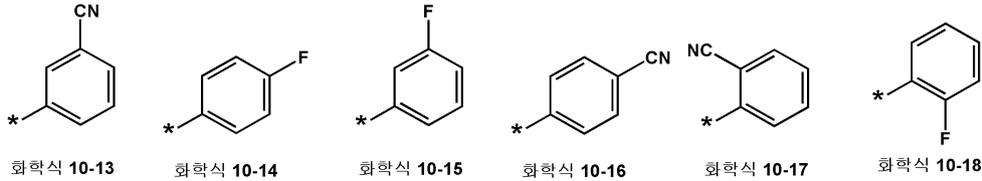
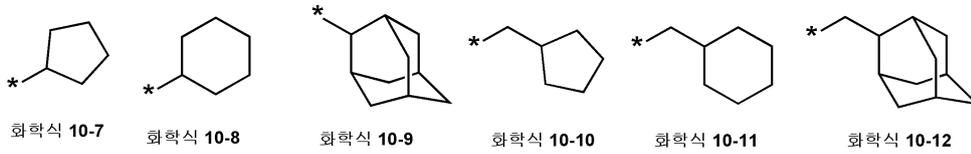
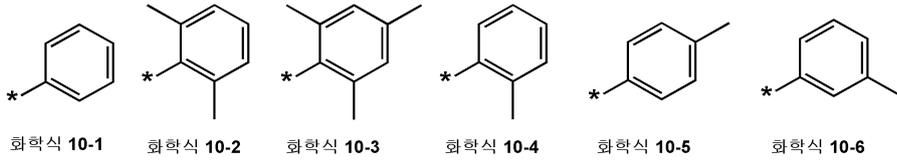
중에서 선택된, 유기금속 화합물.

**청구항 4**

제1항에 있어서,

상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 하기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-18, 10-31 및 10-32로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:





**청구항 5**

제1항에 있어서,

b1은 1 또는 2이고, b2는 0인, 유기금속 화합물.

**청구항 6**

제1항에 있어서,

상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로,

C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기;

페닐기 및 나프틸기; 및

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, 페닐기 및 나프틸기;

중에서 선택된, 유기금속 화합물.

**청구항 7**

제1항에 있어서,

상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로,

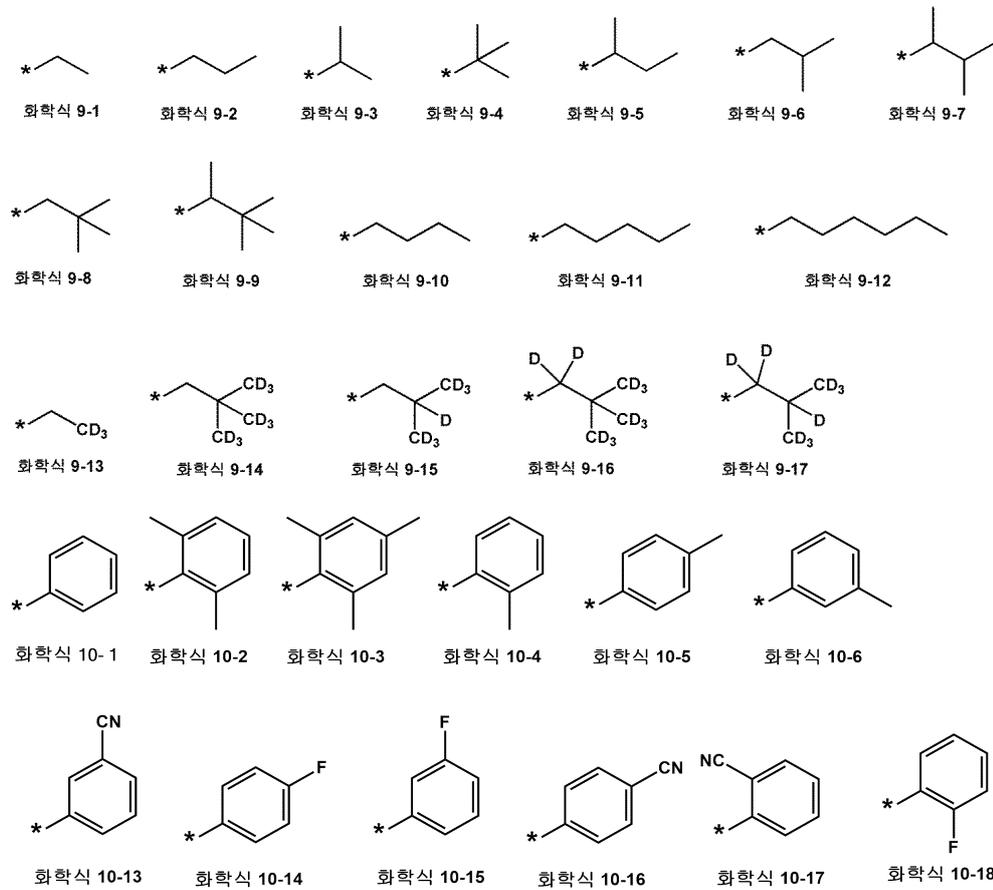
메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 페닐기 및 나프틸기; 및

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 페닐기 및 나프틸기; 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

**청구항 8**

제1항에 있어서,

상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 하기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-6 및 10-13 내지 10-18로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



**청구항 9**

제1항에 있어서,

상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 동일한, 유기금속 화합물.

**청구항 10**

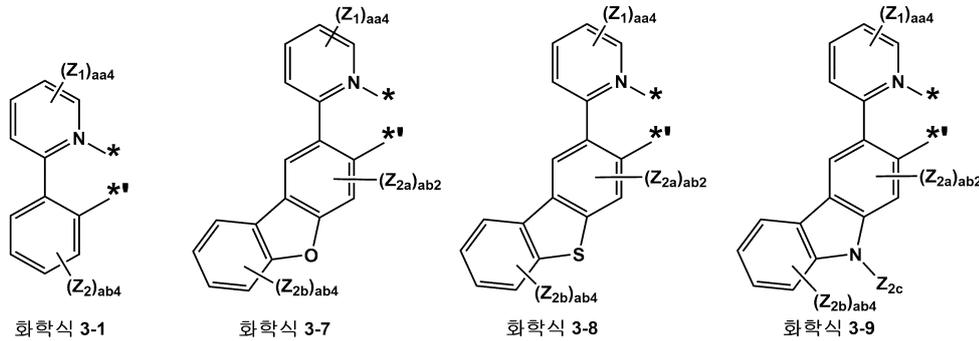
제1항에 있어서,

상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 동일하고, R<sub>3</sub>는 R<sub>1</sub>과 상이하거나, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>가 모두 서로 상이한, 유기금속 화합물.

**청구항 11**

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>이 하기 화학식 3-1 및 3-7 내지 3-9 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



상기 화학식 3-1 및 3-7 내지 3-9 중,

Z<sub>1</sub>, Z<sub>2</sub>, Z<sub>2a</sub>, Z<sub>2b</sub> 및 Z<sub>2c</sub>은 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, 시아노기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기; 및

-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>);

중에서 선택되고,

상기 Q<sub>3</sub> 내지 Q<sub>5</sub>는 서로 독립적으로,

-CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDCH<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 및 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;

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

중수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 중 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

중에서 선택되고,

ab<sub>2</sub>는 1 또는 2이고,

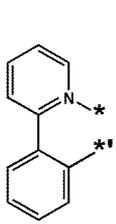
aa<sub>4</sub> 및 ab<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

\* 및 \*'은 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

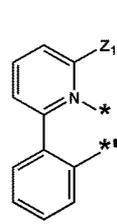
**청구항 12**

제1항에 있어서,

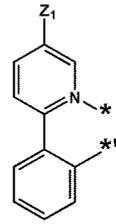
상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>이 하기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(59)로 표시되는 리간드 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



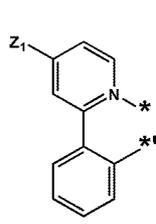
화학식 3-1(1)



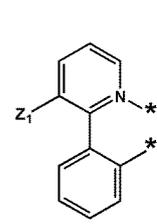
화학식 3-1(2)



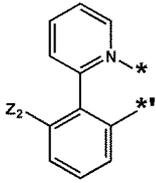
화학식 3-1(3)



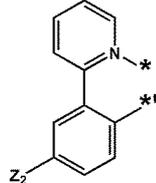
화학식 3-1(4)



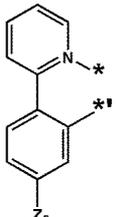
화학식 3-1(5)



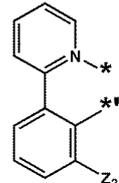
화학식 3-1(6)



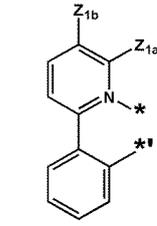
화학식 3-1(7)



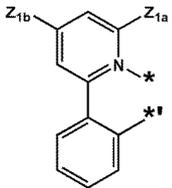
화학식 3-1(8)



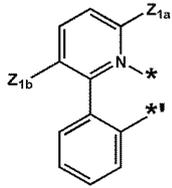
화학식 3-1(9)



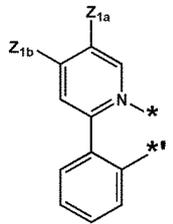
화학식 3-1(10)



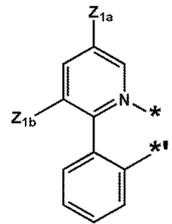
화학식 3-1(11)



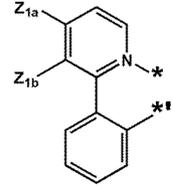
화학식 3-1(12)



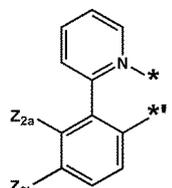
화학식 3-1(13)



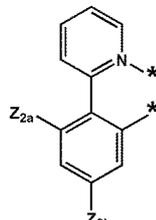
화학식 3-1(14)



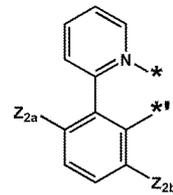
화학식 3-1(15)



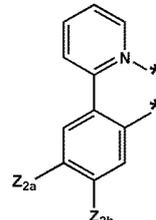
화학식 3-1(16)



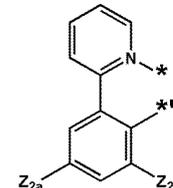
화학식 3-1(17)



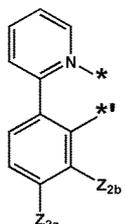
화학식 3-1(18)



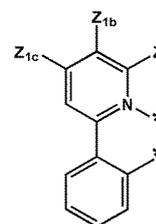
화학식 3-1(19)



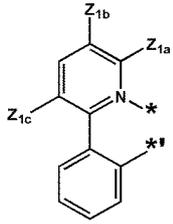
화학식 3-1(20)



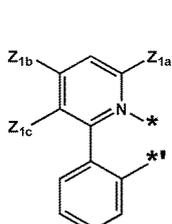
화학식 3-1(21)



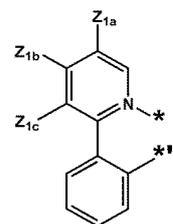
화학식 3-1(22)



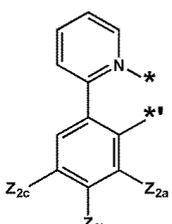
화학식 3-1(23)



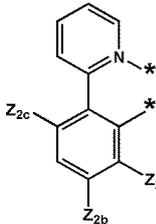
화학식 3-1(24)



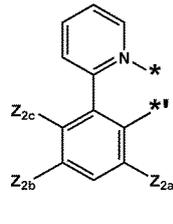
화학식 3-1(25)



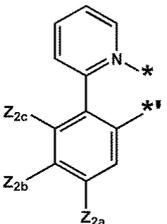
화학식 3-1(26)



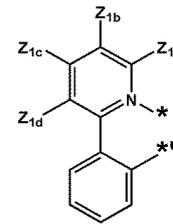
화학식 3-1(27)



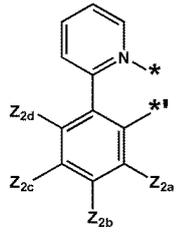
화학식 3-1(28)



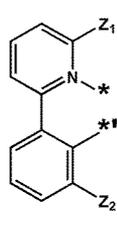
화학식 3-1(29)



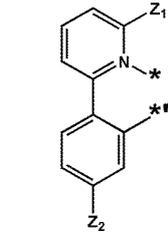
화학식 3-1(30)



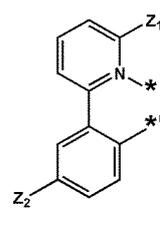
화학식 3-1(31)



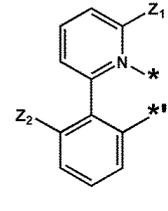
화학식 3-1(32)



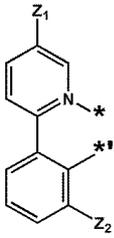
화학식 3-1(33)



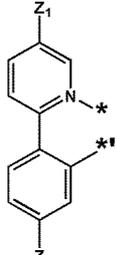
화학식 3-1(34)



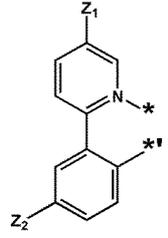
화학식 3-1(35)



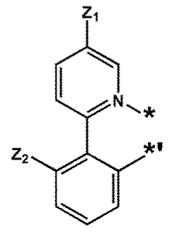
화학식 3-1(36)



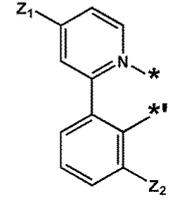
화학식 3-1(37)



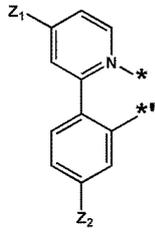
화학식 3-1(38)



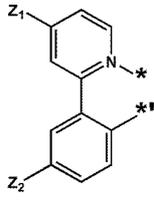
화학식 3-1(39)



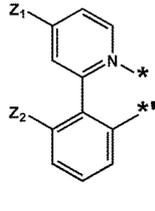
화학식 3-1(40)



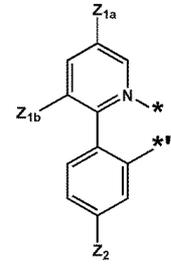
화학식 3-1(41)



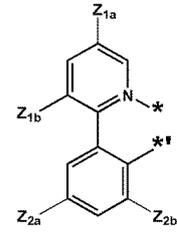
화학식 3-1(42)



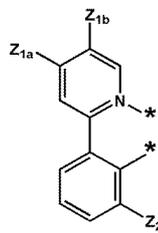
화학식 3-1(43)



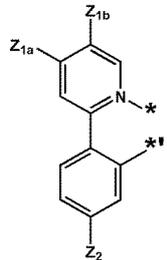
화학식 3-1(44)



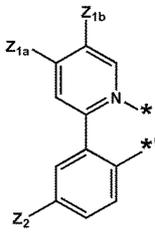
화학식 3-1(45)



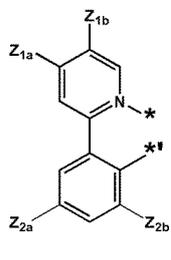
화학식 3-1(46)



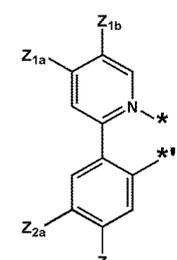
화학식 3-1(47)



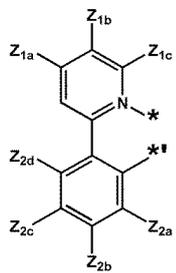
화학식 3-1(48)



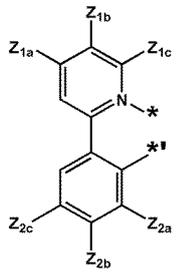
화학식 3-1(49)



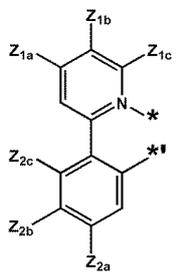
화학식 3-1(50)



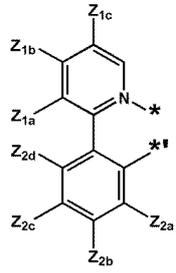
화학식 3-1(51)



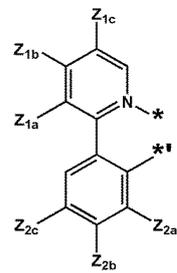
화학식 3-1(52)



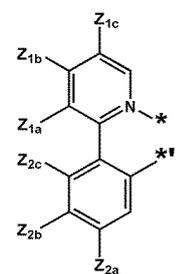
화학식 3-1(53)



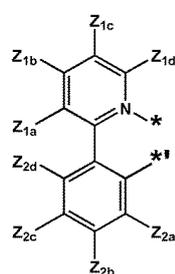
화학식 3-1(54)



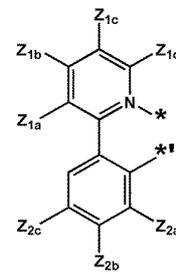
화학식 3-1(55)



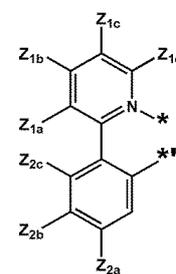
화학식 3-1(56)



화학식 3-1(57)



화학식 3-1(58)



화학식 3-1(59)

상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(59) 중

Z<sub>1</sub>, Z<sub>2</sub>, Z<sub>1a</sub>, Z<sub>1b</sub>, Z<sub>1c</sub>, Z<sub>1d</sub>, Z<sub>2a</sub>, Z<sub>2b</sub>, Z<sub>2c</sub> 및 Z<sub>2d</sub>는 서로 독립적으로, 중수소, -F, 시아노기, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>), 하기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-18, 10-31 및 10-32로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

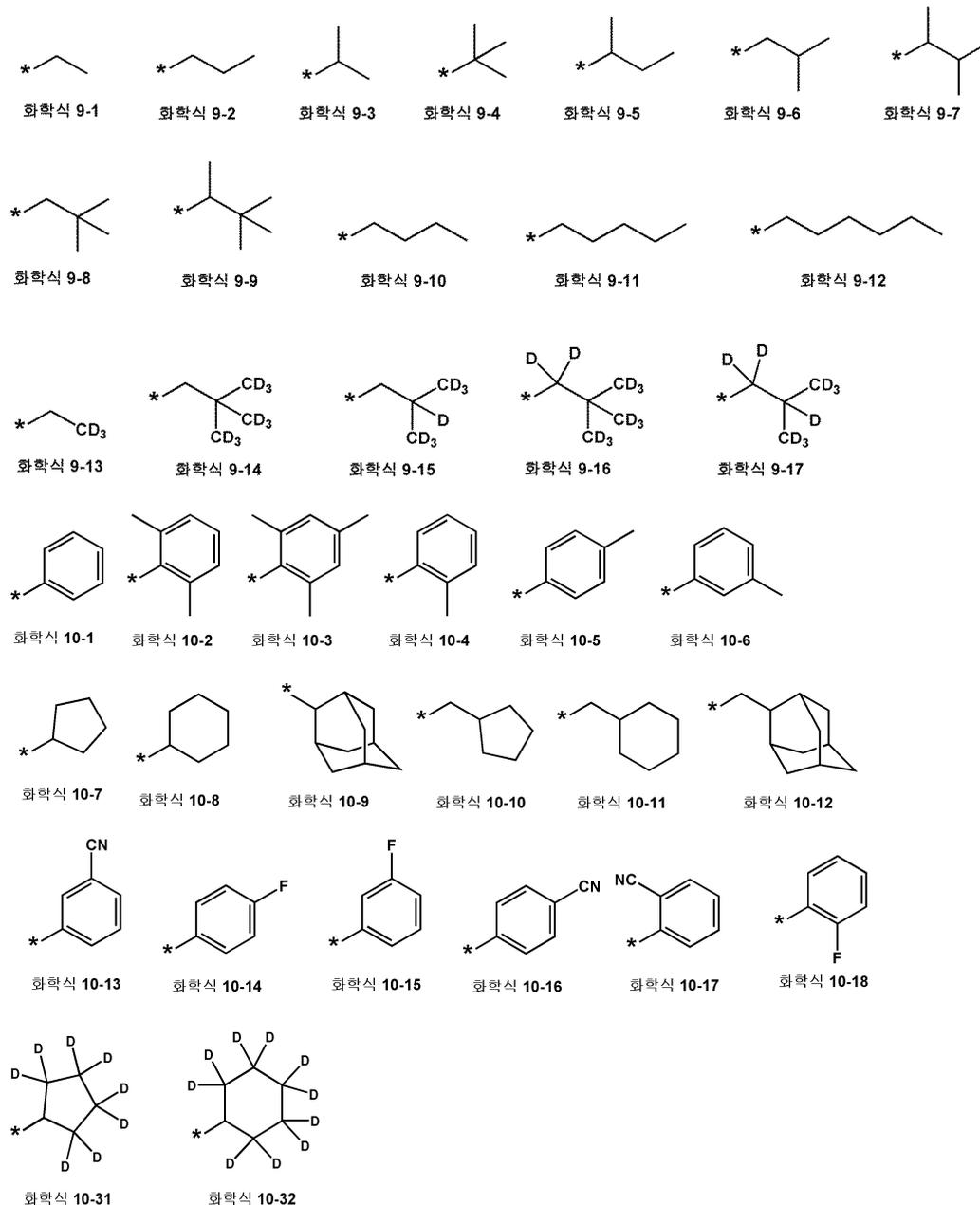
상기 Q<sub>3</sub> 내지 Q<sub>5</sub>는 서로 독립적으로,

-CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDCH<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 및 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;

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

중수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 중 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

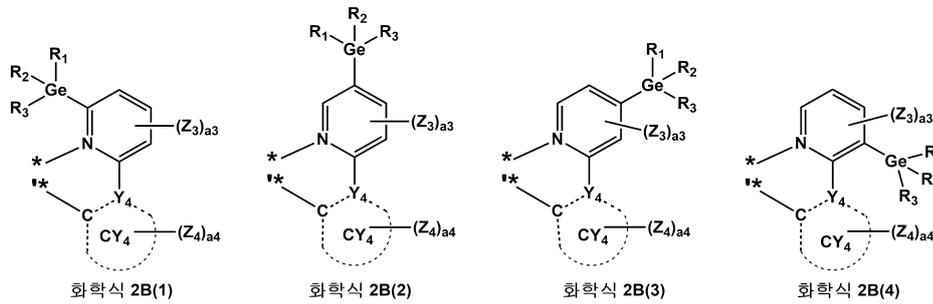
중에서 선택된다:



청구항 13

제1항에 있어서,

상기 L<sub>2</sub>가 하기 화학식 2B(1) 내지 2B(4)로 표시되는 리간드 중에서 선택되는, 유기금속 화합물:

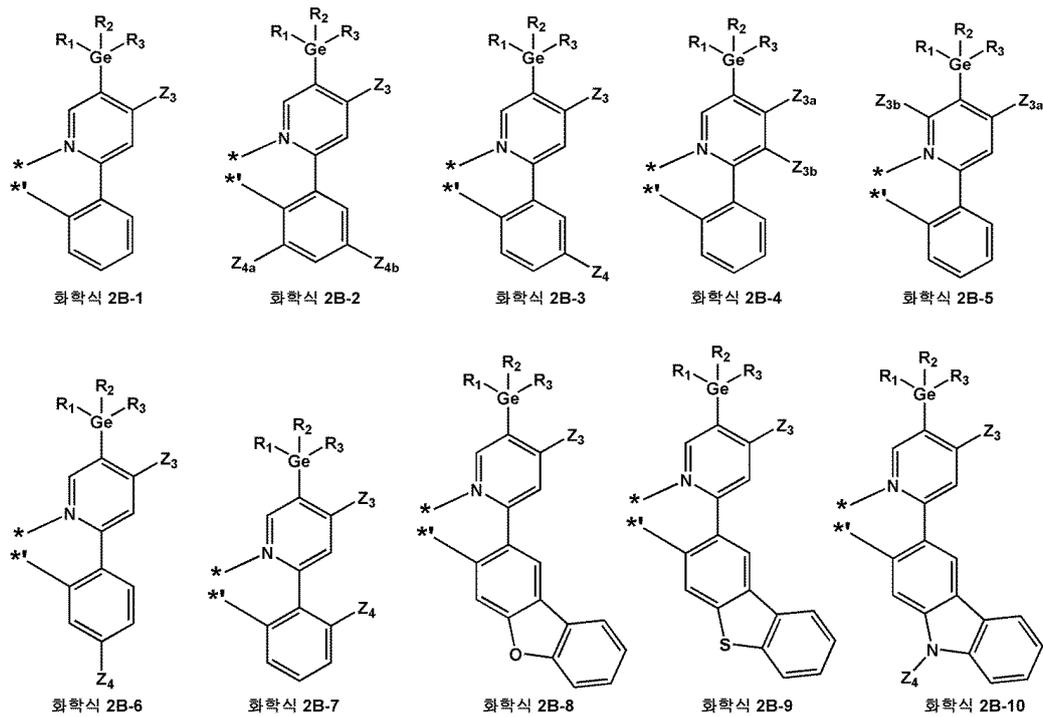


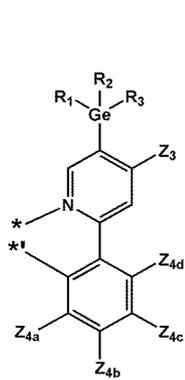
상기 화학식 2B(1) 내지 2B(4) 중 CY<sub>4</sub>, Z<sub>3</sub>, Z<sub>4</sub>, a<sub>3</sub>, a<sub>4</sub> 및 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>에 대한 설명은 제1항에 기재된 바와 동일하다.

청구항 14

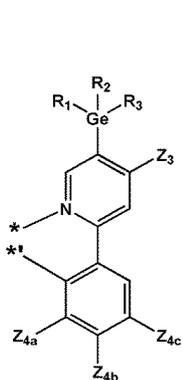
제1항에 있어서,

상기 L<sub>2</sub>가 하기 화학식 2B-1 내지 2B-60으로 표시되는 리간드 중에서 선택된, 유기금속 화합물:

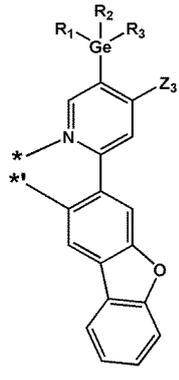




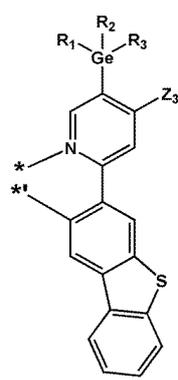
화학식 2B-11



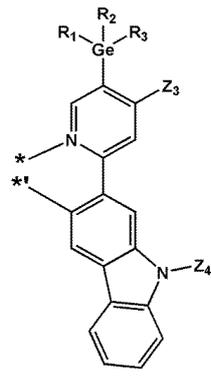
화학식 2B-12



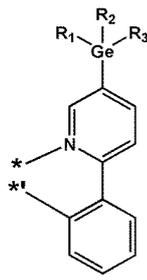
화학식 2B-13



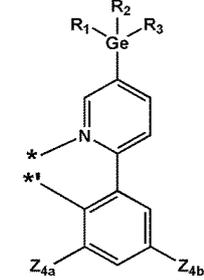
화학식 2B-14



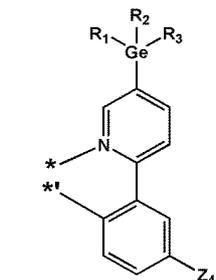
화학식 2B-15



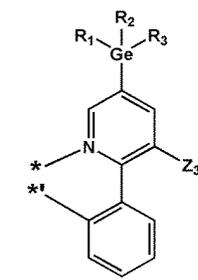
화학식 2B-16



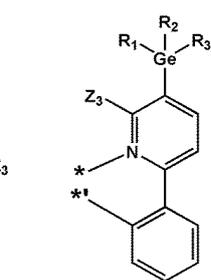
화학식 2B-17



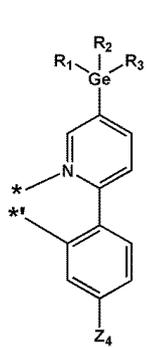
화학식 2B-18



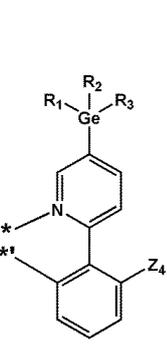
화학식 2B-19



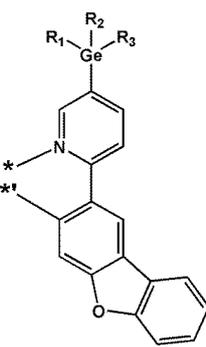
화학식 2B-20



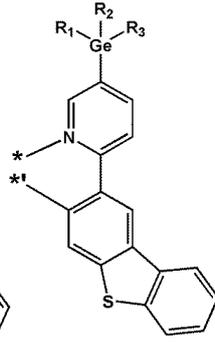
화학식 2B-21



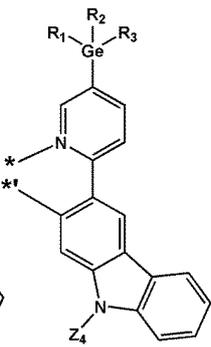
화학식 2B-22



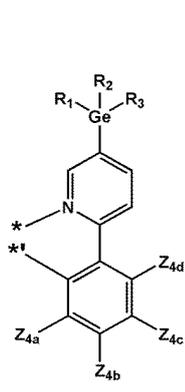
화학식 2B-23



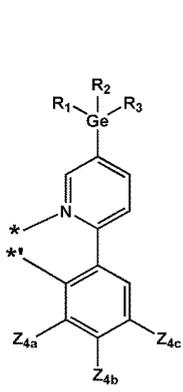
화학식 2B-24



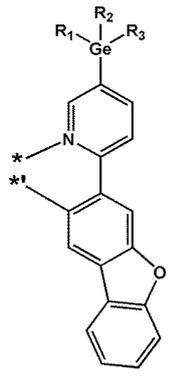
화학식 2B-25



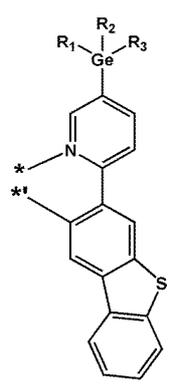
화학식 2B-26



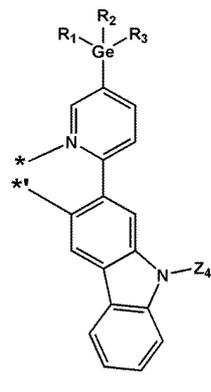
화학식 2B-27



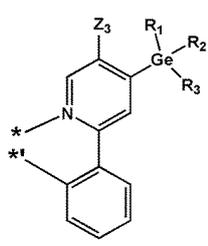
화학식 2B-28



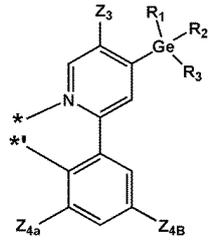
화학식 2B-29



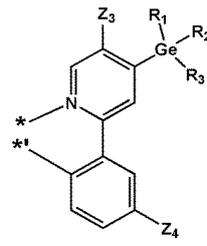
화학식 2B-30



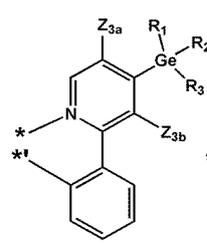
화학식 2B-31



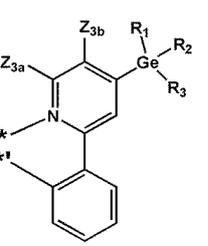
화학식 2B-32



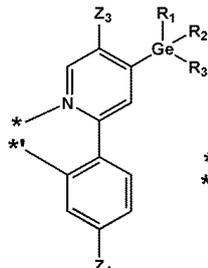
화학식 2B-33



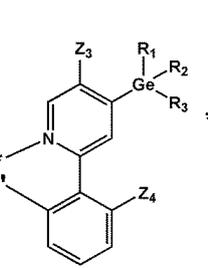
화학식 2B-34



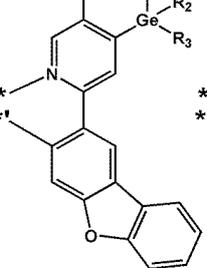
화학식 2B-35



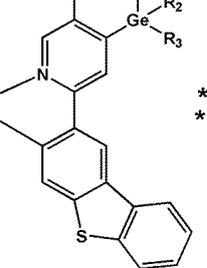
화학식 2B-36



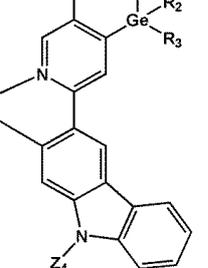
화학식 2B-37



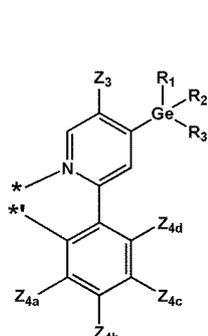
화학식 2B-38



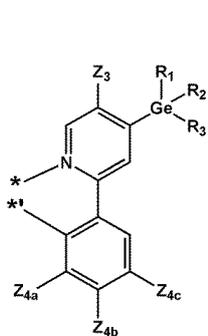
화학식 2B-39



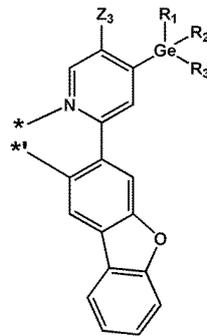
화학식 2B-40



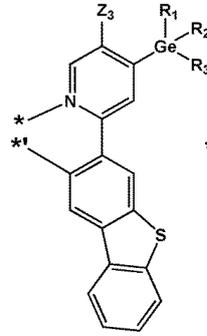
화학식 2B-41



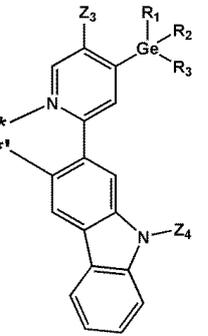
화학식 2B-42



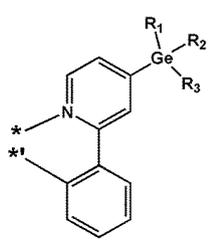
화학식 2B-43



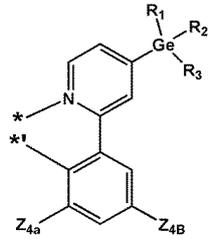
화학식 2B-44



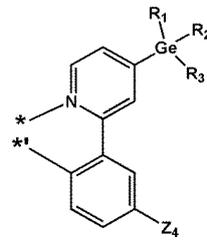
화학식 2B-45



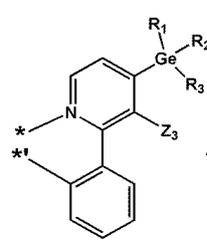
화학식 2B-46



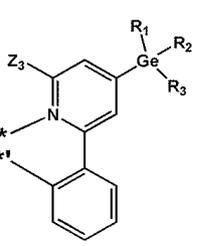
화학식 2B-47



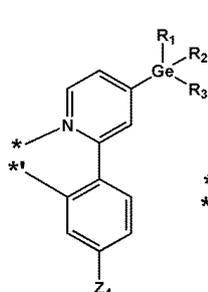
화학식 2B-48



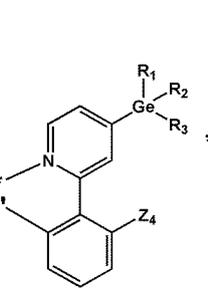
화학식 2B-49



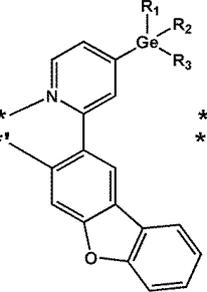
화학식 2B-50



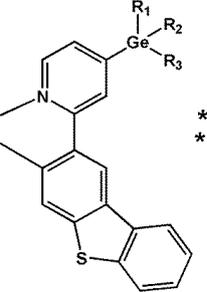
화학식 2B-51



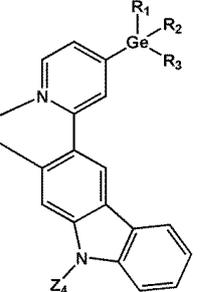
화학식 2B-52



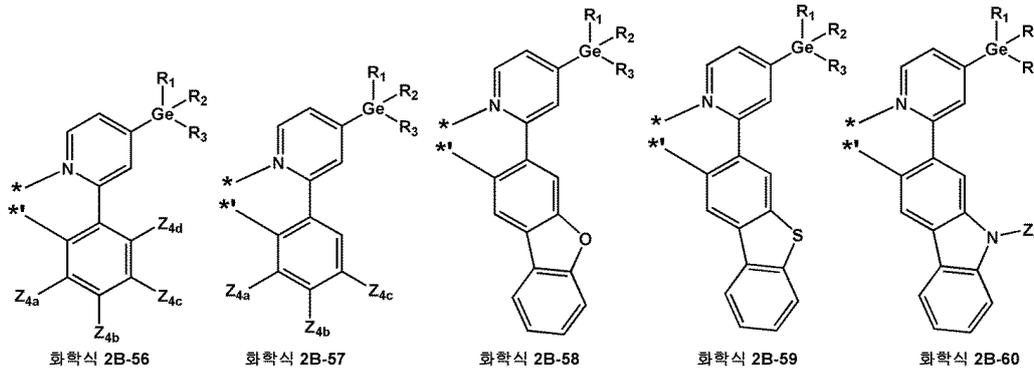
화학식 2B-53



화학식 2B-54



화학식 2B-55



상기 화학식 2B-1 내지 2B-60 중

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로,

메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 페닐기 및 나프틸기; 및

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 페닐기 및 나프틸기;

중에서 선택되고,

Z<sub>3</sub>, Z<sub>3a</sub>, Z<sub>3b</sub>, Z<sub>4</sub>, Z<sub>4a</sub>, Z<sub>4b</sub>, Z<sub>4c</sub> 및 Z<sub>4d</sub>는 서로 독립적으로,

중수소, -F, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기; 및

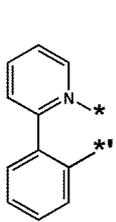
중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 페닐기 및 나프틸기;

중에서 선택된다.

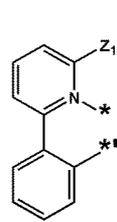
**청구항 15**

제14항에 있어서,

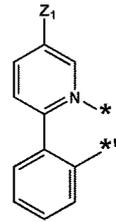
상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>이 하기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(59)로 표시되는 리간드 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



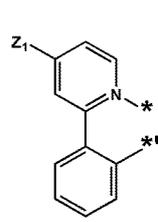
화학식 3-1(1)



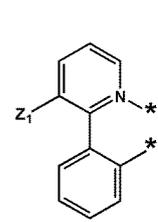
화학식 3-1(2)



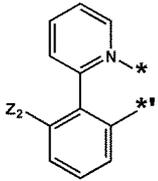
화학식 3-1(3)



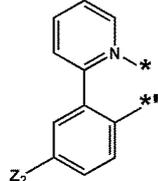
화학식 3-1(4)



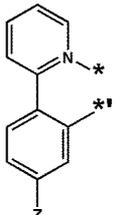
화학식 3-1(5)



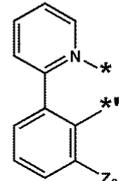
화학식 3-1(6)



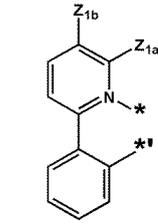
화학식 3-1(7)



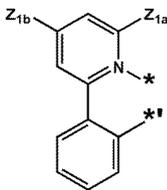
화학식 3-1(8)



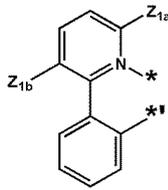
화학식 3-1(9)



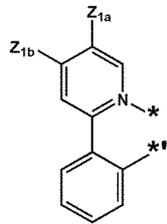
화학식 3-1(10)



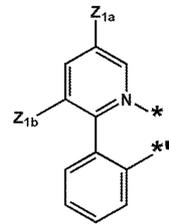
화학식 3-1(11)



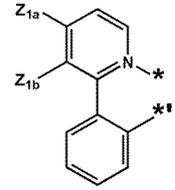
화학식 3-1(12)



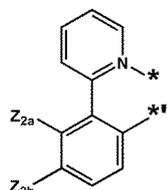
화학식 3-1(13)



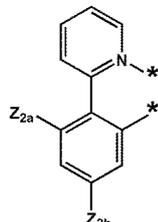
화학식 3-1(14)



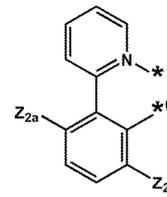
화학식 3-1(15)



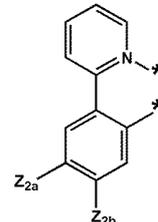
화학식 3-1(16)



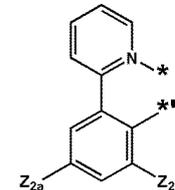
화학식 3-1(17)



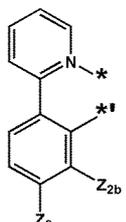
화학식 3-1(18)



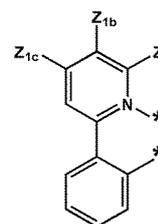
화학식 3-1(19)



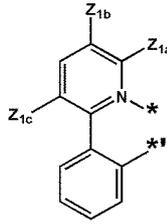
화학식 3-1(20)



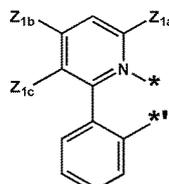
화학식 3-1(21)



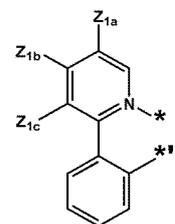
화학식 3-1(22)



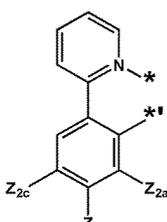
화학식 3-1(23)



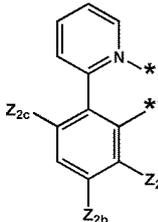
화학식 3-1(24)



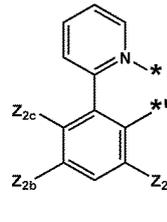
화학식 3-1(25)



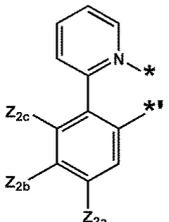
화학식 3-1(26)



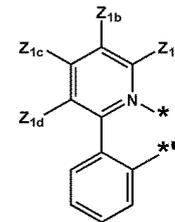
화학식 3-1(27)



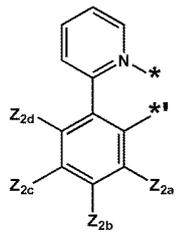
화학식 3-1(28)



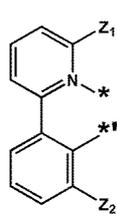
화학식 3-1(29)



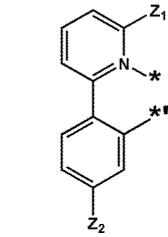
화학식 3-1(30)



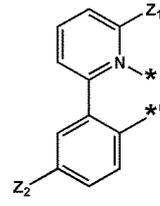
화학식 3-1(31)



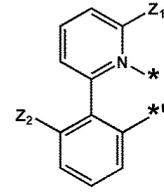
화학식 3-1(32)



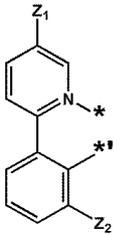
화학식 3-1(33)



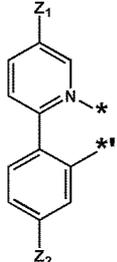
화학식 3-1(34)



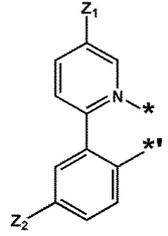
화학식 3-1(35)



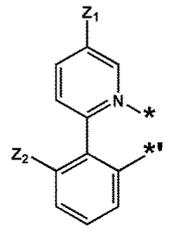
화학식 3-1(36)



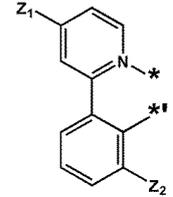
화학식 3-1(37)



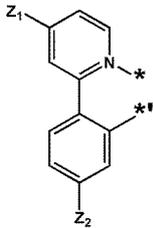
화학식 3-1(38)



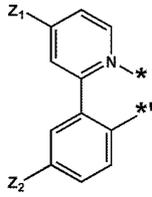
화학식 3-1(39)



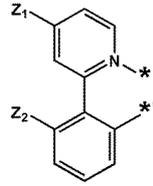
화학식 3-1(40)



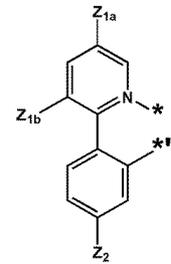
화학식 3-1(41)



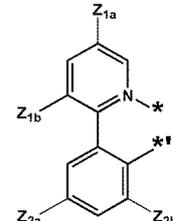
화학식 3-1(42)



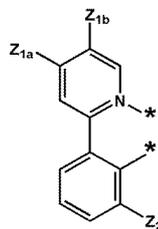
화학식 3-1(43)



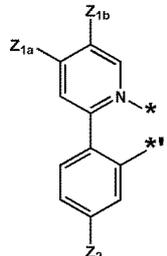
화학식 3-1(44)



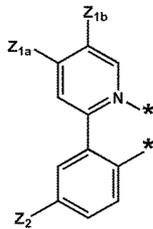
화학식 3-1(45)



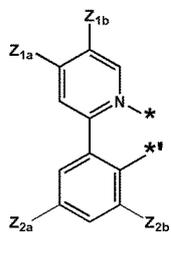
화학식 3-1(46)



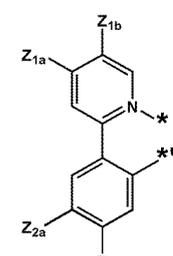
화학식 3-1(47)



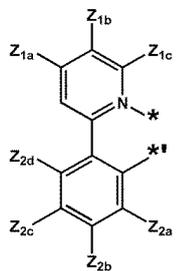
화학식 3-1(48)



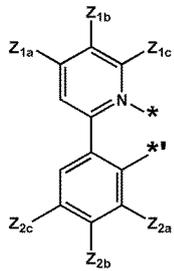
화학식 3-1(49)



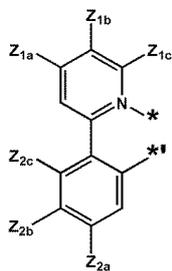
화학식 3-1(50)



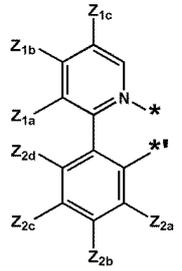
화학식 3-1(51)



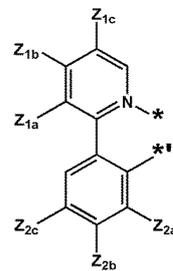
화학식 3-1(52)



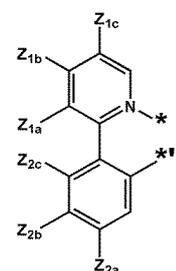
화학식 3-1(53)



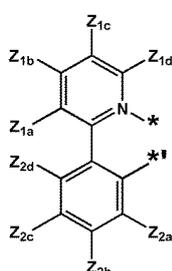
화학식 3-1(54)



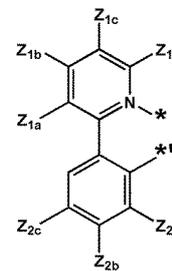
화학식 3-1(55)



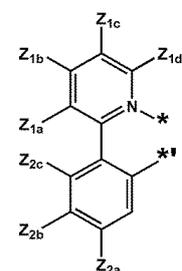
화학식 3-1(56)



화학식 3-1(57)



화학식 3-1(58)



화학식 3-1(59)

상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(59) 중

Z<sub>1</sub>, Z<sub>2</sub>, Z<sub>1a</sub>, Z<sub>1b</sub>, Z<sub>1c</sub>, Z<sub>1d</sub>, Z<sub>2a</sub>, Z<sub>2b</sub>, Z<sub>2c</sub> 및 Z<sub>2d</sub>는 서로 독립적으로, 중수소, -F, 시아노기, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>), 하기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-18, 10-31 및 10-32로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

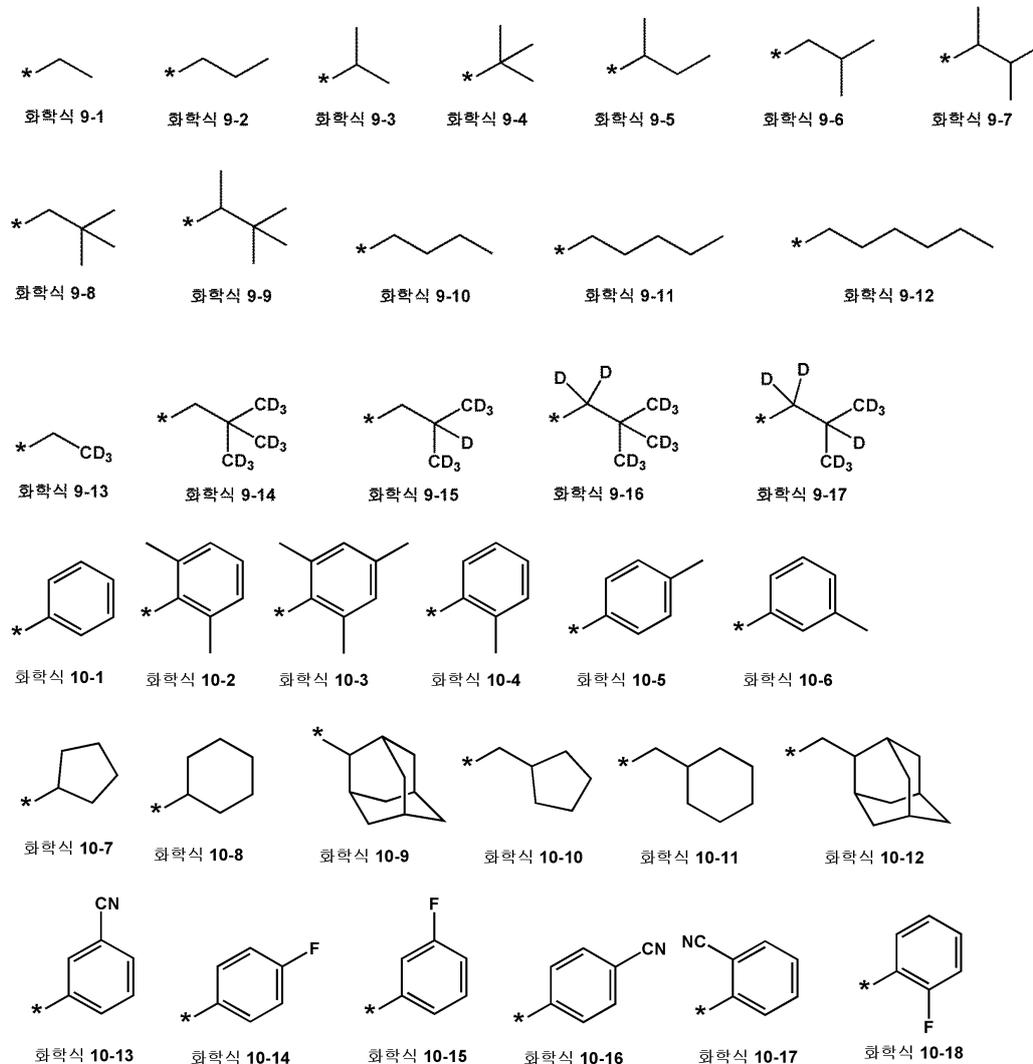
상기 Q<sub>3</sub> 내지 Q<sub>5</sub>는 서로 독립적으로,

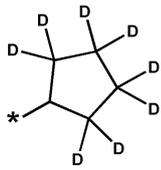
-CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDCH<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 및 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;

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

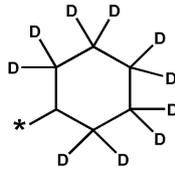
중수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 중 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;

중에서 선택된다:





화학식 10-31



화학식 10-32

청구항 16

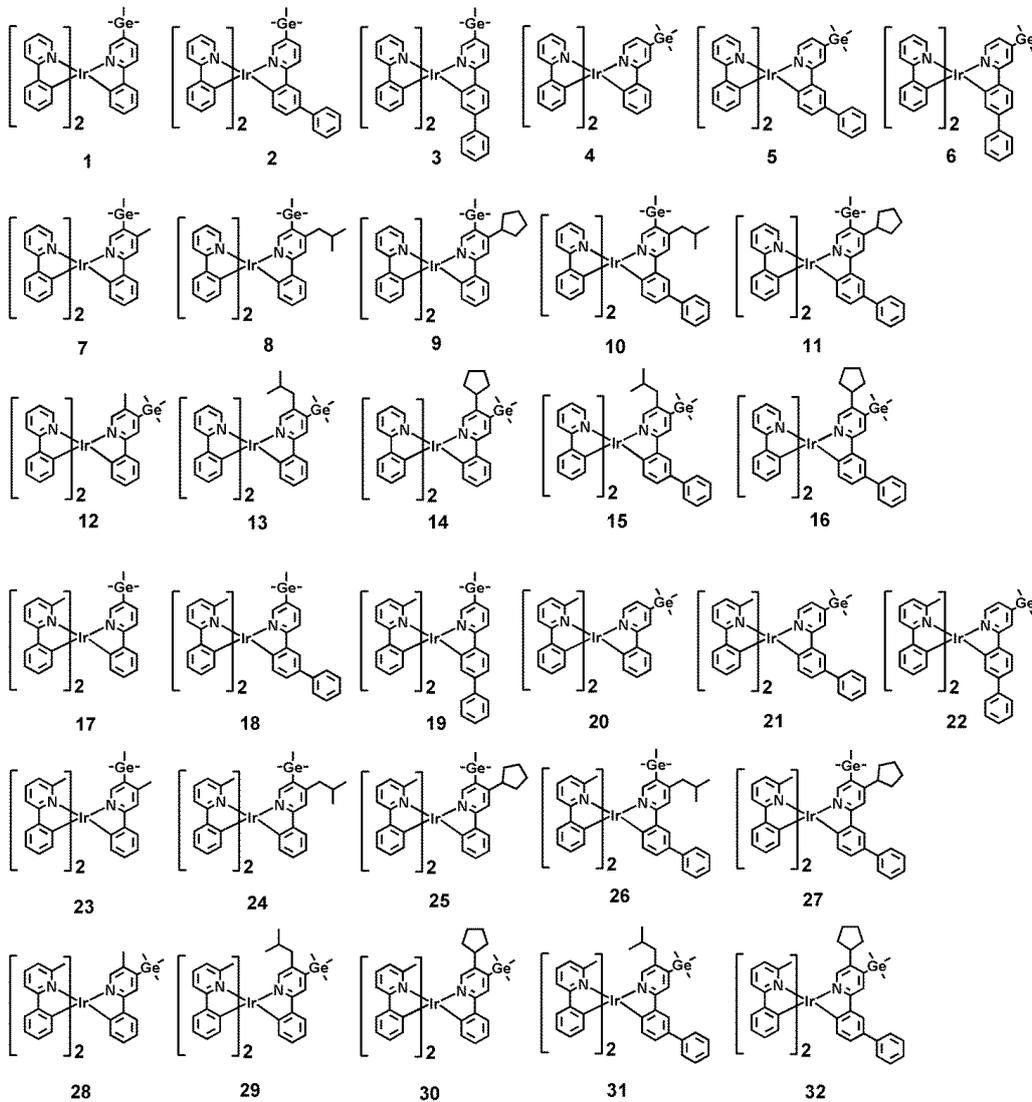
제1항에 있어서,

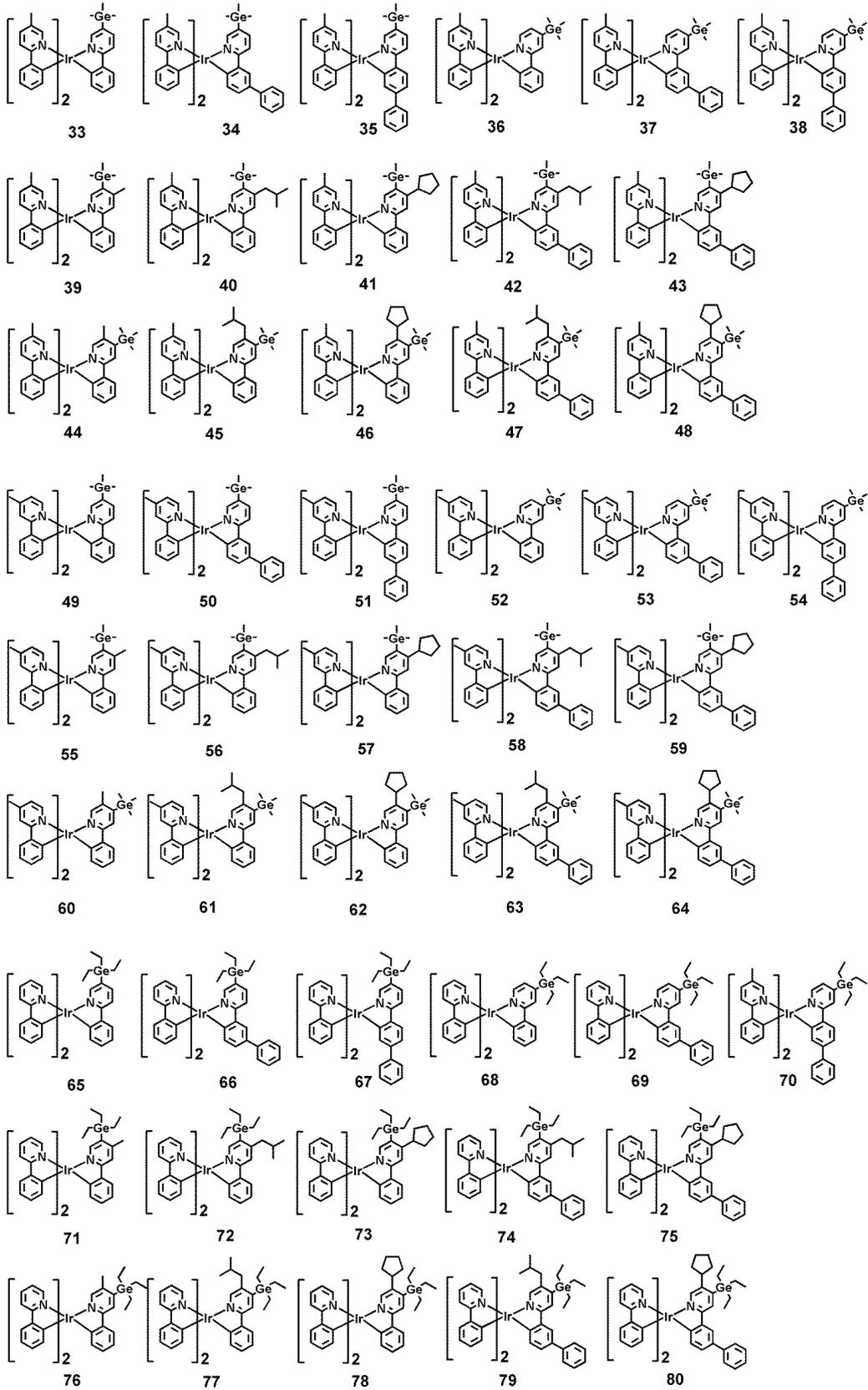
상기 화학식 1 중 n2가 1인, 유기금속 화합물.

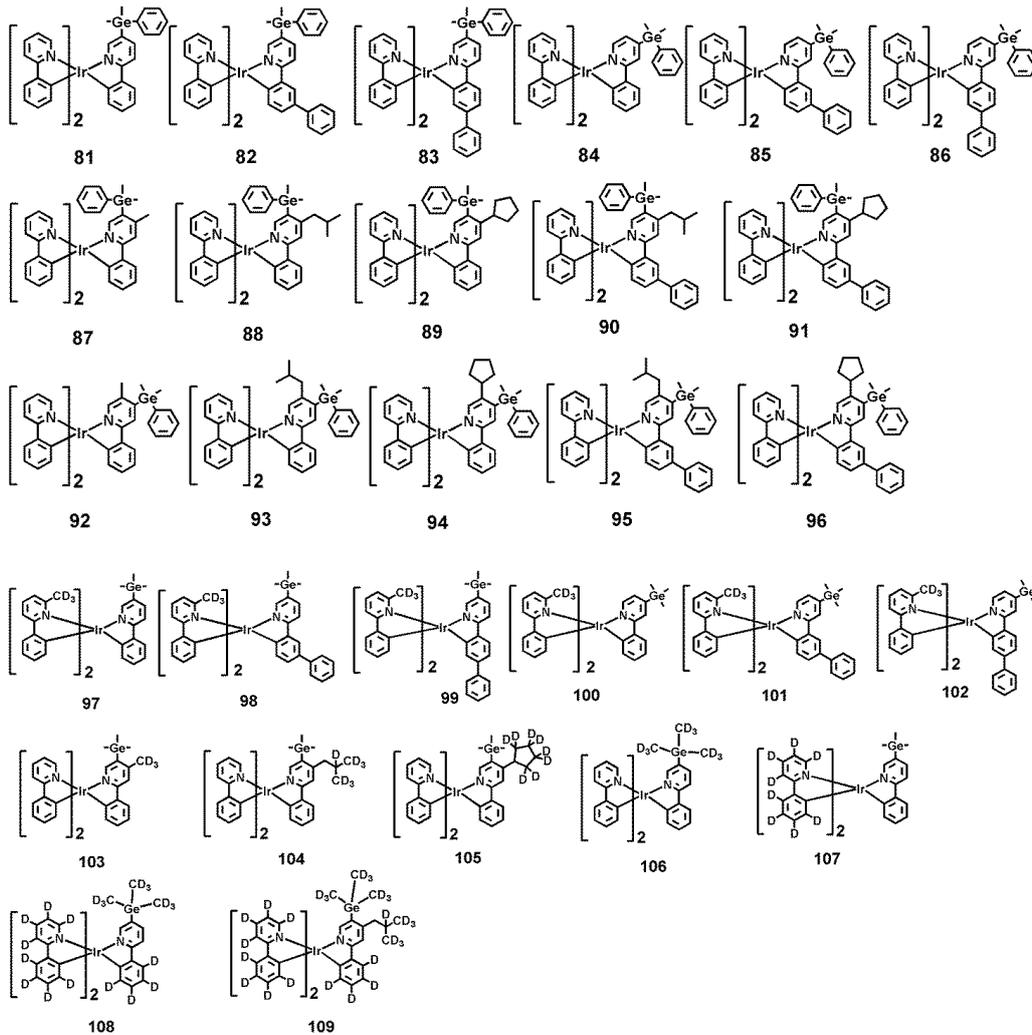
청구항 17

제1항에 있어서,

상기 화합물 1 내지 109 중 하나인, 유기금속 화합물:







**청구항 18**

제1전극;

제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 제1항 내지 제17항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한 유기층;

을 포함한, 유기 발광 소자.

**청구항 19**

제18항에 있어서,

상기 제1전극은 애노드이고,

상기 제2전극은 캐소드이고,

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

**청구항 20**

제18항에 있어서,

상기 유기금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있고,

상기 발광층은 호스트를 더 포함하고,

상기 유기금속 화합물의 중량은 상기 호스트의 중량보다 작은, 유기 발광 소자.

**청구항 21**

삭제

**청구항 22**

삭제

**청구항 23**

삭제

**발명의 설명**

**기술 분야**

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

**배경 기술**

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

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

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

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

**과제의 해결 수단**

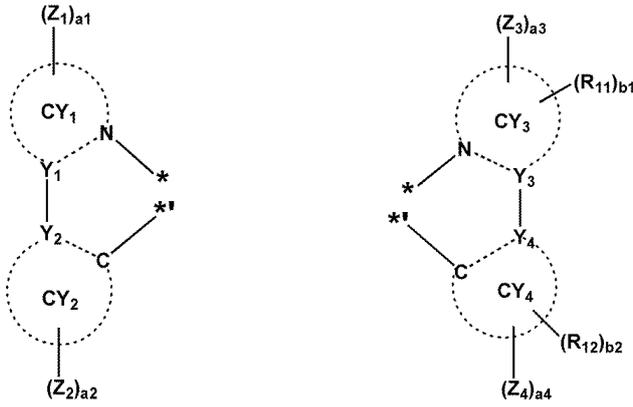
[0005] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물이 제공된다:

[0006] <화학식 1>

[0007]  $M(L_1)_{n1}(L_2)_{n2}$

[0008] <화학식 2A>

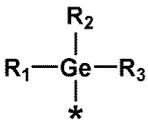
<화학식 2B>



[0009]

[0010]

<화학식 2C>



[0011]

[0012]

상기 화학식 1 중 M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 툴륨(Tm) 및 로듐(Rd) 중에서 선택되고,

[0013]

상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>은 상기 화학식 2A로 표시되는 리간드 중에서 선택되고,

[0014]

상기 화학식 1 중 L<sub>2</sub>는 상기 화학식 2B로 표시되는 리간드 중에서 선택되고,

[0015]

상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>과 L<sub>2</sub>는 서로 상이하고,

[0016]

상기 화학식 1 중 n<sub>1</sub> 및 n<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고, n<sub>1</sub>과 n<sub>2</sub>의 합은 2 또는 3이고,

[0017]

상기 화학식 2A 중 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 탄소(C) 또는 질소(N)이고, 상기 화학식 2B 중 Y<sub>3</sub> 및 Y<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 C 또는 N이고,

[0018]

상기 화학식 2A 및 2B 중 CY<sub>1</sub> 및 CY<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고, CY<sub>2</sub> 및 CY<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>시클릭 그룹 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고, CY<sub>1</sub>과 CY<sub>2</sub>는 선택적으로 (optionally), 제1연결기(a first linking group)를 통하여, 추가로, 서로 결합되고, CY<sub>3</sub> 및 CY<sub>4</sub>는 선택적으로, 제2연결기를 통하여, 추가로, 서로 결합되고,

[0019]

상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF<sub>5</sub>, 히드록실기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>), -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>) 중에서 선택되고,

[0020]

a<sub>1</sub> 내지 a<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0021]

상기 화학식 2B 중 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2C로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

[0022]

b<sub>1</sub> 및 b<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b<sub>1</sub>과 b<sub>2</sub>의 합은 1 이상이고,

- [0023] 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0024] 상기 b<sub>1</sub>이 1 이상일 경우, 화학식 2C의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는, 선택적으로(optionally), 이웃한 Z<sub>3</sub>와 서로 결합하여 탄소수 2 내지 10의 포화 또는 불포화 고리를 형성하고,
- [0025] 상기 b<sub>2</sub>가 1 이상일 경우, 화학식 2C의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는, 선택적으로(optionally), 이웃한 Z<sub>4</sub>와 서로 결합하여 탄소수 2 내지 10의 포화 또는 불포화 고리를 형성하고,
- [0026] 상기 화학식 2A 및 2B 중 \* 및 \*'는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고, 상기 화학식 2C 중 \*는 화학식 2B의 CY<sub>3</sub> 또는 CY<sub>4</sub>와의 결합 사이트이고,
- [0027] 상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0028] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0029] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>), -B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0030] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0031] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>), -B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0032] -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>), -B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>); 중에서 선택되고,
- [0033] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>9</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>19</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>29</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>39</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의

염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0034] 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.

[0035] 상기 유기금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있고, 상기 발광층에 포함된 상기 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 하고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함할 수 있다.

**발명의 효과**

[0036] 상기 유기금속 화합물은 우수한 전기적 특성 및 열적 안정성을 갖는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 저구동 전압 및 고효율과 우수한 색순도를 가질 수 있다.

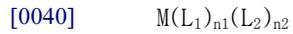
**도면의 간단한 설명**

[0037] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

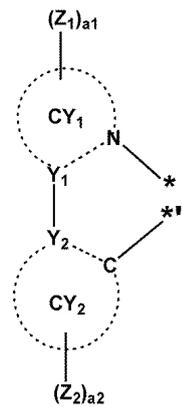
[0038] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0039] <화학식 1>



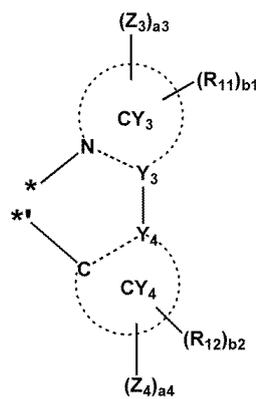
[0041] 상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>은 상기 화학식 2A로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, 상기 화학식 1 중 L<sub>2</sub>는 상기 화학식 2B로 표시되는 리간드 중에서 선택된다.

[0042] <화학식 2A>

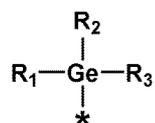


[0043]

<화학식 2B>



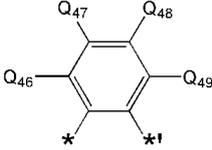
[0044] <화학식 2C>



[0045]

[0046] 상기 화학식 2A 및 2B 중 \* 및 \*\*'은 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

- [0047] 상기 화학식 1 중 M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), hafnium(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 톨륨(Tm) 및 로듐(Rd) 중에서 선택될 수 있다.
- [0048] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 M은 Ir 또는 Pt일 수 있다.
- [0049] 상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>과 L<sub>2</sub>는 서로 상이하고, 상기 화학식 1 중 n<sub>1</sub> 및 n<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고, n<sub>1</sub>과 n<sub>2</sub>의 합은 2 또는 3이다.
- [0050] 상기 화학식 2A 중 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 탄소(C) 또는 질소(N)이고, 상기 화학식 2B 중 Y<sub>3</sub> 및 Y<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 C 또는 N일 수 있다.
- [0051] 예를 들어, 상기 화학식 2A 중 Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>4</sub>는 C일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0052] 상기 화학식 2A 및 2B 중 CY<sub>1</sub> 및 CY<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고, CY<sub>2</sub> 및 CY<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>시클릭 그룹 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고, CY<sub>1</sub>과 CY<sub>2</sub>는 선택적으로 (optionally), 제1연결기(a first linking group)를 통하여, 추가로, 서로 결합되고, CY<sub>3</sub> 및 CY<sub>4</sub>는 선택적으로, 제2연결기를 통하여, 추가로, 서로 결합될 수 있다. 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>시클릭 그룹 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹은 "모노시클릭 그룹" 또는 "폴리시클릭 그룹"일 수 있다.
- [0053] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 CY<sub>1</sub> 및 CY<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 트리아졸, 이미다졸 및 피라졸 중에서 선택되고, CY<sub>2</sub> 및 CY<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 카바졸, 디벤조퓨란 및 디벤조티오펜 중에서 선택될 수 있다.
- [0054] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 CY<sub>1</sub> 및 CY<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 트리아졸, 이미다졸 및 피라졸 중에서 선택되고, CY<sub>2</sub> 및 CY<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 카바졸, 디벤조퓨란 및 디벤조티오펜 중에서 선택될 수 있다.
- [0055] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 CY<sub>1</sub> 및 CY<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 피리딘, 피리미딘, 피라진 및 트리아진 중에서 선택되고, CY<sub>2</sub> 및 CY<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 카바졸, 디벤조퓨란 및 디벤조티오펜 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0056] 상기 화학식 2A 중 CY<sub>1</sub>과 CY<sub>2</sub>는, 선택적으로, 제1연결기를 통하여, 추가로, 서로 결합되어 있고, 상기 화학식 2B 중 CY<sub>3</sub>와 CY<sub>4</sub>는, 선택적으로, 제2연결기를 통하여, 추가로, 서로 결합될 수 있다. 상기 제1연결기 및 제2연결기는 서로 독립적으로, 하기 화학식 6으로 표시되는 연결기 중에서 선택될 수 있다:
- [0057] <화학식 6>
- [0058] \*-(Z<sub>31</sub>)<sub>b10</sub>-\*
- [0059] 상기 화학식 6 중 Z<sub>31</sub>은, \*-O-\*, \*-S-\*, \*-N(Q<sub>41</sub>)-\*, \*-C(Q<sub>42</sub>)(Q<sub>43</sub>)-\*, \*-C(Q<sub>44</sub>)=C(Q<sub>45</sub>)-\* 및
 



중에서 선택되고;
- [0060] Q<sub>41</sub> 내지 Q<sub>49</sub>는 서로 독립적으로,
- [0061] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0062] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기,

카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기; 및

[0063] 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되고;

[0064] b10은 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고, b10이 2 이상일 경우, 복수의 Z<sub>31</sub>은 서로 동일하거나 상이하다.

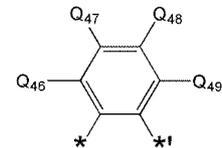
[0065] 예를 들어, 상기 화학식 6 중, 상기 Q<sub>41</sub> 내지 Q<sub>49</sub>는 서로 독립적으로,

[0066] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0067] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기; 및

[0068] 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0069] 예를 들어, 상기 화학식 2A 중 CY<sub>1</sub>과 CY<sub>2</sub>는 선택적으로, 제1연결기(a first linking group)를 통하여, 추가로, 서로 결합되고, 및/또는 상기 화학식 2B 중 CY<sub>3</sub>와 CY<sub>4</sub>는 선택적으로, 제2연결기를 통하여, 추가로, 서로 결합되



어 있고, 상기 제1연결기 및 상기 제2연결기는 서로 독립적으로, \*-C(Q<sub>44</sub>)=C(Q<sub>45</sub>)-\* 또는  $\text{C}(\text{Q}_{44})-\text{C}(\text{Q}_{45})$  로 표시되고(즉, 화학식 6 중 b10 = 1), 상기 Q<sub>44</sub> 내지 Q<sub>49</sub>는 서로 독립적으로, 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0070] 상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF<sub>5</sub>, 히드록실기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>), -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>) 중에서 선택될 수 있다.

[0071] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로,

[0072] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF<sub>5</sub>, 히드록실기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0073] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0074] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기,

C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹;

- [0075] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹; 및
- [0076] -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>), -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>); 중에서 선택되고,
- [0077] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>9</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0078] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로,
- [0079] 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, -SF<sub>5</sub>, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0080] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0081] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;
- [0082] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보

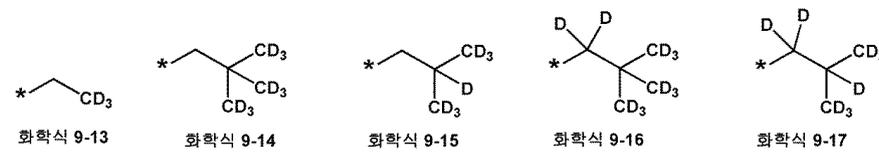
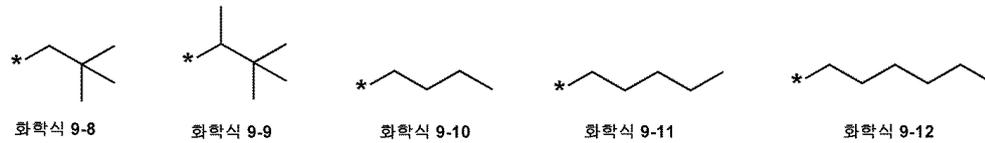
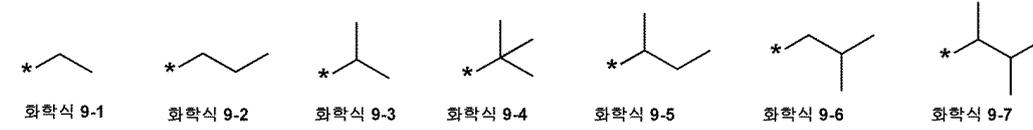
나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

- [0083] -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>); 중에서 선택되고,
- [0084] Q<sub>6</sub> 내지 Q<sub>9</sub>는 서로 독립적으로,
- [0085] -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDCH<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 및 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;
- [0086] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및
- [0087] 중수소, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 페닐기 중 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0088] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로,
- [0089] 수소, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF<sub>5</sub>, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기;
- [0090] 중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및
- [0091] -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>); 중에서 선택되고,
- [0092] Q<sub>6</sub> 내지 Q<sub>9</sub>는 서로 독립적으로,
- [0093] -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDCH<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 및 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;
- [0094] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및
- [0095] 중수소, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 페닐기 중 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기,

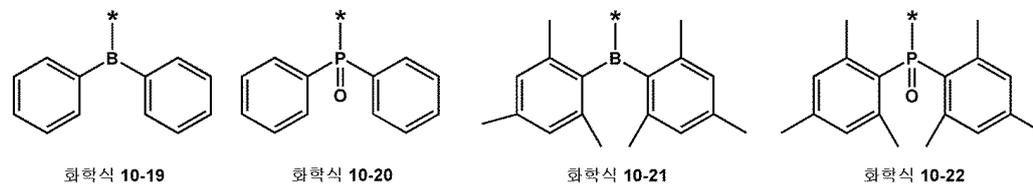
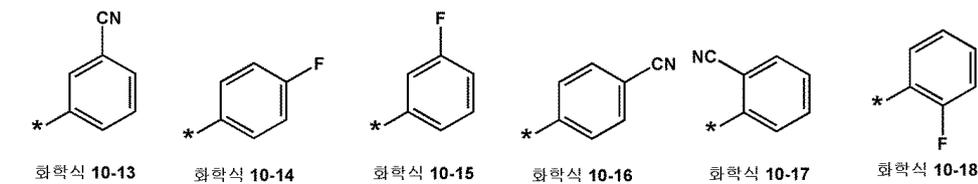
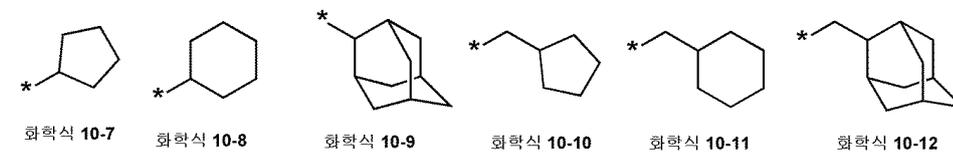
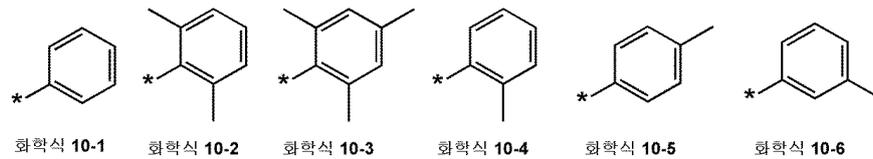
sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 중에서 선택될 수 있다.

[0096]

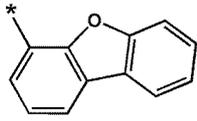
또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF<sub>5</sub>, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 하기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-32로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



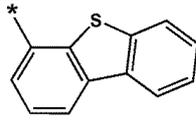
[0097]



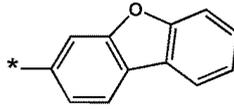
[0098]



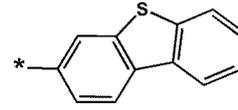
화학식 10-23



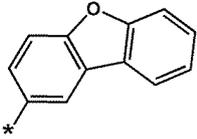
화학식 10-24



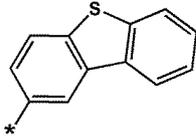
화학식 10-25



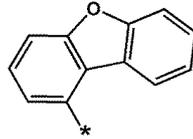
화학식 10-26



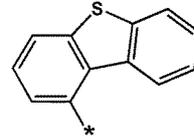
화학식 10-27



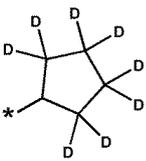
화학식 10-28



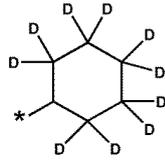
화학식 10-29



화학식 10-30



화학식 10-31



화학식 10-32

[0099]

[0100]

상기 화학식 2A 및 2B 중 a1 내지 a4는 서로 독립적으로, 0 내지 4의 정수 중에서 선택될 수 있다. a1이 2 이상일 경우 2 이상의 Z<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, a2가 2 이상일 경우 2 이상의 Z<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하고, a3가 2 이상일 경우 2 이상의 Z<sub>3</sub>는 서로 동일하거나 상이하고, a4가 2 이상일 경우 2 이상의 Z<sub>4</sub>는 서로 동일하거나 상이하다.

[0102]

상기 화학식 2B 중 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 서로 독립적으로, 상기 화학식 2C로 표시되는 그룹이고, b1 및 b2는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b1과 b2의 합은 1 이상이다. 즉, 상기 화학식 2B로 표시되는 리간드는 적어도 하나의 화학식 2C로 표시되는 그룹을 치환기로서 반드시 포함한다.

[0103]

예를 들어, 상기 화학식 2B 중 b1은 1 또는 2이고, b2는 0일 수 있다.

[0104]

또 다른 예로서, 상기 화학식 2B 중 b1은 1이고, b2는 1일 수 있다.

[0105]

또 다른 예로서, 상기 화학식 2B 중 b1은 1이고, b2는 0일 수 있다.

[0106]

상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0107]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로,

[0108]

C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0109]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0110]

C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기,

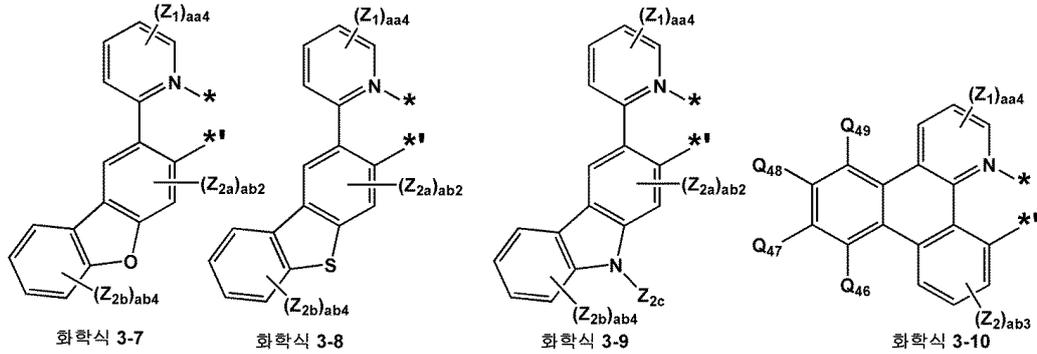
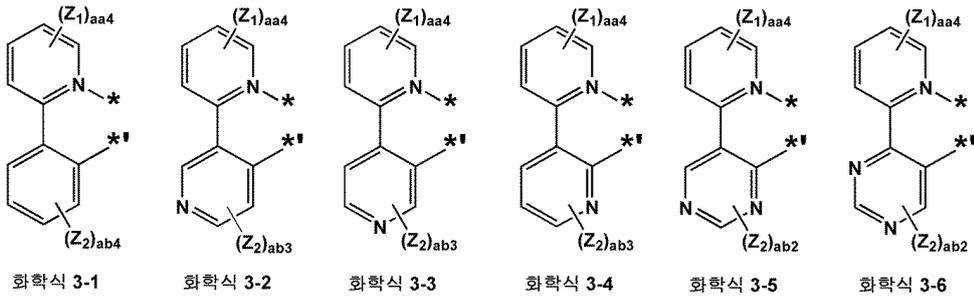
C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹; 및

- [0111] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헥테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub>헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹; 중에서 선택될 수 있다.
- [0112] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로,
- [0113] C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0114] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;
- [0115] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및
- [0116] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 중에서 선택될 수 있다.

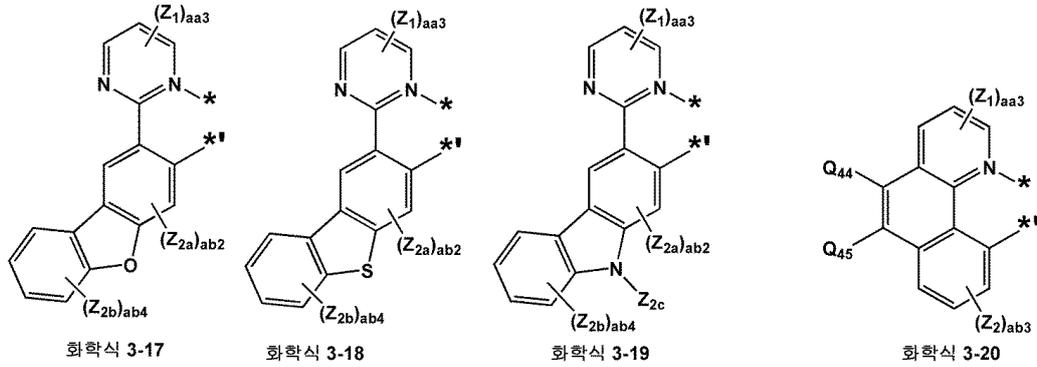
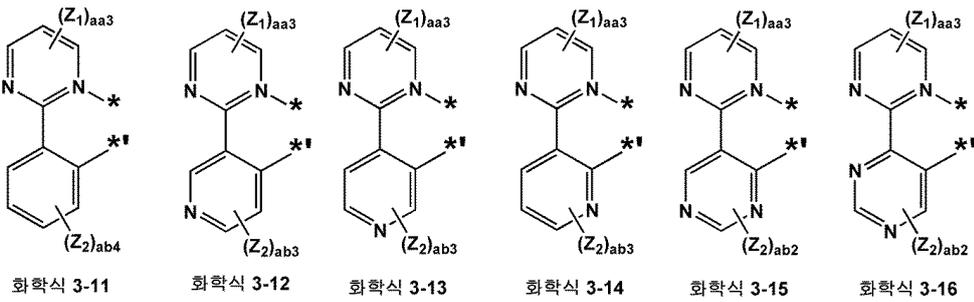
- [0117] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로,
- [0118] 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및
- [0119] 중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0120] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 상기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 10-1 내지 10-18로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0121] 예를 들어, 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 동일할 수 있다.
- [0122] 또 다른 예로서, 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 동일하고, R<sub>3</sub>는 R<sub>1</sub>과 상이하거나, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>가 모두 서로 상이할 수 있다.
- [0123] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 모두 메틸기, 에틸기 또는 -CD<sub>3</sub>일 수 있다.
- [0124] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2C 중 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 메틸기이고, R<sub>3</sub>는 페닐기일 수 있다.
- [0125] 상기 화학식 2B 중 b<sub>1</sub>이 1 이상일 경우, 화학식 2C의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는, 선택적으로, 이웃한 Z<sub>3</sub>와 서로 결합하여 탄소수 2 내지 10의 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다 (예를 들어, 하기 화학식 2B(4) 내지 2B(10) 참조).
- [0126] 상기 b<sub>2</sub>가 1 이상일 경우, 화학식 2C의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 중 적어도 하나는, 선택적으로, 이웃한 Z<sub>4</sub>와 서로 결합하여 탄소수 2 내지 10의 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0127]

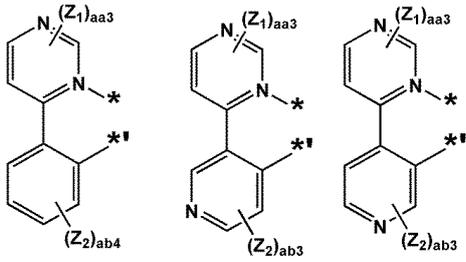
일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>은 하기 화학식 3-1 내지 3-110 중에서 선택될 수 있다:



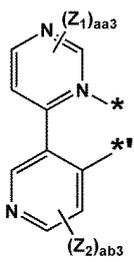
[0128]



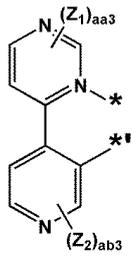
[0129]



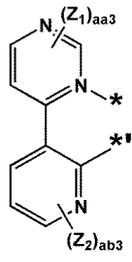
화학식 3-21



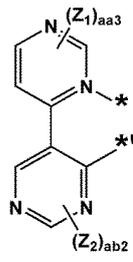
화학식 3-22



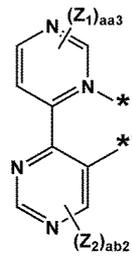
화학식 3-23



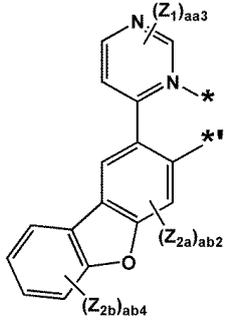
화학식 3-24



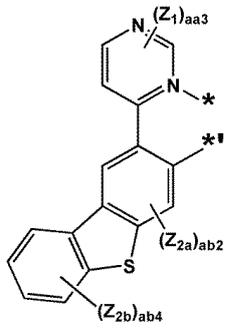
화학식 3-25



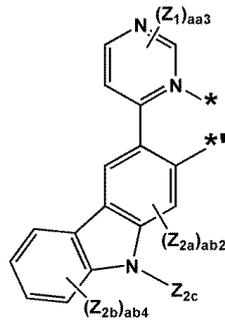
화학식 3-26



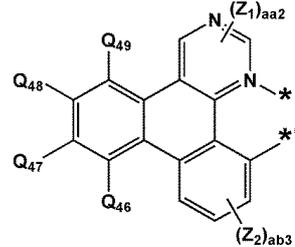
화학식 3-27



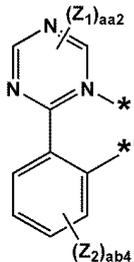
화학식 3-28



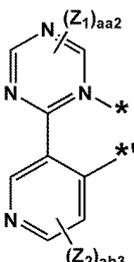
화학식 3-29



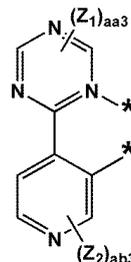
화학식 3-30



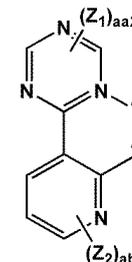
화학식 3-31



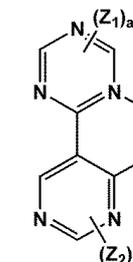
화학식 3-32



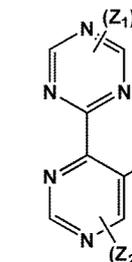
화학식 3-33



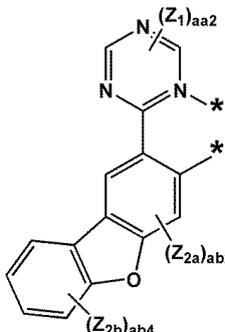
화학식 3-34



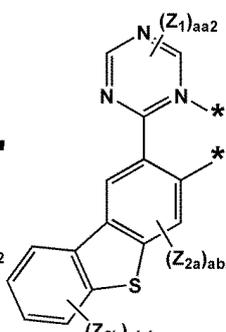
화학식 3-35



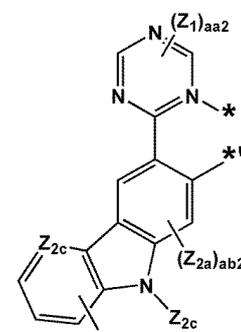
화학식 3-36



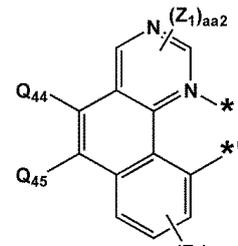
화학식 3-37



화학식 3-38



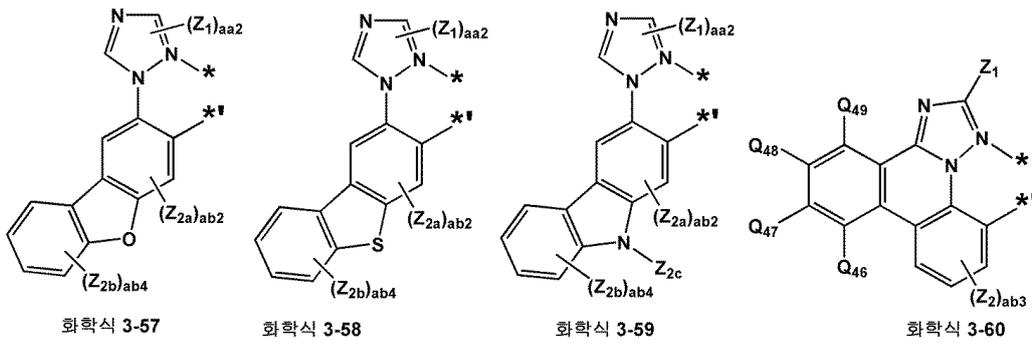
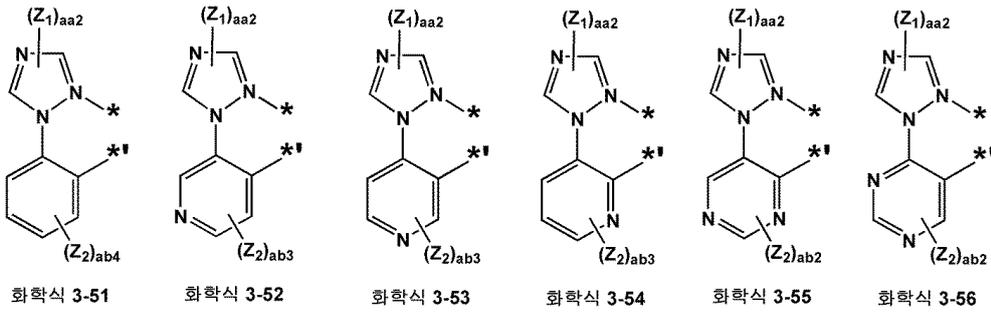
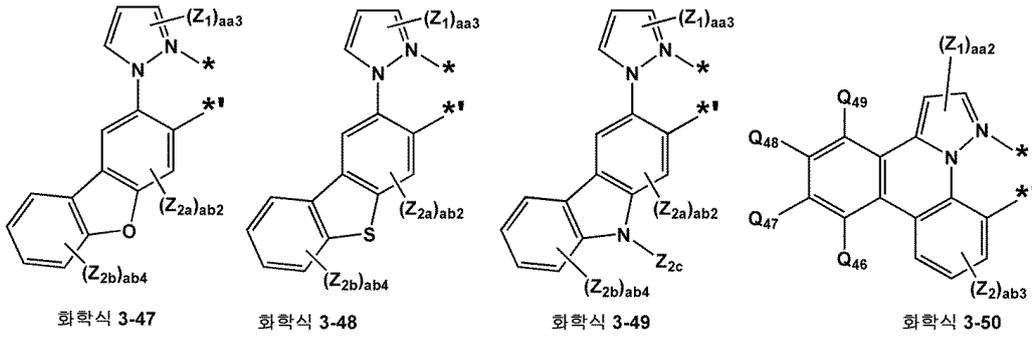
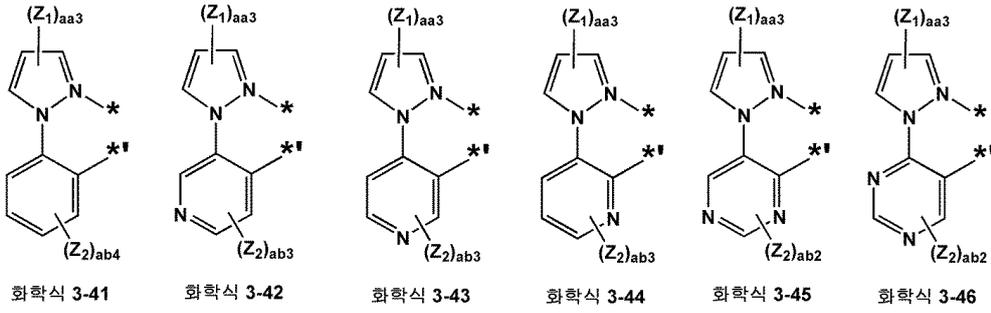
화학식 3-39



화학식 3-40

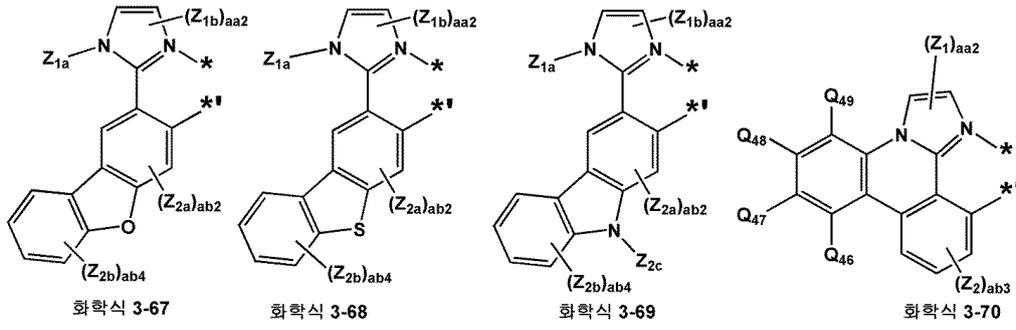
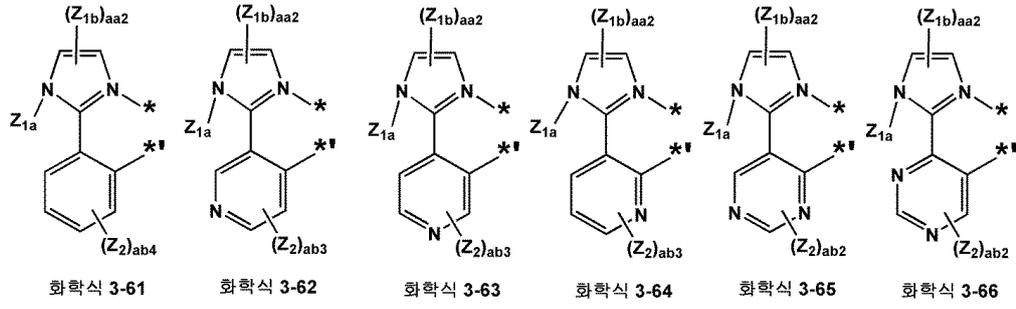
[0130]

[0131]

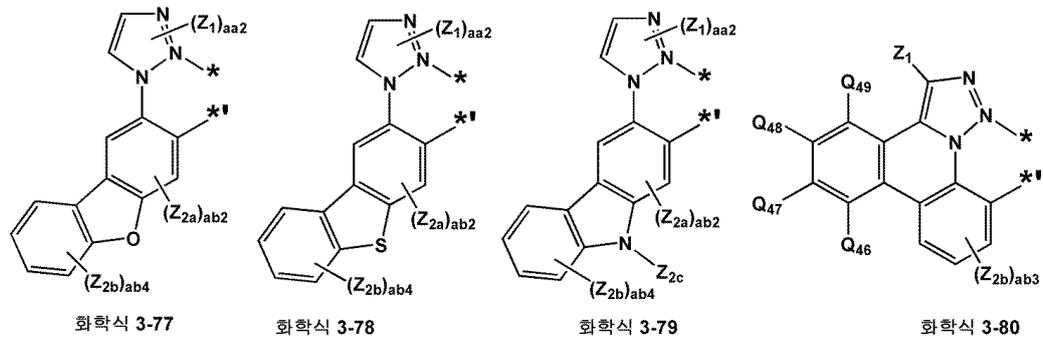
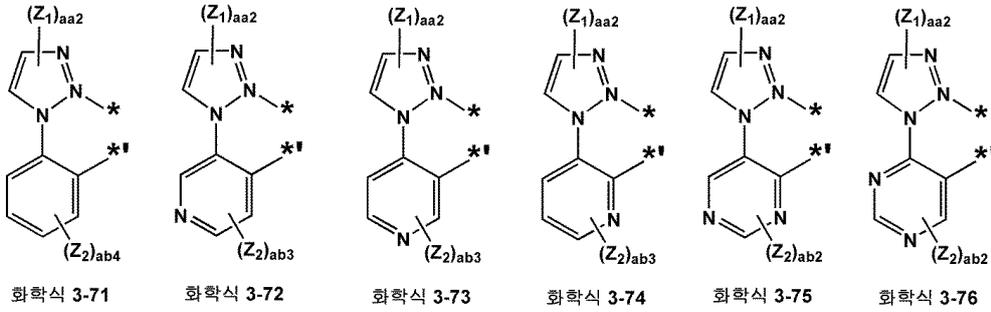


[0132]

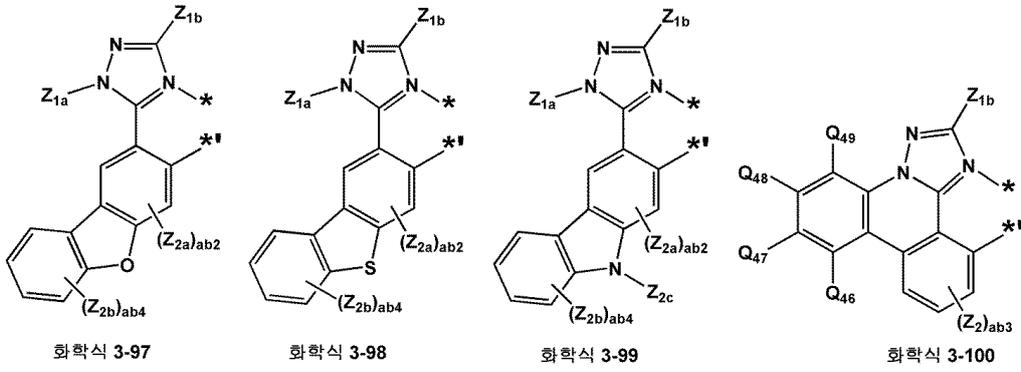
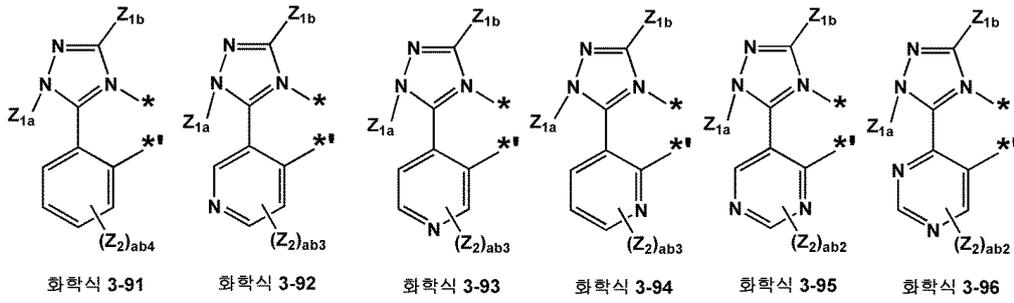
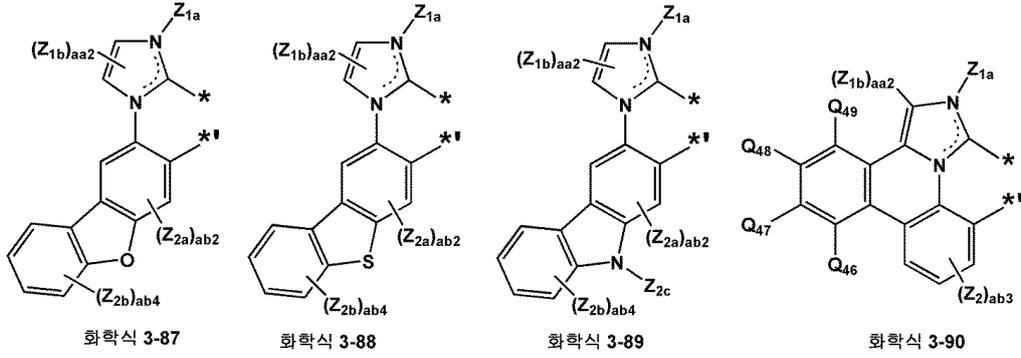
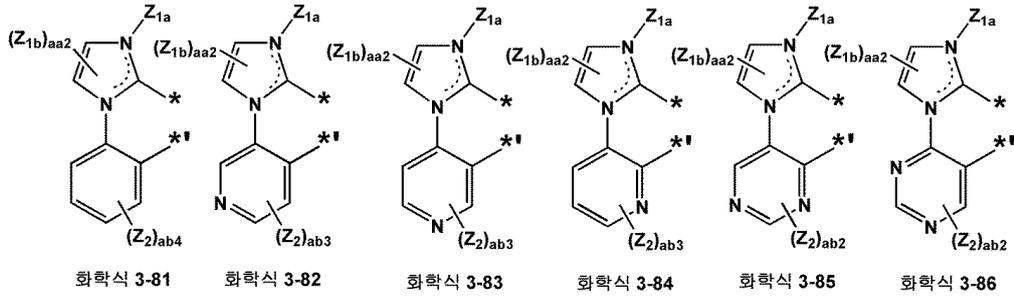
[0133]



[0134]

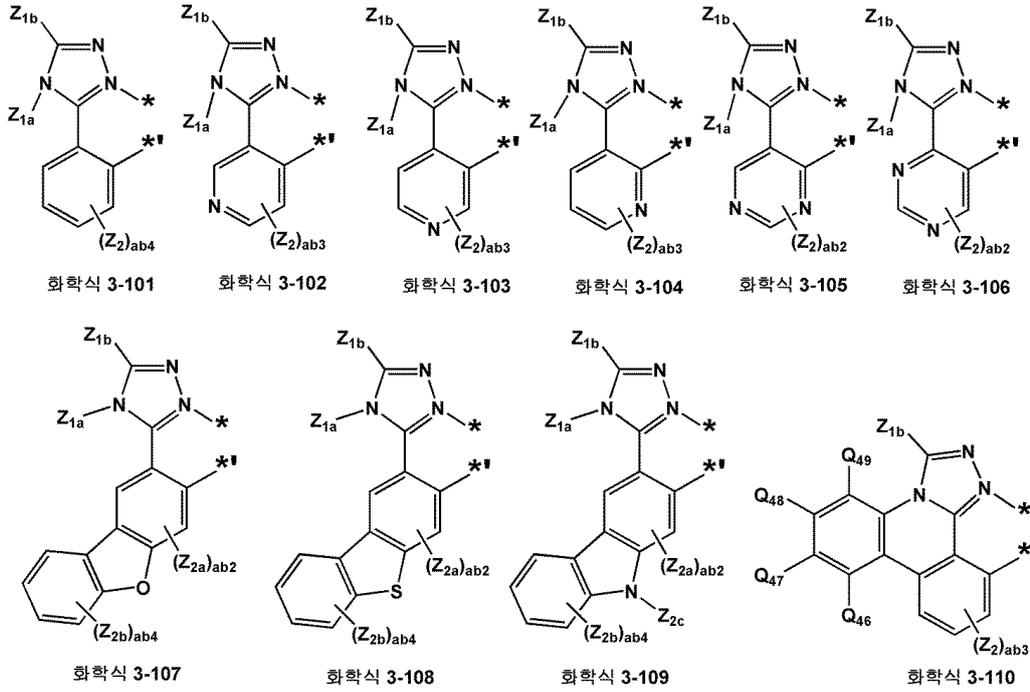


[0135]



[0136]

[0137]



[0138]

[0139] 상기 화학식 3-1 내지 3-110 중, Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,

[0140] Z<sub>1a</sub> 및 Z<sub>1b</sub>에 대한 설명은 서로 독립적으로 Z<sub>1</sub>에 대한 설명과 동일하고,

[0141] Z<sub>2a</sub>, Z<sub>2b</sub> 및 Z<sub>2c</sub>에 대한 설명은 서로 독립적으로, Z<sub>2</sub>에 대한 설명과 동일하고,

[0142] aa2 및 ab2는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고,

[0143] aa3 및 ab3은 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0144] aa4 및 ab4는 서로 독립적으로, 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0145] \* 및 \*'은 M과의 결합 사이트이다.

[0146] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 3-1 내지 3-110 중,

[0147] Z<sub>1</sub>, Z<sub>2</sub>, Z<sub>1a</sub>, Z<sub>1b</sub>, Z<sub>2a</sub>, Z<sub>2b</sub> 및 Z<sub>2c</sub>은 서로 독립적으로,

[0148] 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, -SF<sub>5</sub>, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0149] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0150] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일

기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0151] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기 (adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0152] -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>), -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>); 중에서 선택되고,

[0153] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>9</sub>는 서로 독립적으로,

[0154] -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDCH<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 및 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;

[0155] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

[0156] 중수소 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 중 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 중에서 선택되고,

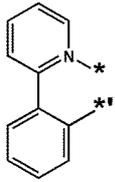
[0157] aa<sub>2</sub> 및 ab<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고,

[0158] aa<sub>3</sub> 및 ab<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

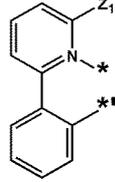
[0159] aa<sub>4</sub> 및 ab<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 1 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0160] \* 및 \*'은 화학식 1 중 M과의 결합 사이트일 수 있다.

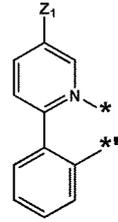
[0161] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>은 하기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(59)로 표시되는 리간드 중에서 선택될 수 있다:



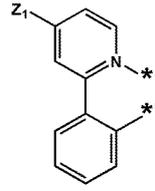
화학식 3-1(1)



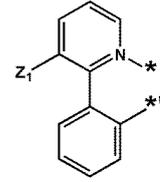
화학식 3-1(2)



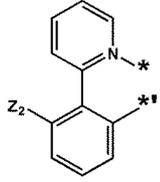
화학식 3-1(3)



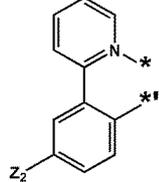
화학식 3-1(4)



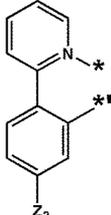
화학식 3-1(5)



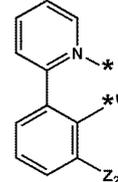
화학식 3-1(6)



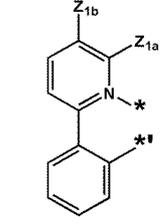
화학식 3-1(7)



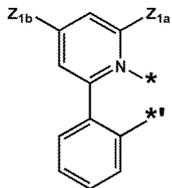
화학식 3-1(8)



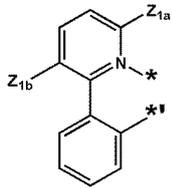
화학식 3-1(9)



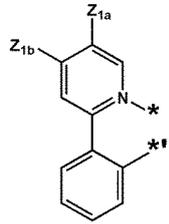
화학식 3-1(10)



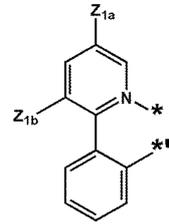
화학식 3-1(11)



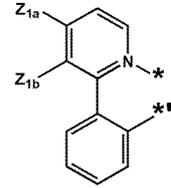
화학식 3-1(12)



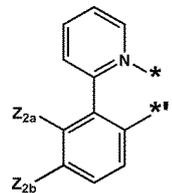
화학식 3-1(13)



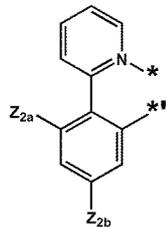
화학식 3-1(14)



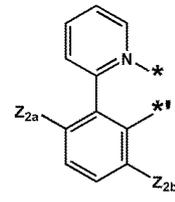
화학식 3-1(15)



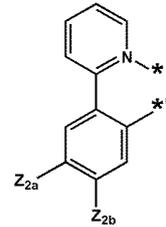
화학식 3-1(16)



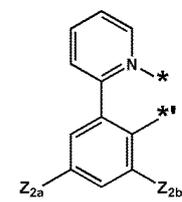
화학식 3-1(17)



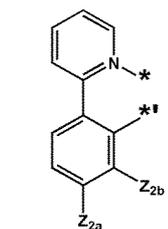
화학식 3-1(18)



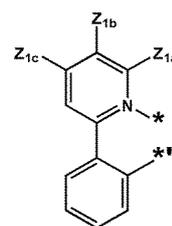
화학식 3-1(19)



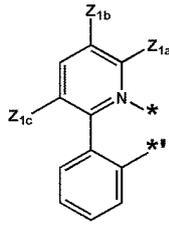
화학식 3-1(20)



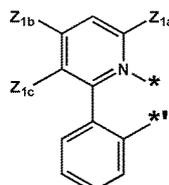
화학식 3-1(21)



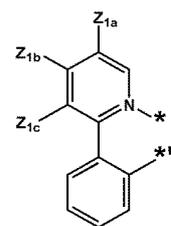
화학식 3-1(22)



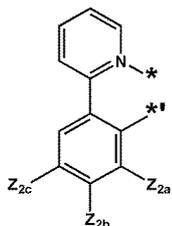
화학식 3-1(23)



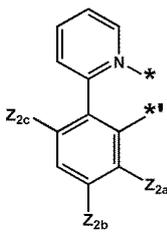
화학식 3-1(24)



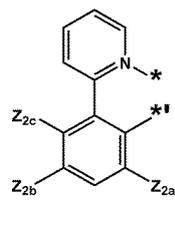
화학식 3-1(25)



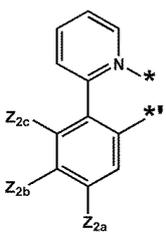
화학식 3-1(26)



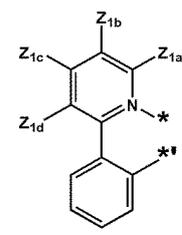
화학식 3-1(27)



화학식 3-1(28)



화학식 3-1(29)

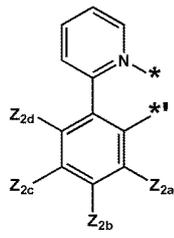


화학식 3-1(30)

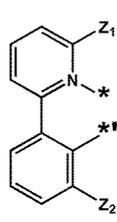
[0162]

[0163]

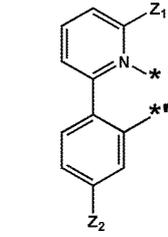
[0164]



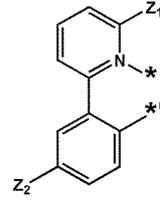
화학식 3-1(31)



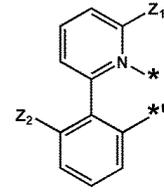
화학식 3-1(32)



화학식 3-1(33)

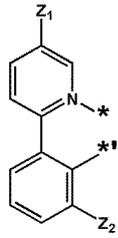


화학식 3-1(34)

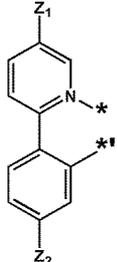


화학식 3-1(35)

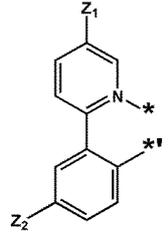
[0165]



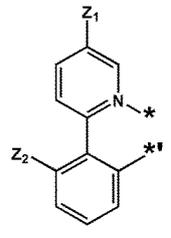
화학식 3-1(36)



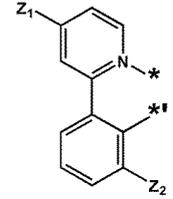
화학식 3-1(37)



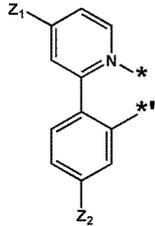
화학식 3-1(38)



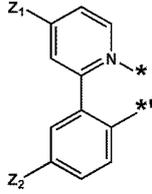
화학식 3-1(39)



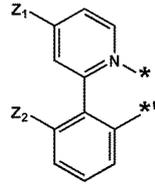
화학식 3-1(40)



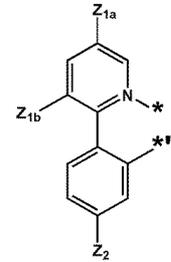
화학식 3-1(41)



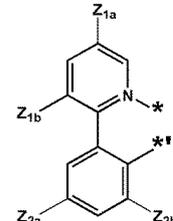
화학식 3-1(42)



화학식 3-1(43)

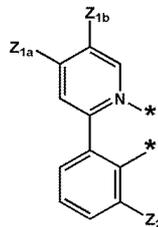


화학식 3-1(44)

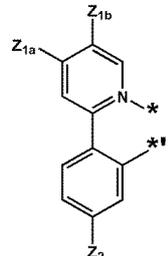


화학식 3-1(45)

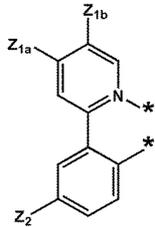
[0166]



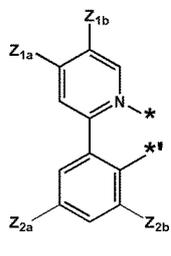
화학식 3-1(46)



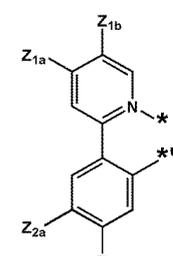
화학식 3-1(47)



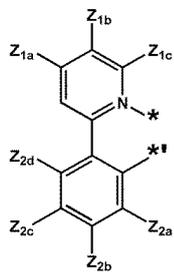
화학식 3-1(48)



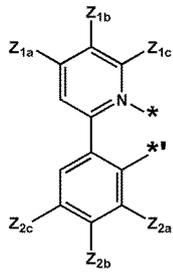
화학식 3-1(49)



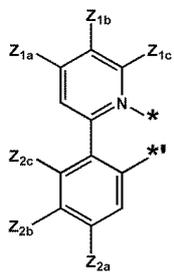
화학식 3-1(50)



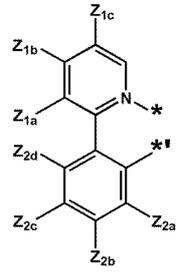
화학식 3-1(51)



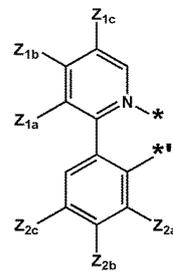
화학식 3-1(52)



화학식 3-1(53)

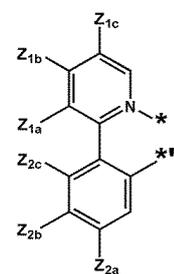


화학식 3-1(54)

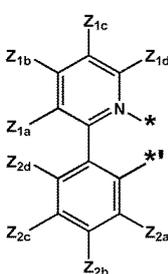


화학식 3-1(55)

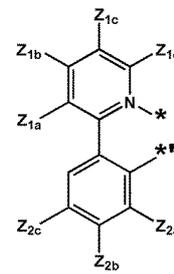
[0167]



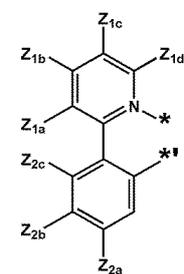
화학식 3-1(56)



화학식 3-1(57)



화학식 3-1(58)



화학식 3-1(59)

[0168] 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(59) 중

[0169]  $Z_1, Z_2, Z_{1a}, Z_{1b}, Z_{1c}, Z_{1d}, Z_{2a}, Z_{2b}, Z_{2c}$  및  $Z_{2d}$ 는 서로 독립적으로, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기,  $-\text{SF}_5$ ,  $-\text{CH}_3$ ,  $-\text{CD}_3$ ,  $-\text{CD}_2\text{H}$ ,  $-\text{CDH}_2$ ,  $-\text{CF}_3$ ,  $-\text{CF}_2\text{H}$ ,  $-\text{CFH}_2$ ,  $-\text{Si}(\text{Q}_3)(\text{Q}_4)(\text{Q}_5)$ , 상기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 10-1 내지 10-32로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

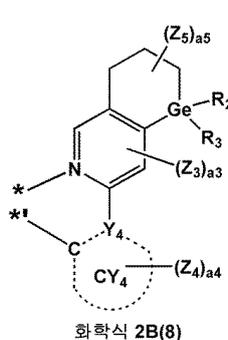
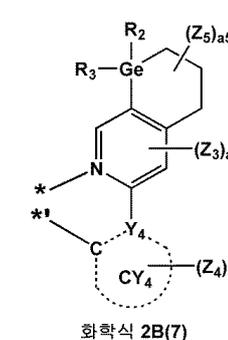
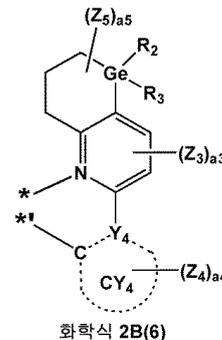
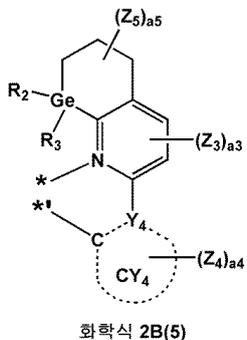
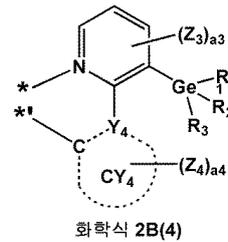
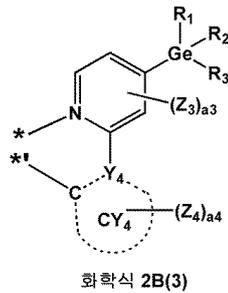
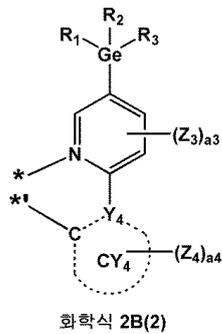
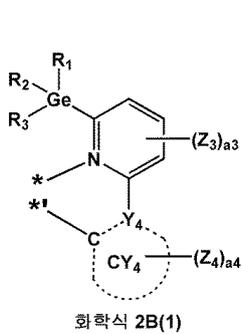
[0170] 상기  $\text{Q}_3$  내지  $\text{Q}_5$ 는 서로 독립적으로,

[0171]  $-\text{CH}_3$ ,  $-\text{CD}_3$ ,  $-\text{CD}_2\text{H}$ ,  $-\text{CDH}_2$ ,  $-\text{CH}_2\text{CH}_3$ ,  $-\text{CH}_2\text{CD}_3$ ,  $-\text{CH}_2\text{CD}_2\text{H}$ ,  $-\text{CH}_2\text{CDH}_2$ ,  $-\text{CHDCH}_3$ ,  $-\text{CHDCD}_2\text{H}$ ,  $-\text{CHDCDH}_2$ ,  $-\text{CHDCD}_3$ ,  $-\text{CD}_2\text{CD}_3$ ,  $-\text{CD}_2\text{CD}_2\text{H}$  및  $-\text{CD}_2\text{CDH}_2$ ;

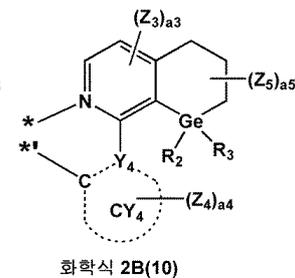
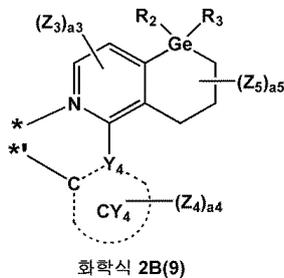
[0172] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

[0173] 중수소 및  $\text{C}_1$ - $\text{C}_{10}$ 알킬기 중 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 중에서 선택될 수 있다.

[0174] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1의  $\text{L}_2$ 는 하기 화학식 2B(1) 내지 2B(10)으로 표시되는 리간드 중에서 선택될 수 있다:



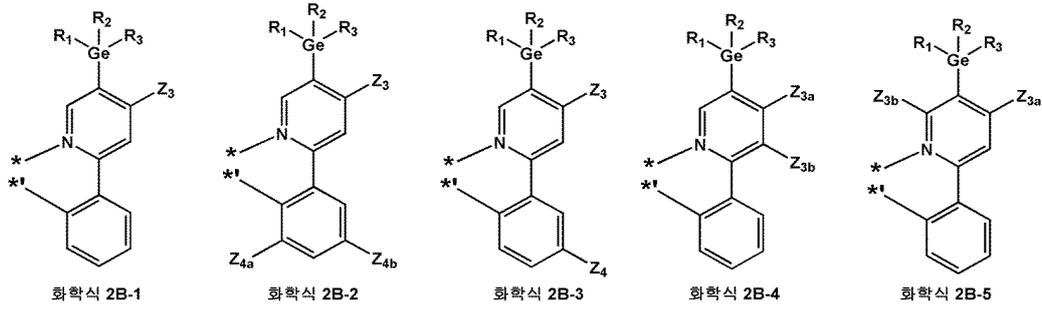
[0175]



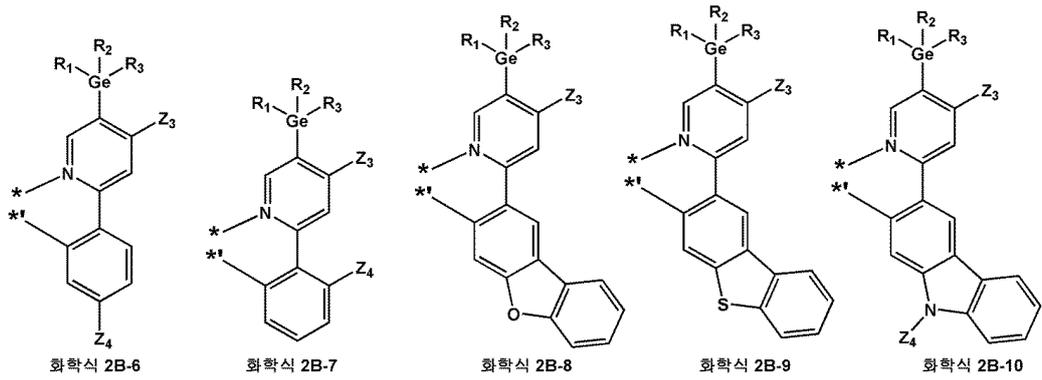
[0176]

[0177] 상기 화학식 2B(1) 내지 2B(10) 중  $Z_3, Z_4, a_3, a_4$  및  $R_1$  내지  $R_3$ 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바와 동일하고,  $\text{CY}_4$ 는 벤젠, 나프탈렌, 카바졸, 디벤조퓨란 및 디벤조티오펜 중에서 선택되고,  $Z_5$ 에 대한 설명은  $Z_3$ 에 대한 설명과 동일하고,  $a_5$ 는 1 내지 6의 정수 중에서 선택된다.

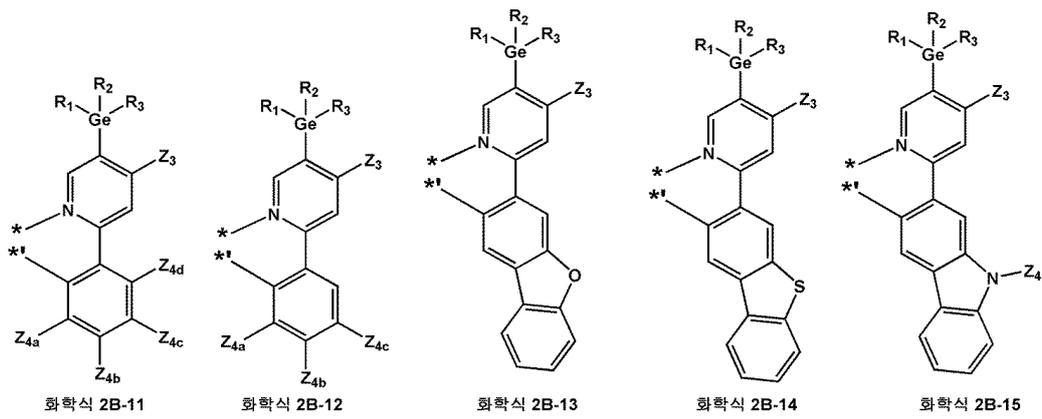
[0178] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1의 L<sub>2</sub>는 하기 화학식 2B-1 내지 2B-60으로 표시되는 리간드 중에서 선택될 수 있다:



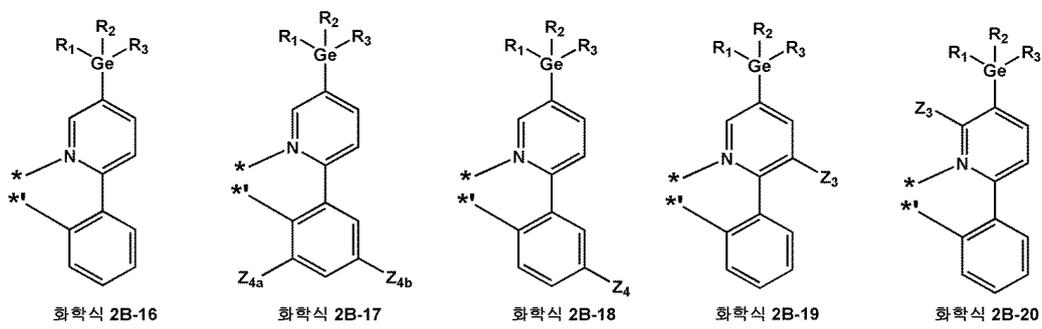
[0179]



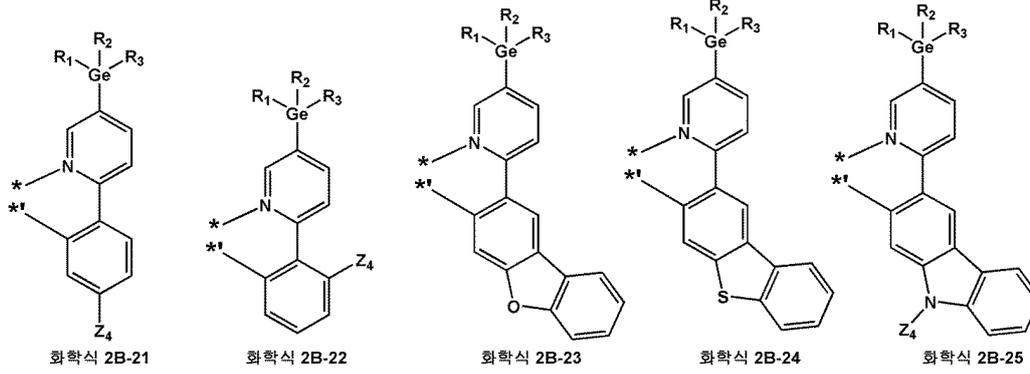
[0180]



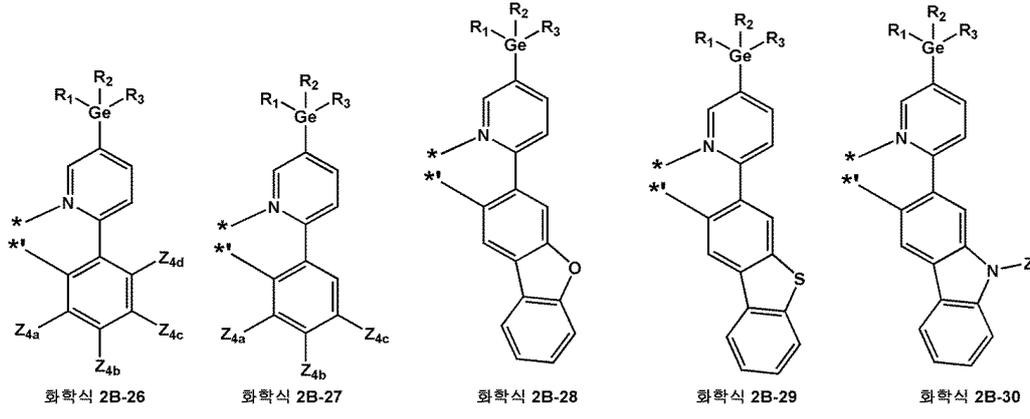
[0181]



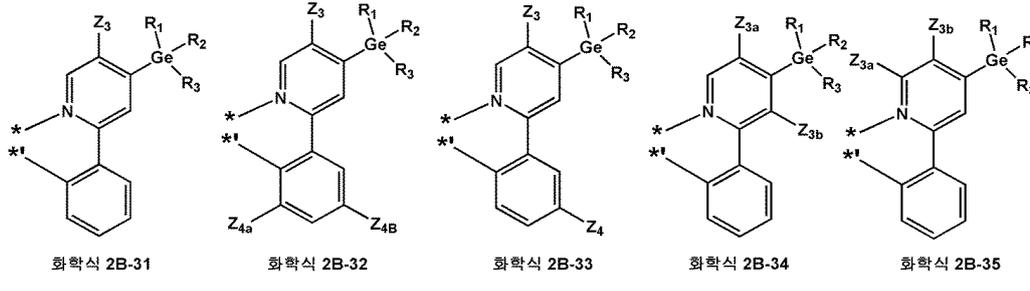
[0182]



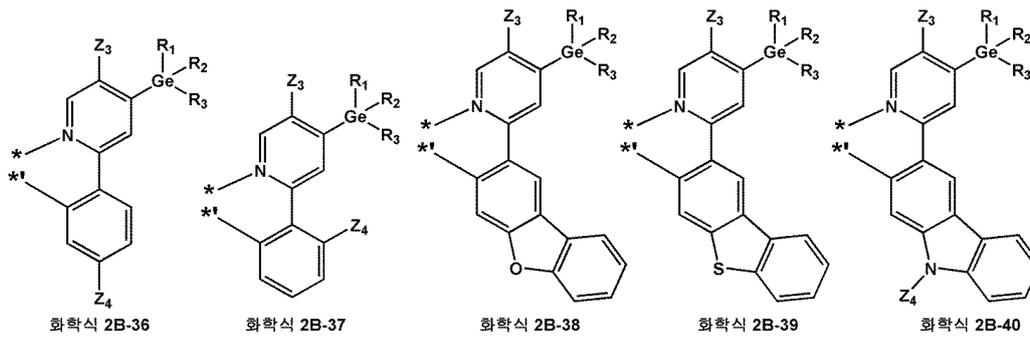
[0183]



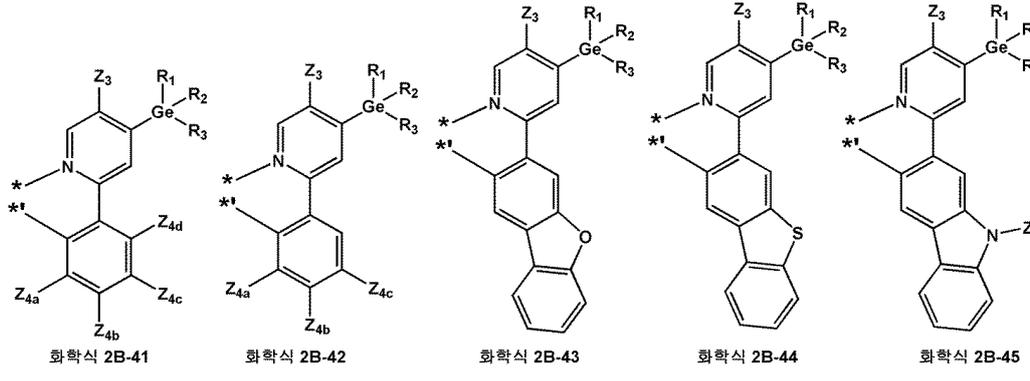
[0184]



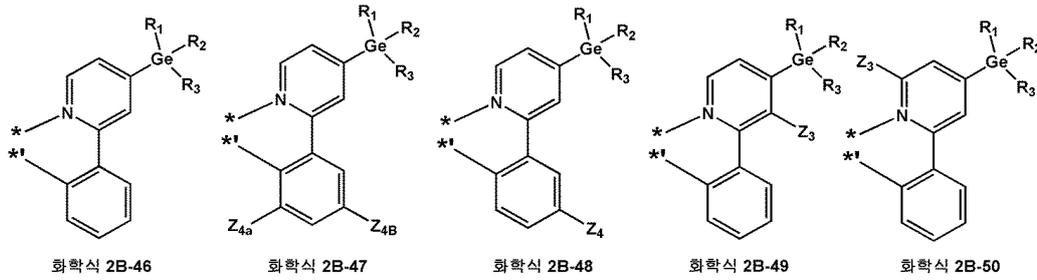
[0185]



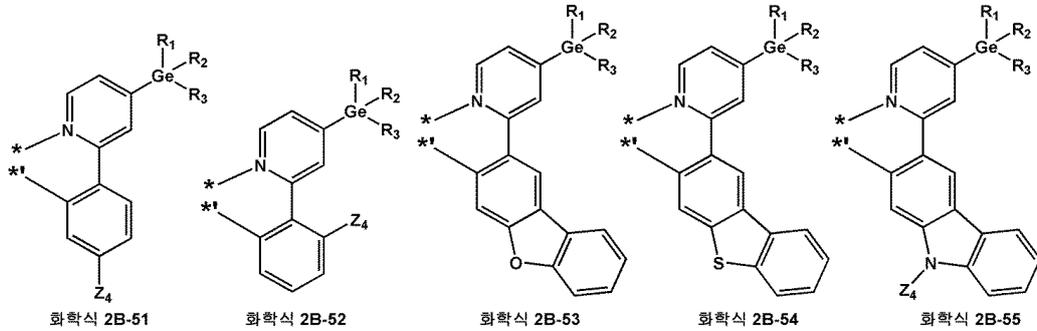
[0186]



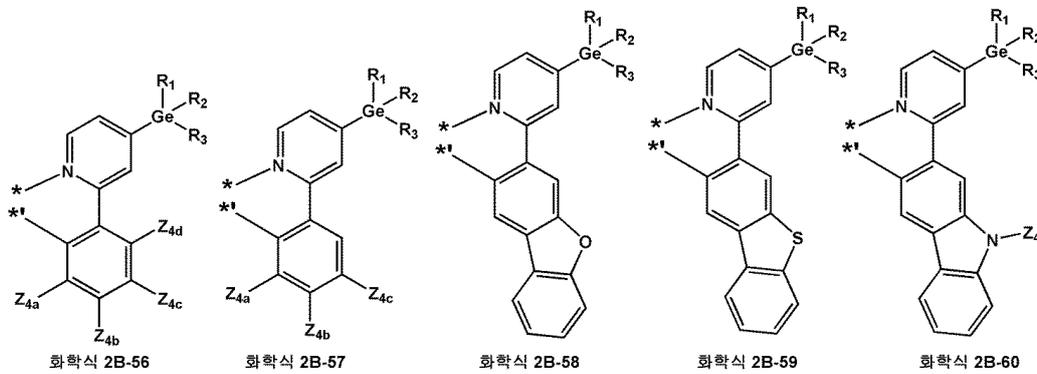
[0187]



[0188]



[0189]



[0190]

[0191] 상기 화학식 2B-1 내지 2B-60 중

[0192] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로,

[0193] 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및

[0194] 중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 중에서 선택되고,

- [0195]  $Z_3, Z_{3a}, Z_{3b}, Z_4, Z_{4a}, Z_{4b}, Z_{4c}$  및  $Z_{4d}$ 는 서로 독립적으로,
- [0196] 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF<sub>5</sub>, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기;
- [0197] 중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기; 및
- [0198] -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>); 중에서 선택되고,
- [0199] Q<sub>6</sub> 내지 Q<sub>9</sub>는 서로 독립적으로,
- [0200] -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDC<sub>2</sub>H<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 및 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;
- [0201] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및
- [0202] 중수소, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 페닐기 중 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0203] 또 다른 예로서, 상기 화학식 2B-1 내지 2B-60 중,
- [0204] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 상기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 상기 화학식 10-1 내지 10-18로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,
- [0205]  $Z_3, Z_{3a}, Z_{3b}, Z_4, Z_{4a}, Z_{4b}, Z_{4c}$  및  $Z_{4d}$ 은 서로 독립적으로, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF<sub>5</sub>, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 하기 화학식 9-1 내지 9-17로 표시되는 그룹 및 하기 화학식 10-1 내지 10-32로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0206] 상기 화학식 1 중 n1 및 n2는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고, n1 + n2는 2 또는 3이다.
- [0207] 예를 들어, M은 Ir이고, n1 + n2 = 3이거나, M은 Pt이고, n1 + n2 = 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0208] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중 n2는 1일 수 있다.
- [0209] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 이온쌍으로 이루어진 염의 형태를 갖지 않고, 중성일 수 있다.
- [0210] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중
- [0211] M은 Ir이고, n1 + n2 = 3이거나, M은 Pt이고, n1 + n2 = 2이고,

[0212] L<sub>1</sub>은 상기 화학식 3-1 및 3-110로 표시되는 리간드(예를 들면, 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(59)로 표시되는 리간드) 중에서 선택되고,

[0213] L<sub>2</sub>는 상기 화학식 2B(1) 내지 2B(10)으로 표시되는 리간드 중에서 선택되고,

[0214] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 중성(neutral)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0215] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중

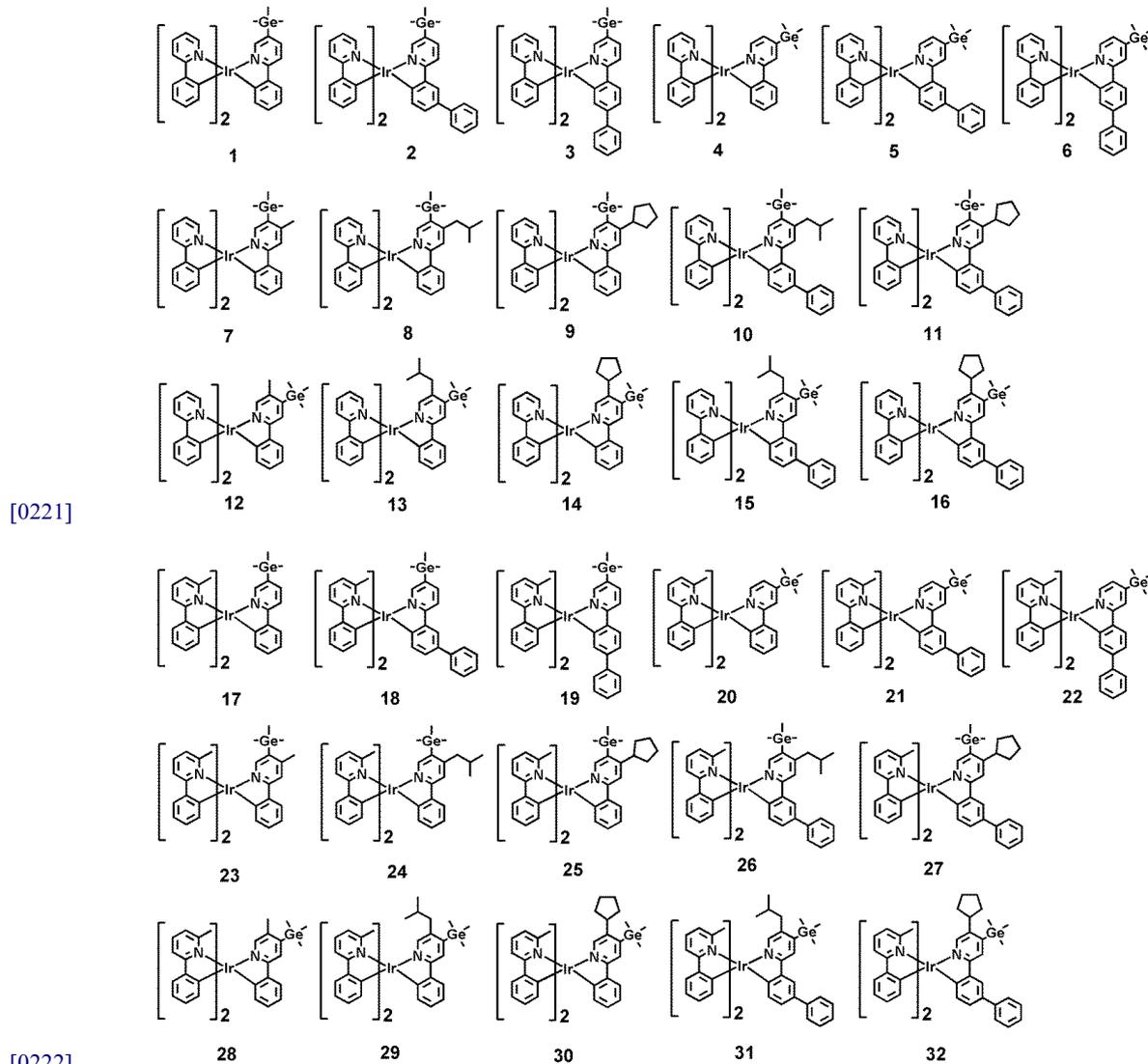
[0216] M은 Ir이고, n1 + n2 = 3이거나, M은 Pt이고, n1 + n2 = 2이고,

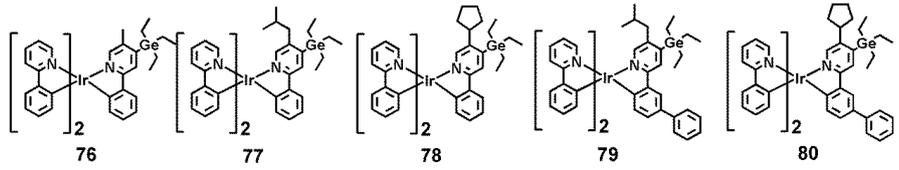
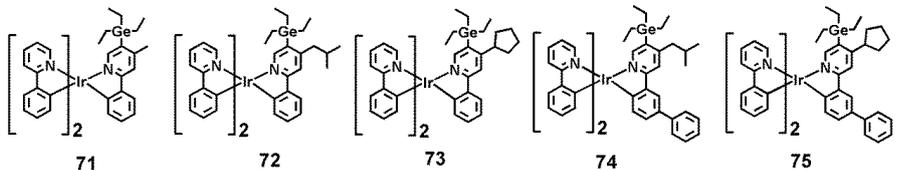
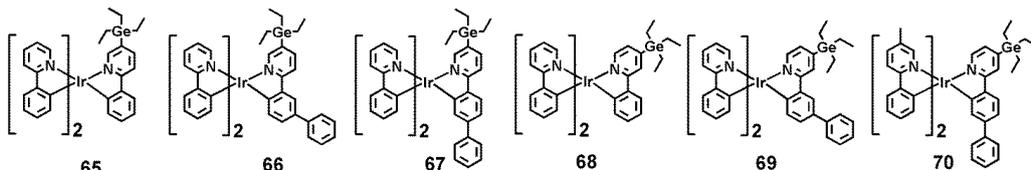
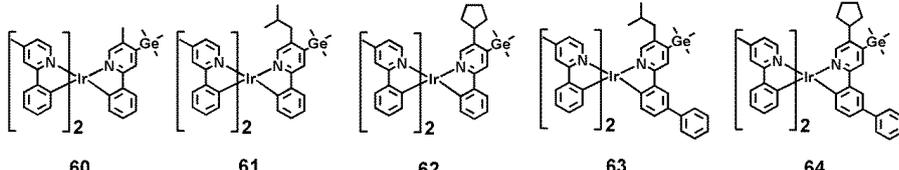
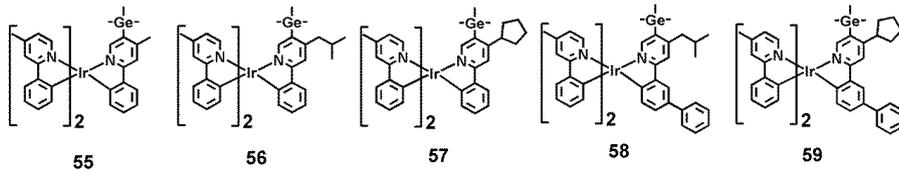
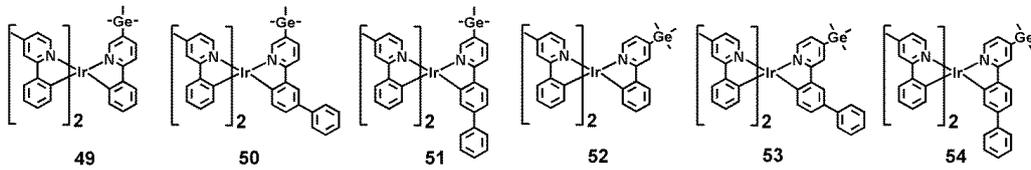
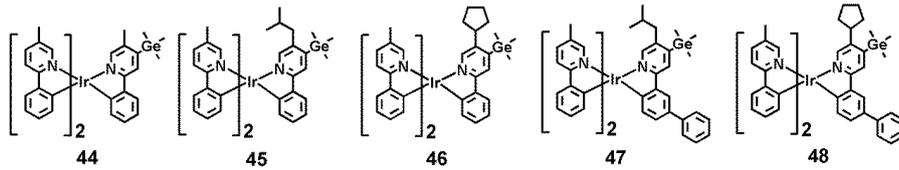
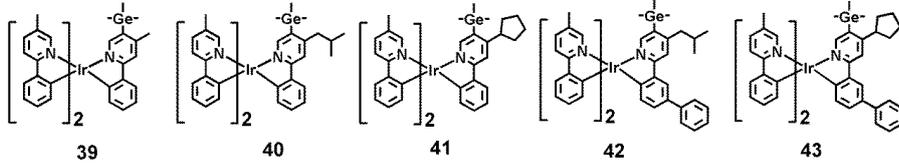
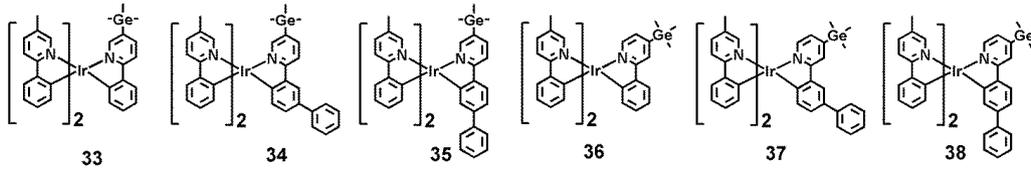
[0217] L<sub>1</sub>은 상기 화학식 3-1 및 3-110로 표시되는 리간드(예를 들면, 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(59)로 표시되는 리간드) 중에서 선택되고,

[0218] L<sub>2</sub>는 상기 화학식 2B-1 내지 2B-60로 표시되는 리간드 중에서 선택되고,

[0219] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 중성(neutral)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0220] 상기 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 109 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

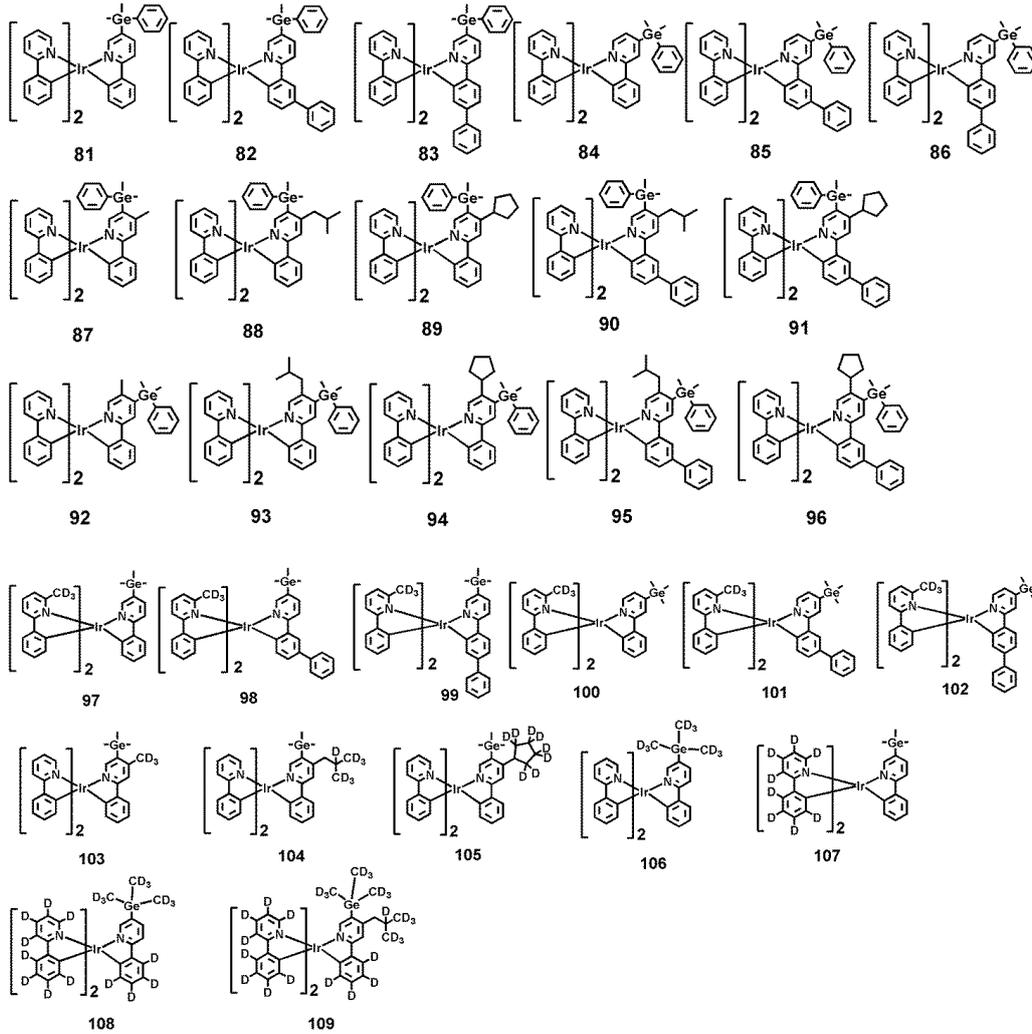




[0223]

[0224]

[0225]



[0226]

[0227]

[0228]

상기 화학식 1 중 n1 및 n2는 1 또는 2이다. 즉, n1은 0이 아니므로, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 상기 화학식 2A로 표시되는 리간드를 반드시 포함한다. 또한, 상기 화학식 2A로 표시되는 리간드는 화학식 1의 금속 M과 탄소 및 질소를 통하여 결합된 N-C 바이덴테이트 리간드(bidentate ligand)이다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 우수한 열안정성을 가질 수 있다.

[0229]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 상기 화학식 2B로 표시되는 리간드를 갖는데, 상기 화학식 2B로 표시되는 리간드는 적어도 하나의 상기 화학식 2C로 표시되는 그룹을 치환기로서 반드시 갖는다. 상기 화학식 2C로 표시되는 그룹은 "Ge"를 포함하는 바, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 채용한 전기 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 고효율을 가질 수 있다.

[0230]

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

표 1

[0231]

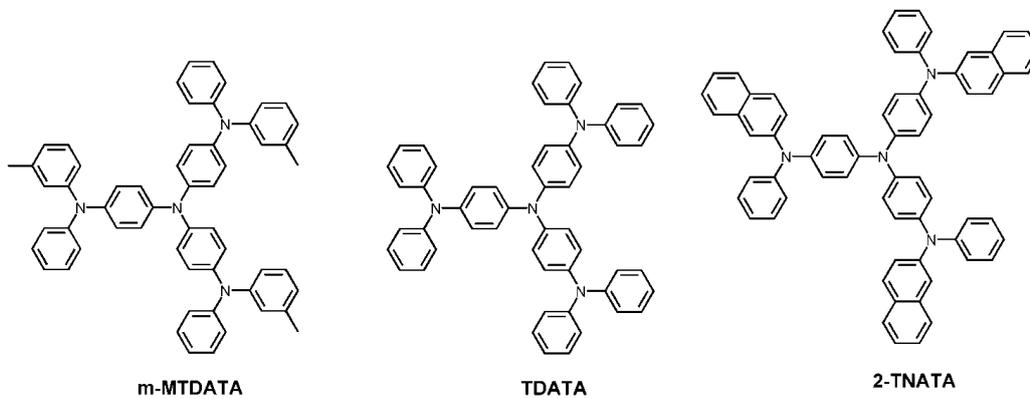
화합물 No.	HOMO(eV)	LUMO(eV)	T <sub>1</sub> 에너지 레벨(eV)
1	-4.822	-1.242	2.567
2	-4.799	-1.160	2.623
3	-4.822	-1.242	2.567
4	-4.760	-1.142	2.644
5	-4.799	-1.160	2.623
6	-4.793	-1.156	2.622

[0232]

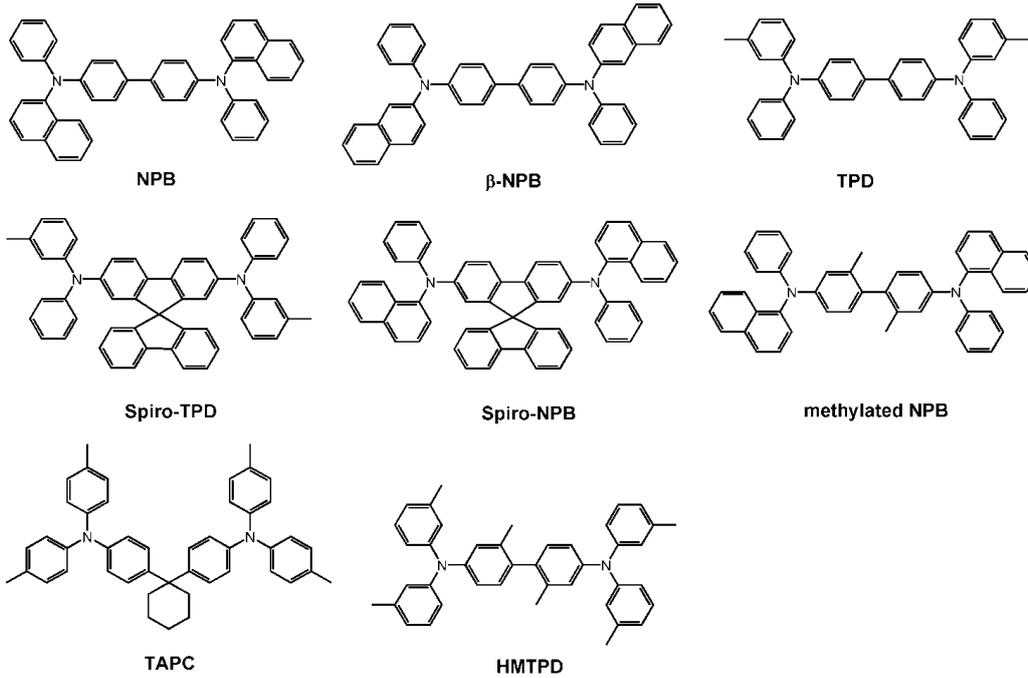
상기 표 1로부터, 상기 화합물은 유기 발광 소자용 재료로 사용하기에 적합함을 확인할 수 있다.

- [0233] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 용이하게 인식할 수 있다.
- [0234] 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.
- [0235] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한 유기층을 구비함으로써, 저구동 전압, 고효율, 고전력, 고양자 효율 및 장수명과 우수한 색순도를 가질 수 있다.
- [0236] 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).
- [0237] 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.
- [0238] 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.
- [0239] 상기 제1전극은 정공 주입 전극인 애노드이고 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드이거나, 상기 제1전극은 전자 주입 전극인 캐소드이고 상기 제2전극은 정공 주입 전극인 애소드이다.
- [0240] 예를 들어, 상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은, i) 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되고, 정공 주입층, 정공 수송층 및 전자 저지층 중 적어도 하나를 포함한 정공 수송 영역; 및 ii) 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한 전자 수송 영역;을 포함할 수 있다.
- [0241] 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.
- [0242] 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.
- [0243] 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.
- [0244] 상기 제1전극(11)은 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 애노드일 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등과 같은 금속을 이용할 수 있다.
- [0245] 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.
- [0246] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.
- [0247] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.

- [0248] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.
- [0249] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층 및 버퍼층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0250] 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.
- [0251] 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.
- [0252] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500°C, 진공도 약 10<sup>-8</sup> 내지 약 10<sup>-3</sup> torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0253] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0254] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.
- [0255] 상기 정공 수송 영역은, 예를 들면, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, methylated-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캄페르술포산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



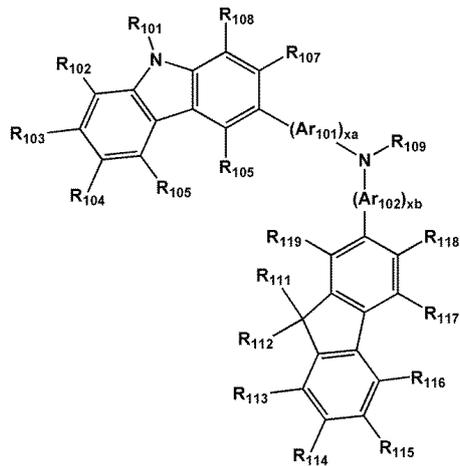
[0256]



[0257]

[0258]

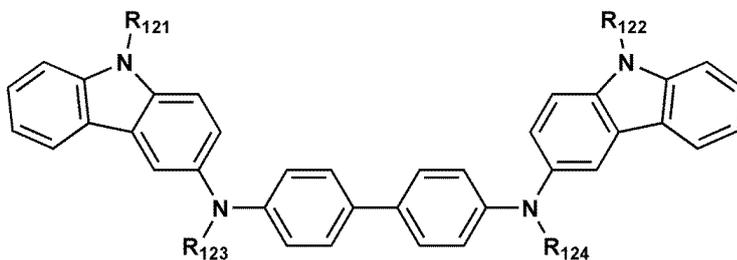
<화학식 201>



[0259]

[0260]

<화학식 202>



[0261]

[0262]

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

[0263]

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

[0264]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐

기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기; 중에서 선택될 수 있다.

[0265] 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.

[0266] 상기 화학식 201 및 202 중, 상기 R<sub>101</sub> 내지 R<sub>108</sub>, R<sub>111</sub> 내지 R<sub>119</sub> 및 R<sub>121</sub> 내지 R<sub>124</sub>는 서로 독립적으로,

[0267] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등) 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기 등);

[0268] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 하나 이상으로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기;

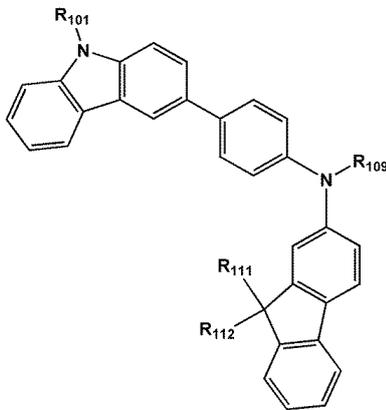
[0269] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 및

[0270] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0271] 상기 화학식 201 중, R<sub>109</sub>는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기; 및 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기; 중에서 선택될 수 있다.

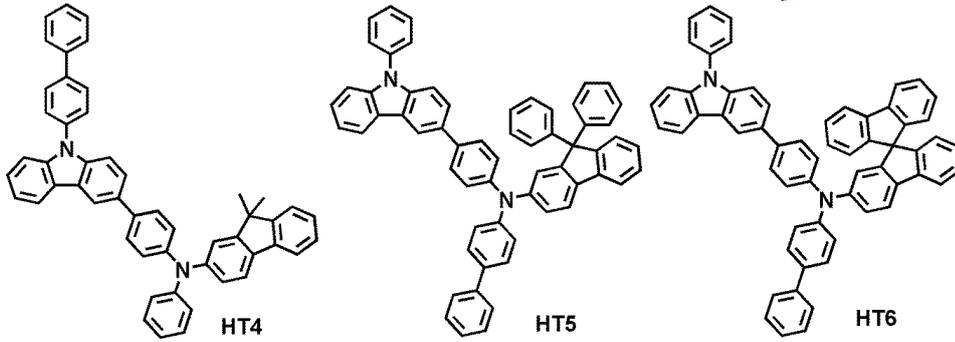
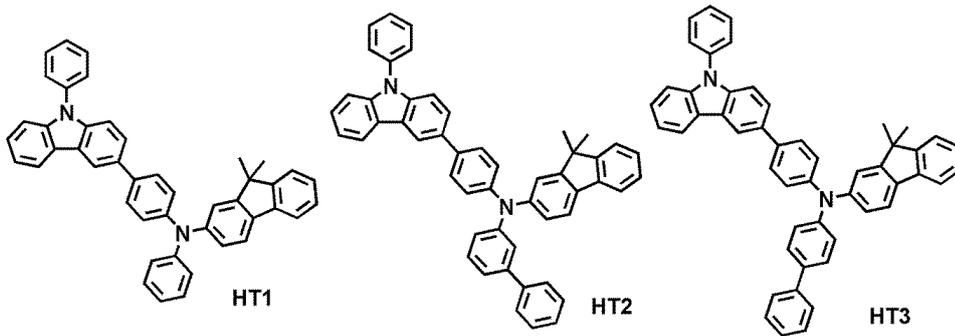
[0272] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0273] <화학식 201A>

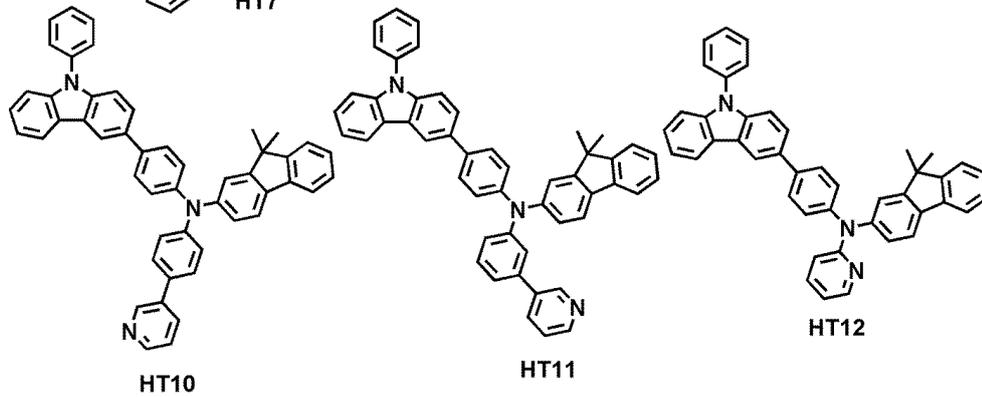
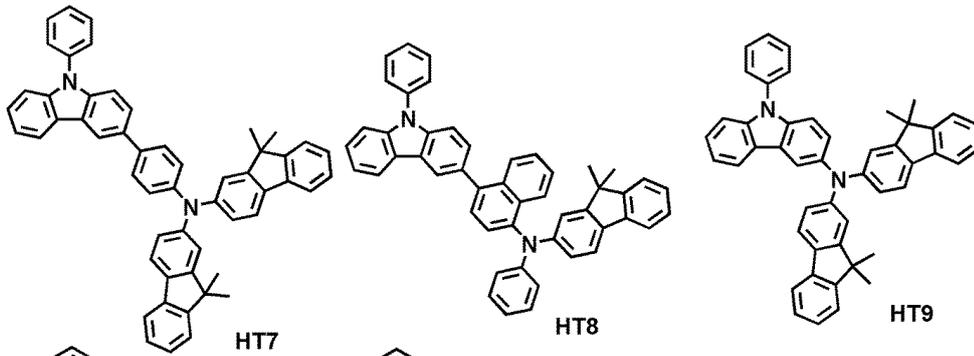


[0274] 상기 화학식 201A 중, R<sub>101</sub>, R<sub>111</sub>, R<sub>112</sub> 및 R<sub>109</sub>에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

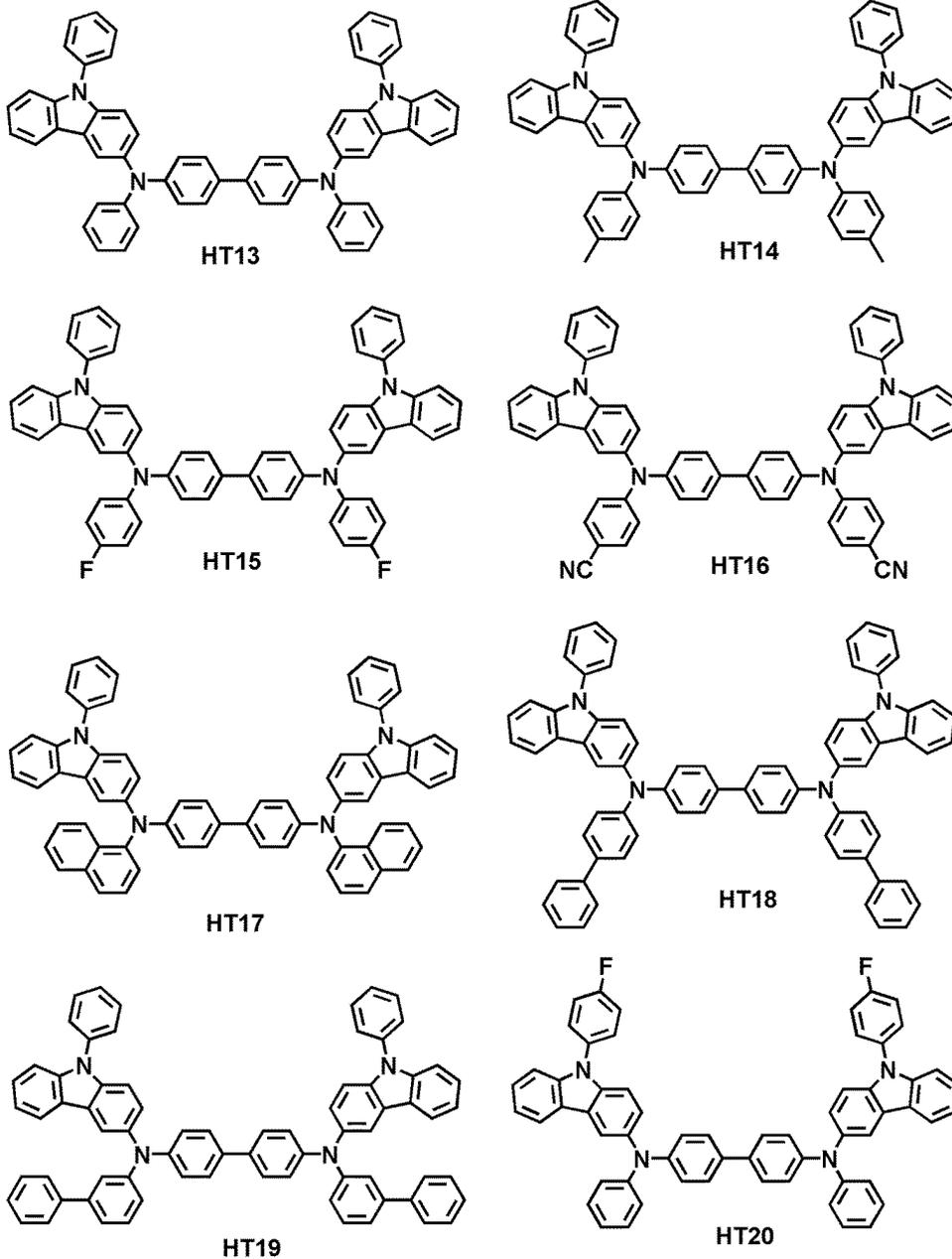
[0276] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0277]



[0278]



[0279]

[0280]

[0281]

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

[0282]

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.

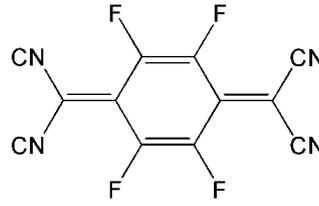
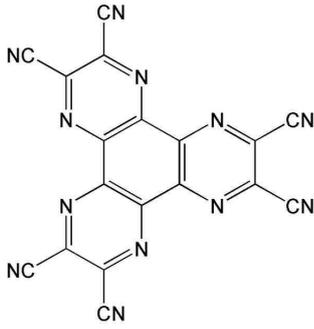
[0283]

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.

[0284]

<화합물 HT-D1>

<F4-TCNQ>



[0285]

[0286]

[0287]

[0288]

[0289]

[0290]

[0291]

[0292]

[0293]

[0294]

[0295]

상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

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

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

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.

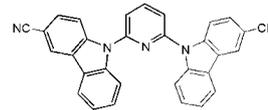
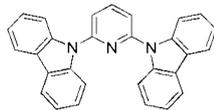
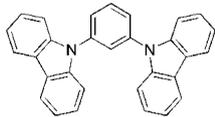
상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한다.

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

<mCP>

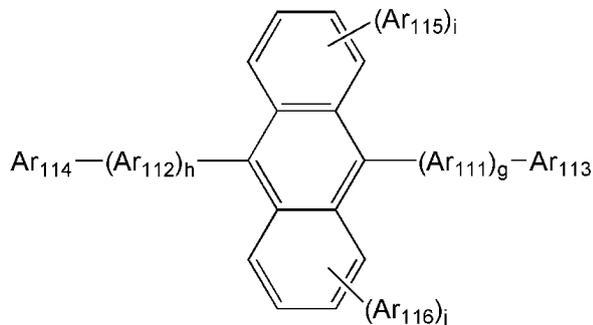
<화합물 H50>

<화합물 H51>



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

<화학식 301>



[0296]

[0297]

[0298]

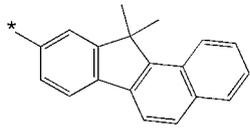
[0299]

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

페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기; 및

페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기; 중에서 선택될 수 있다.

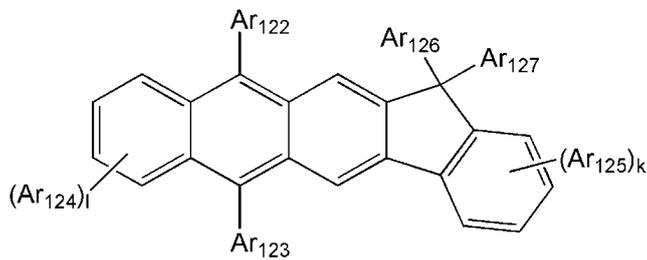
- [0300] 상기 화학식 301 중 상기 Ar<sub>113</sub> 내지 Ar<sub>116</sub>은 서로 독립적으로,
- [0301] C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기; 및
- [0302] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기; 중에서 선택될 수 있다.
- [0303] 상기 화학식 301 중 g, h, i 및 j는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수, 예를 들면, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0304] 상기 화학식 301 중, Ar<sub>113</sub> 내지 Ar<sub>116</sub>은 서로 독립적으로,
- [0305] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기;
- [0306] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기;
- [0307] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기; 및



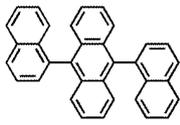
[0308] ; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0309] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 302로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

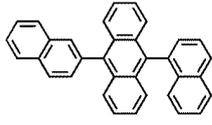
[0310] <화학식 302>



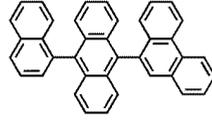
- [0311]
- [0312] 상기 화학식 302 중 Ar<sub>122</sub> 내지 Ar<sub>125</sub>에 대한 상세한 설명은 상기 화학식 301의 Ar<sub>113</sub>에 대한 설명을 참조한다.
- [0313] 상기 화학식 302 중 Ar<sub>126</sub> 및 Ar<sub>127</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기 또는 프로필기)일 수 있다.
- [0314] 상기 화학식 302 중 k 및 l은 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 k 및 l은 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0315] 상기 화학식 301로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 302로 표시되는 화합물은 하기 화합물 H1 내지 H4를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



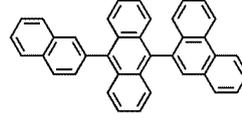
H1



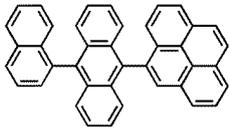
H2



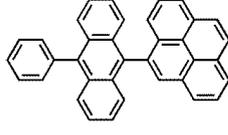
H3



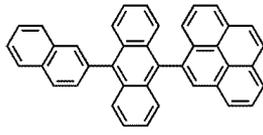
H4



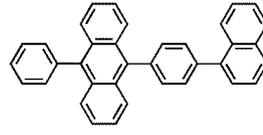
H5



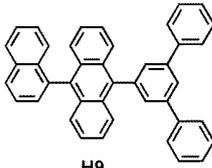
H6



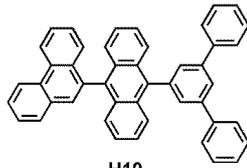
H7



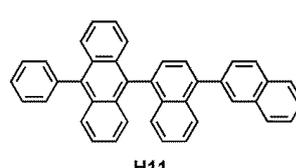
H8



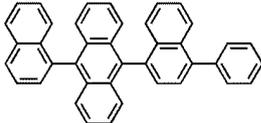
H9



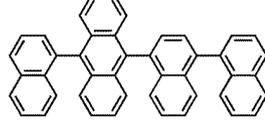
H10



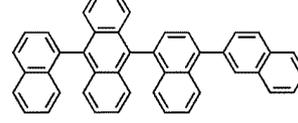
H11



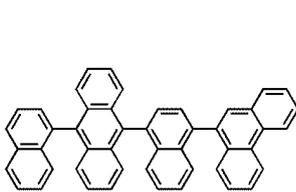
H12



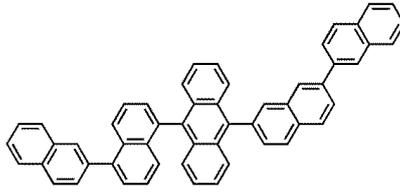
H13



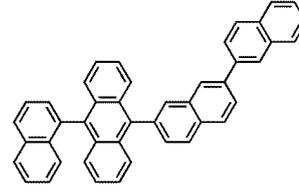
H14



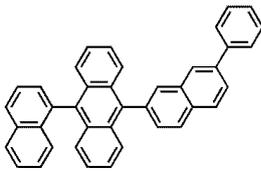
H15



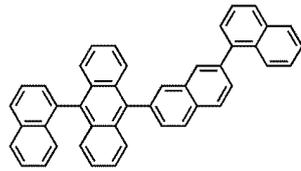
H16



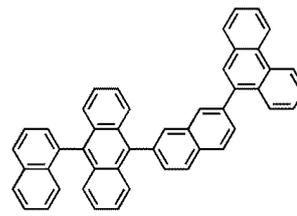
H17



H18



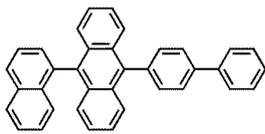
H19



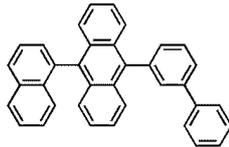
H20

[0316]

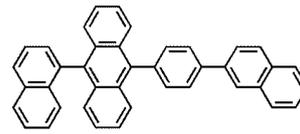
[0317]



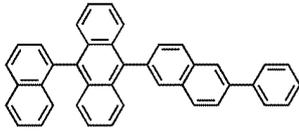
H21



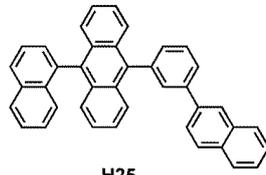
H22



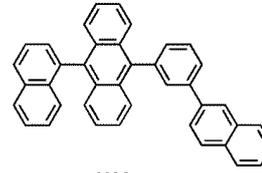
H23



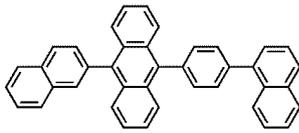
H24



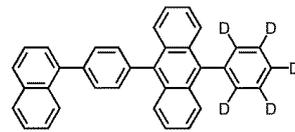
H25



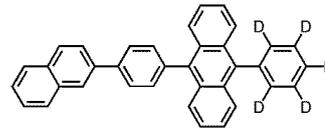
H26



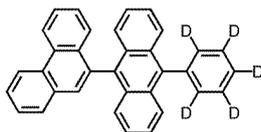
H27



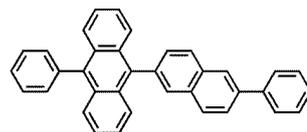
H28



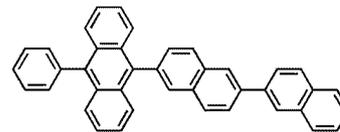
H29



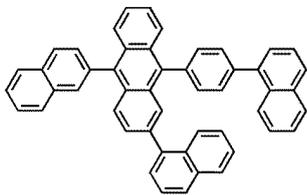
H30



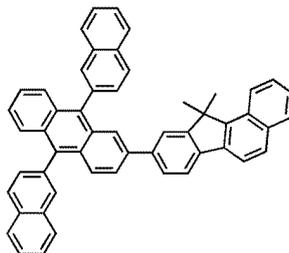
H31



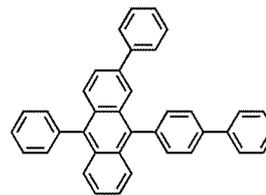
H32



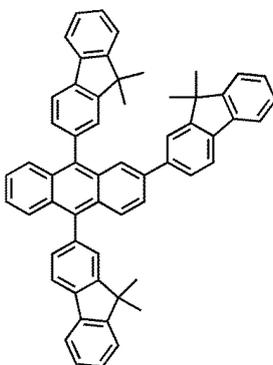
H33



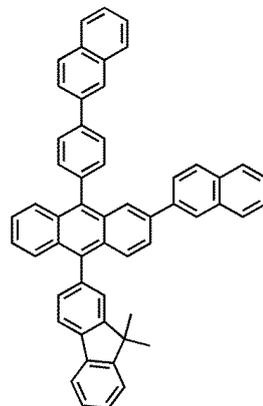
H34



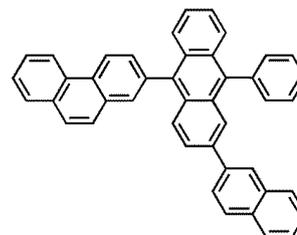
H35



H36



H37

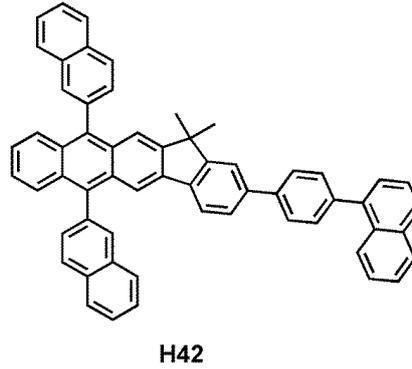
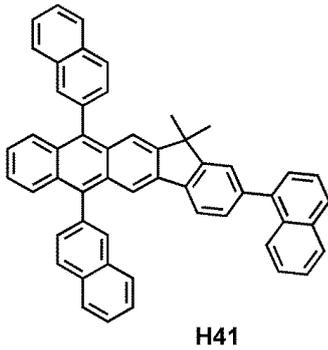
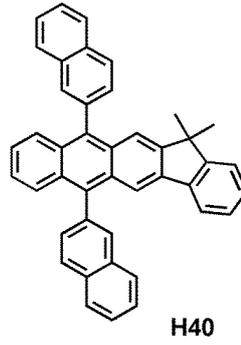
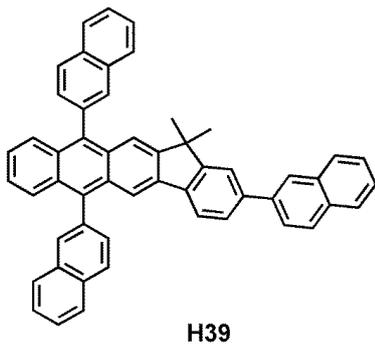


H38

[0318]

[0319]

[0320]



[0321]

[0322] 상기 유기 발광 소자가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 수 있다. 또는, 상기 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및/또는 청색 발광층이 적층된 구조를 가짐으로써, 백색광을 방출할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0323] 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.

[0324] 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.

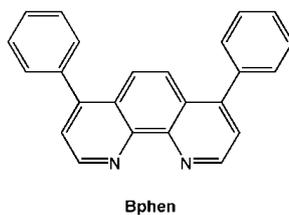
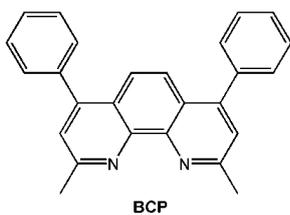
[0325] 다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.

[0326] 전자 수송 영역은 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0327] 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.

[0328] 상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참조한다.

[0329] 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.

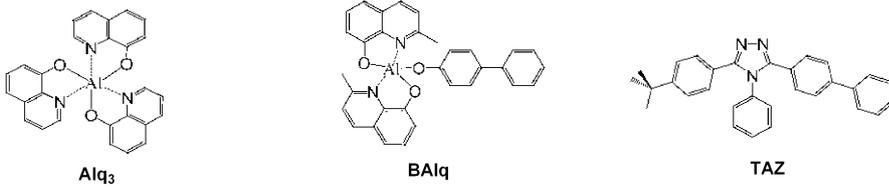


[0330]

[0331] 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

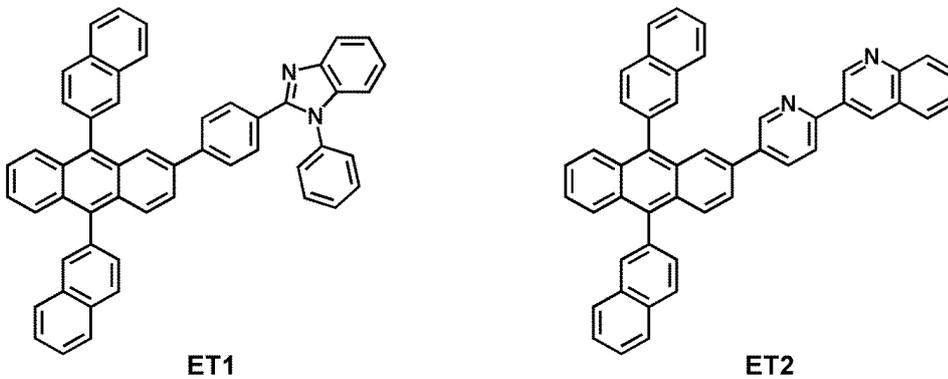
얻을 수 있다.

[0332] 상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq<sub>3</sub>, Balq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.



[0333]

[0334] 또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 및 ET2 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

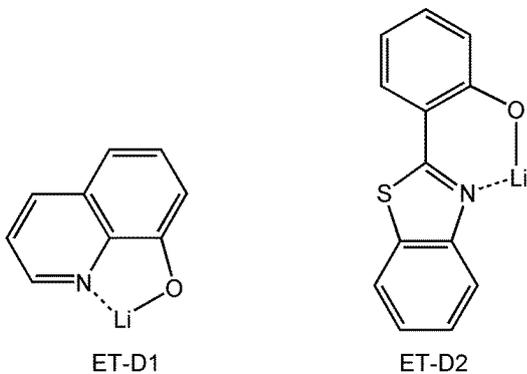


[0335]

[0336] 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.

[0337] 상기 전자 수송층은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0338] 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.



[0339]

[0340] 또한 전자 수송 영역은, 제2전극(19)으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 전자 주입층(EIL)을 포함할 수 있다.

[0341] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O 및 BaO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

- [0342] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0343] 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.
- [0344] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0345] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기는 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0346] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기는 -OA<sub>101</sub>(여기서, A<sub>101</sub>은 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0347] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐가는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0348] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0349] 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기는 상기 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0350] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하는 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0351] 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기는 상기 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0352] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하는 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-히드로퓨라닐기, 2,3-히드로티오펜기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0353] 본 명세서 중 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기는 탄 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기,

크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0354] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0355] 본 명세서 중 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기는 -OA<sub>102</sub>(여기서, A<sub>102</sub>는 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리키고, 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기(arylthio)는 -SA<sub>103</sub>(여기서, A<sub>103</sub>은 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리킨다.

[0356] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 8 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예는 플루오레닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0357] 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 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 1 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은, 카바졸일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0358] 본 명세서 중 상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0359] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

[0360] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>), -B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

[0361] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0362] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-

C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>), -B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0363] -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>), -B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>); 중에서 선택되고;

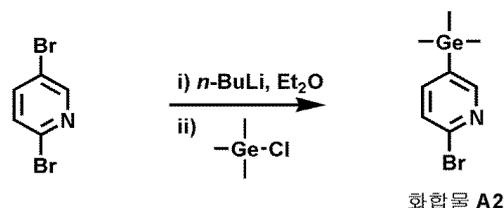
[0364] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>9</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>19</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>29</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>39</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0365] 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.

[0366] [실시예]

[0367] **합성예 1: 화합물 2의 합성**

[0368] 화합물 A2의 합성



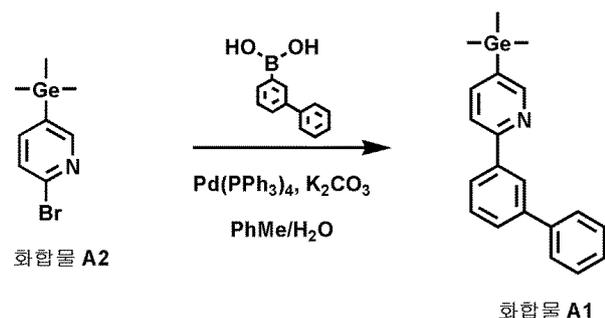
[0369]

[0370] 2,5-디브로모피리딘 (10.0 g, 42.22 mmol)을 디에틸에테르 200 mL를 넣고, -78℃로 냉각한 후 n-BuLi (42.22 mmol)를 천천히 넣은 다음, -78℃에서 1시간 교반하였다. 이 후, 클로로트리메틸저메인 (5.2 mL, 42.22 mmol)를 넣고, -78℃에서 1시간 반응 진행 후, 상온으로 가온하여 12시간 반응을 진행하였다. 이로부터 수득한 유기층을 디클로로메탄을 사용하여 추출하고 무수황산마그네슘을 첨가하여 수분을 제거하고, 여과하여 수득한 여과액을 감압하여 수득한 잔류물에 대하여 에틸아세테이트:헥산 = 1:15 조건에서 컬럼 크로마토그래피를 수행하여 화합물 A2 6.3 g (54%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 LCMS 및 <sup>1</sup>H NMR로 확인하였다.

[0371] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 8.36 (s, 1H), 7.58 (d, 1H), 7.44 (d, 2H), 0.42 (s, 9H)

[0372] MS : m/z 275.94 [(M+)<sup>+</sup>]

[0373] 화합물 A1의 합성



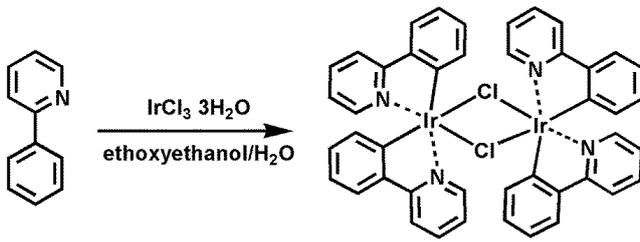
[0374]

[0375] 화합물 A2 (6.30 g, 22.93 mmol), 바이페닐보론산(biphenylboronic acid) (5.35 g, 43.85 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.90 g, 3.99 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.09 g, 7.97 mmol)에 100 mL의 톨루엔과 50 mL의 증류수를 혼합한 다음, 70°C에서 18시간 교반한 후, 실온까지 냉각시키고 여과하였다. 이로부터 디클로로메탄을 사용하여 유기층을 추출하고 무수황산마그네슘(MgSO<sub>4</sub>)를 첨가하여 수분을 제거한 다음 여과하여 수득한 여과액을 감압하여 수득한 잔류물을 에틸아세테이트:헥산 = 1:25 조건에서 컬럼 크로마토그래피 방법을 통해서 정제하여 화합물 A1 5.1 g (64%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 LCMS 및 <sup>1</sup>H NMR로 확인하였다.

[0376] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 8.75 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 7.96 (d, 1H), 7.84 (dd, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.65 (t, 3H), 7.54 (t, 1H), 7.45 (t, 2H), 7.38 (t, 1H), 0.46 (s, 9H)

[0377] MS : m/z 349.09 [(M+1)<sup>+</sup>]

[0378] 화합물 M2A의 합성

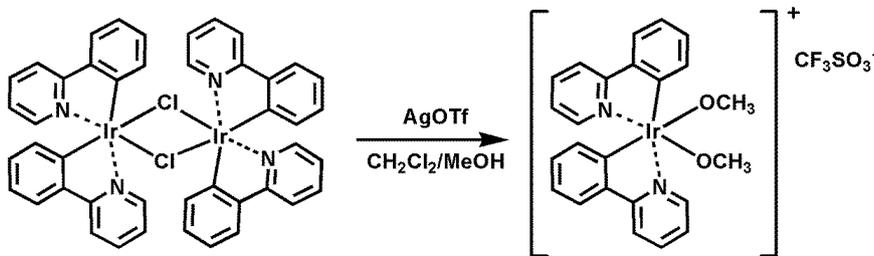


화합물 M2A

[0379]

[0380] 2-페닐피리딘(2-phenylpyridine) (10.0 g, 64.43 mmol)과 이리듐 클로라이드(iridium chloride) (10.1 g, 28.64 mmol)에 150 mL의 에톡시에탄올(ethoxyethanol)과 50 mL의 증류수를 혼합한 다음, 24시간 동안 환류 교반하여 반응 진행 후, 상온까지 온도를 낮추었다. 이로부터 생성된 고형물을 여과하여 분리하고, 물/메탄올/헥산 순으로 충분히 세정하여 수득한 고체를 진공 오븐에서 건조하여 화합물 M2A 13.8 g (90%)를 수득하였다.

[0381] 화합물 M1A의 합성



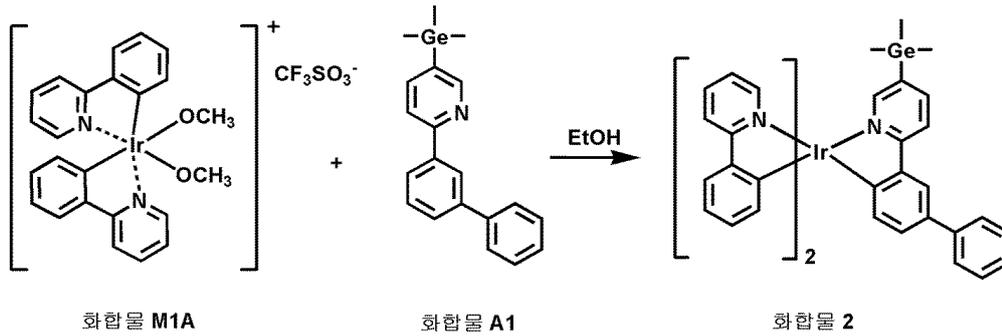
화합물 M2A

화합물 M1A

[0382]

[0383] 화합물 M2A (2.36 g, 2.20 mmol)에 60mL의 MC를 혼합한 다음, AgOTf (1.13 g, 4.40 mmol)을 20 mL의 디클로로메탄/메탄올 (3:1) 혼합용매에 녹여 첨가하였다. 이 후, 알루미늄 호일로 빛을 차단한 상태로 상온에서 18 시간 교반하여 반응 진행한 다음, 셀라이트 여과하여 생성된 고체를 제거하고 여과액을 감압하여 수득한 고체(화합물 M1A)에 대하여 추가적인 정제를 하지 않고 다음 반응에 사용하였다.

[0384] 화합물 2의 합성



[0385]

[0386] 화합물 M1A (3.06 g, 4.29 mmol)과 화합물 A1 (1.79 g, 5.15 mmol)에 에탄올 20 mL를 혼합하고, 15시간 동안 환류 교반하여 반응을 진행한 후에 온도를 낮추었다. 이로부터 수득한 혼합물을 여과하여 수득한 고체를 에탄올과 헥산으로 충분히 세정하고, 에틸아세테이트:헥산=1:6 조건으로 컬럼 크로마토그래피를 수행하여 화합물 2 2.1 g (58%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 LCMS 및 <sup>1</sup>H NMR로 확인하였다.

[0387]

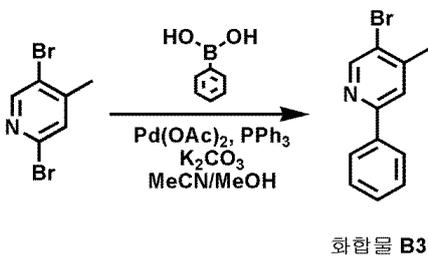
<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 7.89 (m, 4H), 7.61 (m, 8H), 7.50 (d, 1H), 7.40 (m, 3H), 7.24 (m, 1H), 7.13 (d, 1H), 6.89 (m, 9H), 0.19 (s, 9H)

[0388]

MS : *m/z* 849.18 [(M+1)<sup>+</sup>]

[0389] 합성예 2: 화합물 7의 합성

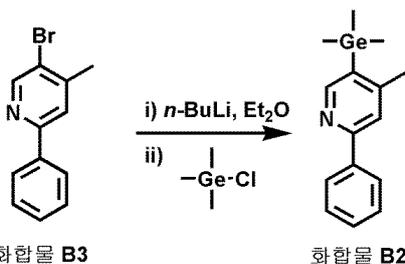
[0390] 화합물 B3의 합성



[0391]

[0392] 2,5-디브로모-4-메틸피리딘(2,5-dibromo-4-methylpyridine) (20.0 g, 79.71 mmol), 페닐보론산(phenylboronic acid) (11.7 g, 95.65 mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> (0.90 g, 3.99 mmol), PPh<sub>3</sub> (2.09 g, 7.97 mmol) 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (22.0 g, 159.4 mmol)에 200 mL의 아세토니트릴(acetonitrile)과 100 mL의 메탄올을 혼합한 다음, 50°C에서 18시간 교반한 후, 실온까지 냉각시키고 여과하였다. 이로부터 디클로로메탄을 사용하여 유기층을 추출하고 무수황산마그네슘(MgSO<sub>4</sub>)를 첨가하여 수분을 제거한 다음 여과하여 수득한 여과액을 감압하여 수득한 잔류물을 에틸아세테이트:헥산 = 1:25 조건에서 컬럼 크로마토그래피 방법을 통해서 정제하여 화합물 B3 9.6 g (48%)을 수득하였다.

[0393] 화합물 B2의 합성



[0394]

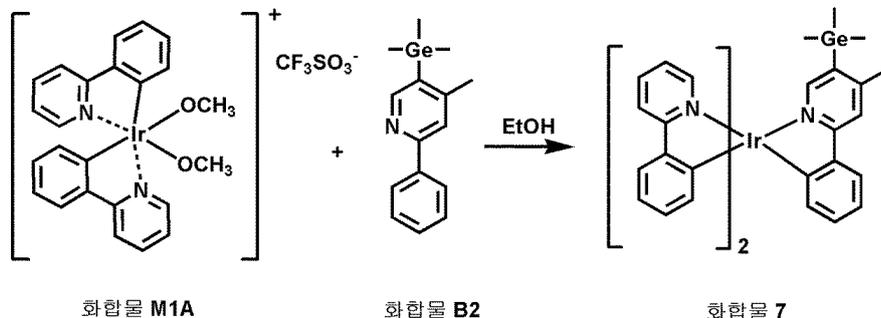
[0395] 2,5-디브로모피리딘 대신 화합물 B3 (9.6 g, 38.61 mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 A2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 B2 9.1 g (82%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 LCMS

및  $^1\text{H}$  NMR로 확인하였다.

[0396]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  8.53 (s, 1H), 7.92 (d, 2H), 7.39 (m, 4H), 2.40 (s, 3H), 0.44 (s, 9H)

[0397] MS :  $m/z$  287.07 [ $(\text{M}+1)^+$ ]

[0398] 화합물 7의 합성



[0399]

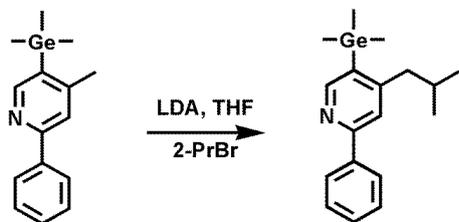
[0400] 화합물 A1 대신 화합물 B2 (1.7 g, 6.11 mmol)를 사용하고 화합물 M1A (3.6 g, 5.09 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 7 1.3 g (33%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 LCMS 및  $^1\text{H}$  NMR로 확인하였다.

[0401]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  7.91 (m, 4H), 7.65 (m, 8H), 7.54 (s, 1H), 7.40 (m, 4H), 7.24 (s, 1H), 7.13 (d, 2H), 6.89 (m, 2H), 2.43 (s, 3H), 0.20 (s, 9H)

[0402] MS :  $m/z$  787.16 [ $(\text{M}+1)^+$ ]

[0403] 합성예 3: 화합물 8의 합성

[0404] 화합물 B1의 합성



화합물 B2

화합물 B1

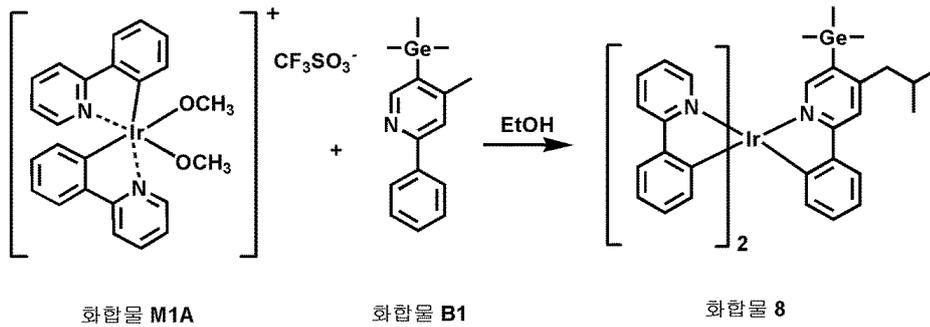
[0405]

[0406] 화합물 B2 (2.30 g, 8.04 mmol)에 40 mL의 THF를 혼합한 다음,  $-78^\circ\text{C}$ 로 냉각한 후 리튬 디이소프로필아미드 (Lithium diisopropylamide)(LDA, 7.24 mL, 14.48 mmol)을 천천히 첨가하였다. 이 후,  $-78^\circ\text{C}$ 에서 1시간 교반하여 반응을 진행한 후 상온으로 가온한 다음, 1.5시간 추가로 반응을 진행하였다. 이어서,  $-78^\circ\text{C}$ 로 온도를 내리고 2-브로모프로판(2-bromopropane)(1.25 mL, 13.27 mmol)을 천천히 첨가한 다음, 상온으로 온도를 올린 후 12시간 반응을 진행하였다. 이로부터 수득한 유기층을 디클로로메탄을 사용하여 추출하고 무수황산마그네슘을 첨가하여 수분을 제거하고 여과하여 수득한 여과액을 감압하여 수득한 잔류물에 대하여 에틸아세테이트:헥산 = 4:96 조건에서 컬럼 크로마토그래피를 수행하여 화합물 B1 2.0 g (76%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 LCMS 및  $^1\text{H}$  NMR로 확인하였다.

[0407]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  8.55 (s, 1H), 7.89 (d, 2H), 7.40 (m, 4H), 3.25 (d, 2H), 1.85 (m, 1H), 0.90 (d, 6H), 0.45 (s, 9H)

[0408] MS :  $m/z$  329.12 [ $(\text{M}+1)^+$ ]

[0409] 화합물 8의 합성



[0410]

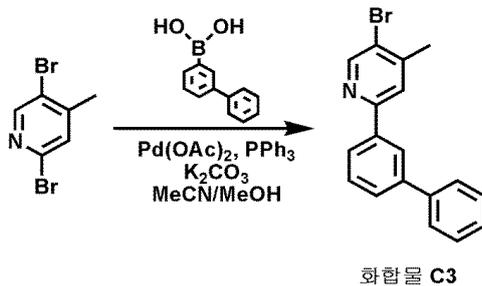
[0411] 화합물 B2 대신 화합물 B1 (1.7 g, 5.26 mmol)를 사용하고 화합물 M1A (3.1 g, 4.39 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 8 1.0 g (27%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 LCMS 및 <sup>1</sup>H NMR로 확인하였다.

[0412] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 7.89 (m, 4H), 7.63 (m, 8H), 7.53 (s, 1H), 7.39 (m, 4H), 7.25 (s, 1H), 7.15 (d, 2H), 6.90 (m, 2H), 3.31 (d, 2H), 1.89 (m, 1H), 0.91 (d, 6H), 0.18 (s, 9H)

[0413] MS : *m/z* 829.20 [(M+1)<sup>+</sup>]

[0414] 합성에 4: 화합물 10의 합성

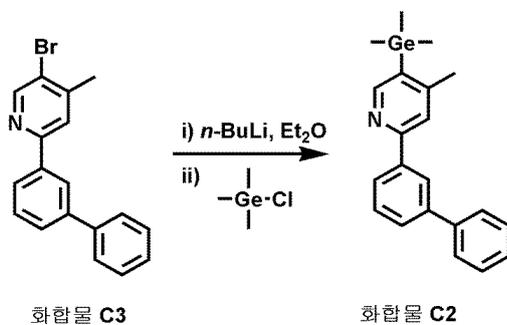
[0415] 화합물 C3의 합성



[0416]

[0417] 페닐보론산 대신 [1,1'-비페닐]-3-일보론산([1,1'-biphenyl]-3-ylboronic acid) (8.0 g, 40.34 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성에 2의 화합물 B3의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 C3 9.5 g (78%)을 수득하였다.

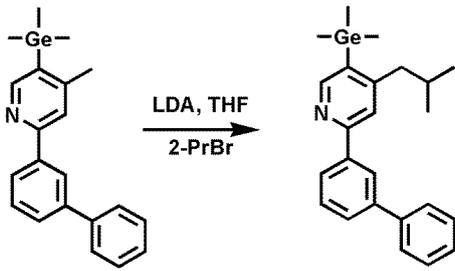
[0418] 화합물 C2의 합성



[0419]

[0420] 2,5-디브로모피리딘 대신 화합물 C3 (3.0 g, 9.25 mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 A2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 C2 2.5 g (76%)을 수득하였다.

[0421] 화합물 C1의 합성



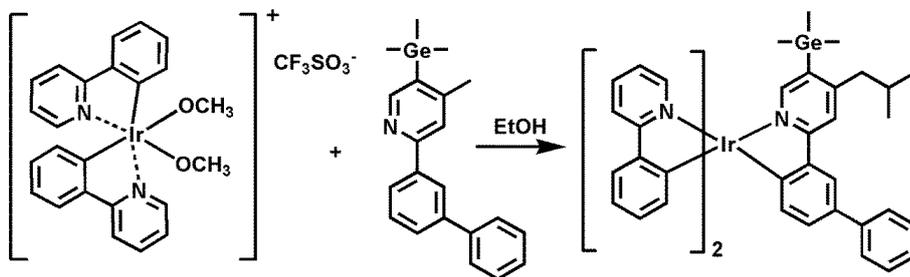
화합물 C2

화합물 C1

[0422]

[0423] 화합물 B2 대신 화합물 C2 (2.5 g, 7.03 mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예3의 화합물 B1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 C1 2.1 g (75%)을 수득하였다.

[0424] 화합물 10의 합성



화합물 M1A

화합물 C1

화합물 10

[0425]

[0426] 화합물 B2 대신 화합물 C1 (1.9 g, 4.65 mmol)를 사용하고 화합물 M1A (2.8 g, 3.87 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 10 1.2 g (34%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 LCMS 및 <sup>1</sup>H NMR로 확인하였다.

[0427] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 7.89 (m, 4H), 7.59 (m, 8H), 7.49 (d, 1H), 7.38 (m, 3H), 7.21 (m, 1H), 7.12 (d, 1H), 6.87 (m, 8H), 3.30 (d, 2H), 1.88 (m, 1H), 0.90 (d, 6H), 0.19 (s, 9H)

[0428] MS : m/z 905.23 [(M+)<sup>+</sup>]

[0429] 실시예 1

[0430] ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하였다.

[0431] 이어서, 상기 유리 기판 상의 ITO 전극(애노드) 상에 m-MTDATA를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 α-NPD를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 250Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0432] 상기 정공 수송층 상에 화합물 2(도펀트) 및 CBP(호스트)를 각각 증착 속도 0.1Å/sec와 1Å/sec로 공증착하여 400Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0433] 상기 발광층 상에 Balq를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상에 Alq<sub>3</sub>를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 후, 상기 전자 주입층 상에 Al를 진공 증착하여 1200Å 두께의 제2전극(캐소드)을 형성함으로써, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / CBP + 10% (화합물 2) (400Å) / Balq(50Å) / Alq<sub>3</sub>(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å) 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0434] 실시예 2 내지 4 및 비교예 1 내지 3

[0435] 발광층 형성시 도펀트로서 화합물 2 대신 표 2에 기재된 화합물을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0436] 평가예 1: 유기 발광 소자의 특성 평가

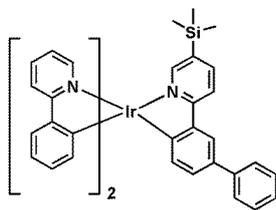
[0437] 상기 실시예 1 및 2와 비교예 1 내지 3에서 제조된 각각의 유기 발광 소자에 대하여 구동 전압, 효율, 색순도, 최대 효율, EL 스펙트럼의 FWHM 및 최대 발광 파장을 평가하여 그 결과를 표 2에 나타내었다. 평가 장치로서 전류-전압계(Keithley 2400) 및 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 사용하였다.

표 2

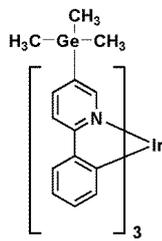
[0438]

	도펀트	구동 전압 (V)	효율 (Cd/A) (at 구동 전압)	CIE x (at 구동 전압)	최대 효율 (Cd/A)	FWHM (nm)	최대 발광 파장 (nm)
실시예 1	화합물 2	4.9	49.6	0.354	59.0	74.6	523
실시예 2	화합물 7	4.9	49.3	0.330	60.5	75.9	517
실시예 3	화합물 8	5.0	47.5	0.325	62.0	77	515
실시예 4	화합물 10	4.9	50.0	0.322	60.0	79	518
비교예 1	화합물 R1	5.4	49.2	0.374	57.7	81.8	528
비교예 2	화합물 R2	5.2	42.0	0.331	55.0	77	520
비교예 3	화합물 R3	5.4	39.0	0.315	46.5	84	513

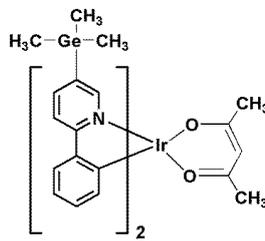
[0439] <화합물 R1>



<화합물 R2>



<화합물 R3>



[0440]

[0441] 상기 표 2로부터, 실시예 1 내지 4의 유기 발광 소자의 CIE x 좌표는 0.322 내지 0.354의 범위에 속하나, 비교예 1의 유기 발광 소자 CIE x 좌표가 0.374이므로, 실시예 1 내지 4의 유기 발광 소자는 비교예 1의 유기 발광 소자에 비하여 우수한 색순도 특성을 가짐을 확인할 수 있다. 또한, 실시예 1 내지 4의 유기 발광 소자의 효율 및 최대 효율은 비교예 2 및 3의 유기 발광 소자의 효율 및 최대 효율에 비하여 우수함을 확인할 수 있다.

부호의 설명

- [0442] 10: 유기 발광 소자  
 11: 제1전극  
 15: 유기층  
 19: 제2전극

도면

도면1

