



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 공개특허공보(A)

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

H01L 51/00 (2006.01) *C07F* 15/00 (2006.01) *H01L* 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

H01L 51/0084 (2013.01) *C07F* 15/0033 (2013.01)

(21) 출원번호 **10-2019-0123360**

(22) 출원일자 **2019년10월04일**

심사청구일자 없음

(30) 우선권주장

1020180146767 2018년11월23일 대한민국(KR)

(11) 공개번호 10-2020-0062022

(43) 공개일자 2020년06월03일

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

강선우

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

전상호

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

조영미

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(74) 대리인

리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요 약

유기금속 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대 표 도 - 도1

10

190 150 110

(52) CPC특허분류

CO7F 15/0086 (2013.01)

H01L 51/0085 (2013.01)

H01L 51/0087 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

명 세 서

청구범위

청구항 1

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고,

하기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 1>

 $\mathtt{M}(\mathtt{L}_1)_{\mathtt{n}1}(\mathtt{L}_2)_{\mathtt{n}2}$

<화학식 2-1> <화학식 2-2>

$$R_{12}$$
 R_{13}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{15}
 R

<화학식 3>

$$(R_{21})_{b21}$$
 $(R_{21})_{a21}$
 $(R_{22})_{b22}$
 $(R_{23})_{b23}$

상기 화학식 1 중,

M은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테늄(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고;

상기 화학식 1 중, L_1 은 상기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시되는 리간드이고, n1은 1, 2 또는 3이고, n1이 2 이상 인 경우, 2 이상의 L_1 은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 1 중, L_2 는 상기 화학식 3으로 표시되는 리간드이고, n2는 0, 1 또는 2이고, n2가 2 이상인 경우, 2 이상의 L_2 는 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 1 중, n1+n2는 2 또는 3이고,

상기 화학식 1 중, n1개의 L_1 과 n2개의 L_2 는 선택적으로, 단일 결합, 제1연결기 또는 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 에테로시클릭 그룹을 통하여 서로 연결될 수 있고,

상기 제1연결기는 *''-N(R₄)-*''', *''-B(R₄)-*''', *''-P(R₄)-*''', *''-C(R₄)(R₅)-*''', *''-Si(R₄)(R₅)-*''', *''-Ge(R₄)(R₅)-*''', *''-Se-*''', *''-O-*''', *''-C(=0)-*''', *''-S(=0)-*''', *''-S(=0)₂-*''', *''-C(R₄)=*', *''=C(R₄)-*''', *''-C(R₅)-*''', *''-C(=S)-*''' 및 *''-C≡C-*''' 중에서 선택되고,

상기 화학식 2-1 중, A_1 은 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

상기 화학식 2-1 중, X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로, N 또는 C(R₃)이고;

상기 화학식 2-2 중, X₁₁ 및 X₁₂는 C(R₁₅)이고, X₁₃은 N 또는 C(R₁₅)이고;

상기 화학식 3 중, T_{21} 은 *''-N(R_{24})-*''', *''-B(R_{24})-*''', *''-P(R_{24})-*''', *''-C(R_{24})(R_{25})-*''', *''-Si(R_{24})(R_{25})-*''', *''-Ge(R_{24})(R_{25})-*''', *''-Se-*''', *''-O-*''', *''-C(=0)-*''', *''-S(=0)-*''', *'''-S(=0)-*''', *'''-C(R_{24})-*''', *''-C(R_{24})-*''', *''-C(R_{24})-*''', *''-C(R_{24})-*''', *''-C(R_{24})-*''', *''-C(=S)-*''' 및 *''-C≡ C-*''' 중에서 선택되고,

상기 화학식 2-1, 2-2 및 3 중, R₁ 내지 R₅, R₁₁ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀에테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알켈기, 치환 또는 비치환된 C₄-C₁₀에테로시클로알켈기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴 기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴 기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴타오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테 로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=0)(Q₁), -S(=0)₂(Q₁) 및 -P(=0)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

상기 화학식 2-1 중, b1은 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, b1이 2 이상인 경우, 2 이상의 R_1 은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 3 중, b21 내지 b23은 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b21이 2 이상인 경우, 2 이상의 R_{21} 은 서로 동일하거나 상이하고, b22가 2 이상인 경우, 2 이상의 R_{22} 는 서로 동일하거나 상이하고, b23이 2 이상인 경우, 2 이상의 R_{23} 은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 2-1, 2-2 및 2-3 중, b1 개의 R₁, R₂, R₃, R₁₁ 내지 R₁₄, R₁₅, b21개의 R₂₁, b22개의 R₂₂, b23개의 R₂₃, R₂₄ 및 R₂₅ 중 이웃한 2개는 선택적으로, 서로 연결되어, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 3 중, a21은 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, a21이 2 이상인 경우, 2 이상의 T_{21} 은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 2-1 및 2-2 중, * 및 *'는 화학식 1에서 M과의 결합 사이트이고, 상기 화학식 1 및 3 중, *'' 및 *'''는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

상기 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환된 C_6 - C_{60} 아릴지, 치환된 C_6 - C_{60} 하레로아릴지, 치환된 C_1 - C_6 0헤테로아릴지, 치환된 C_1 - C_1 0헤테로아필지, 치환된 C_1 0이 C_1 0이

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기 및 C_1 - C_{60} 알콕시기;

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=0)(Q₁₁), -S(=0)₂(Q₁₁) 및 -P(=0)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, C_1 - C_2 0에테로아릴기, C_3 - C_4 0에테로아릴기, C_5 - C_5 0에테로아릴기, C_5 - C_6 0에테로아필드 C_5 0에테로아필드

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴지, C₆-C₆₀아릴디오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=0)(Q₂₁), -S(=0)₂(Q₂₁) 및 -P(=0)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴 지, C₆-C₆₀아릴 지, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₁₀에테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₇-C₆₀아릴 지, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}), -N(Q_{31})(Q_{32}), -B(Q_{31})(Q_{32}), -C(=0)(Q_{31}), -S(=0)_2(Q_{31}) \not\sqsubseteq -P(=0)(Q_{31})(Q_{32});$

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₄-C₁₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합 다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 유기금속 화합물은 4배위 또는 6배위 리간드 및 금속 원자(M_1)를 포함하고, 상기 유기금속 화합물의 3MC 상태(triplet metal centered state)의 에너지 준위(E_{3MC})가 상기 유기금속 화합물의 3MLCT 상태(triplet metal-to-ligand charge transfer state)의 에너지 준위(E_{3MLCT})보다 높은, 유기 발광 소자.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 유기금속 화합물이 E₃ ≥ 5 kcal/mol을 만족하고,

상기 E₃는 하기 식 1에 의하여 정의된, 유기 발광 소자:

<식 1>

 $E_3 = ||E_{MLCT}| - |E_{MC}||$

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

상기 유기층이 상기 유기금속 화합물을 포함하고,

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

상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층, 발광 보조층 및 전자 저지층 중에서 선택된 적어도 하나를 포함하고,

상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 발광층이 상기 유기금속 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 발광층이 최대 발광 파장이 440 nm 내지 490 nm인 청색광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 7

제4항에 있어서,

상기 정공 수송 영역이 LUMO 에너지 준위가 -3.5eV 보다 낮은 p-도펀트를 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 8

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물:

<화학식 1>

 $M(L_1)_{n1}(L_2)_{n2}$

<화학식 2-1> <화학식 2-2>

$$R_{12}$$
 R_{13}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{15}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{15}
 R_{14}
 R_{15}
 R

<화학식 3>

$$(R_{21})_{b21}$$
 $(R_{21})_{a21}$
 $(R_{22})_{b22}$
 $(R_{23})_{b23}$

상기 화학식 1 중,

M은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테늄(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고;

상기 화학식 1 중, L_1 은 상기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시되는 리간드이고, n1은 1, 2 또는 3이고, n1이 2 이상 인 경우, 2 이상의 L_1 은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 1 중, L_2 는 상기 화학식 3으로 표시되는 리간드이고, n2는 0, 1 또는 2이고, n2가 2 이상인 경우, 2 이상의 L_2 는 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 1 중, n1+n2는 2 또는 3이고,

상기 화학식 1 중, n1개의 L_1 과 n2개의 L_2 는 선택적으로, 단일 결합 또는 제1연결기를 통하여 서로 연결될 수 있고,

상기 제1연결기는 *''-N(R₄)-*''', *''-B(R₄)-*''', *''-P(R₄)-*''', *''-C(R₄)(R₅)-*''', *''-Si(R₄)(R₅)-*''', *''-Ge(R₄)(R₅)-*''', *''-Se-*''', *''-O-*''', *''-C(=0)-*''', *''-S(=0)-*''', *''-S(=0)₂-*''', *''-C(R₄)=*', *''=C(R₄)-*''', *''-C(R₅)-*''', *''-C(=S)-*''' 및 *''-C≡C-*''' 중에서 선택되고,

상기 화학식 2-1 중, A_1 은 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

상기 화학식 2-1 중, X_1 및 X_2 는 서로 독립적으로, N 또는 $C(R_3)$ 이고;

상기 화학식 2-2 중, X₁₁ 및 X₁₂는 C(R₁₅)이고, X₁₃은 N 또는 C(R₁₅)이고;

상기 화학식 3 중, T_{21} 은 *''-N(R_{24})-*''', *''-B(R_{24})-*''', *''-P(R_{24})-*''', *''-C(R_{24})(R_{25})-*''', *''-Si(R_{24})(R_{25})-*''', *''-Ge(R_{24})(R_{25})-*''', *''-Se-*''', *''-O-*''', *''-C(=0)-*''', *''-S(=0)-*''', *''-S(=0)-*''', *''-C(R_{24})=*', *''-C(R_{24})-*''', *''-C(R_{24})=*(R_{25})-*''', *''-C(=S)-*''' 및 *''-C≡ C-*''' 중에서 선택되고,

상기 화학식 2-1, 2-2 및 3 중, R₁ 내지 R₅, R₁₁ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀에테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀에테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴 기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴 기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴타오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀에테 로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다한 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=0)(Q₁), -S(=0)₂(Q₁) 및 -P(=0)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

상기 화학식 2-1 중, b1은 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, b1이 2 이상인 경우, 2 이상의 R_1 은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 3 중, b21 내지 b23은 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b21이 2 이상인 경우, 2 이상의 R_{21} 은 서로 동일하거나 상이하고, b22가 2 이상인 경우, 2 이상의 R_{22} 는 서로 동일하거나 상이하고, b23이 2 이상인 경우, 2 이상의 R_{23} 은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 2-1, 2-2 및 2-3 중, b1 개의 R_1 , R_2 , R_3 , R_{11} 내지 R_{14} , R_{15} , b21개의 R_{21} , b22개의 R_{22} , b23개의 R_{23} , R_{24} 및 R_{25} 중 이웃한 2개는 선택적으로, 서로 연결되어, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 에테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 3 중, a21은 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, a21이 2 이상인 경우, 2 이상의 T_{21} 은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 2-1 및 2-2 중, * 및 *'는 화학식 1에서 M과의 결합 사이트이고, 상기 화학식 1 및 3 중, *'' 및 *'''는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

상기 치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환된 C_2-C_{60} 알케닐 기, 치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐기, 치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴 기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴지, 치환된 C_1-C_{60} 이테로아필리 C_1-C_{60} 이테로아필리

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기 및 C_1 - C_{60} 알콕시기;

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=0)(Q₁₁), -S(=0)₂(Q₁₁) 및 -P(=0)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

 $C_3 - C_{10}$ 시클로알킬기, $C_1 - C_{10}$ 헤테로시클로알킬기, $C_3 - C_{10}$ 시클로알케닐기, $C_1 - C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기, $C_6 - C_{60}$ 아릴기,

 C_6-C_{60} 아릴옥시기, C_6-C_{60} 아릴티오기, C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로 축합다환 그룹;

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=0)(Q₂₁), -S(=0)₂(Q₂₁) 및 -P(=0)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알키기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴 옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33}), -N(Q_{31})(Q_{32}), -B(Q_{31})(Q_{32}), -C(=0)(Q_{31}), -S(=0)_2(Q_{31}) \not\sqsubseteq -P(=0)(Q_{31})(Q_{32});$

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₄-C₆₀해테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합 다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 화학식 1 중, M은 Pt, Ir, Pd, Cu, Ag 및 Au 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 10

제8항에 있어서,

상기 화학식 1 중, n1은 1이고, n2는 1이거나, n1은 3이고, n2는 0인, 유기금속 화합물.

청구항 11

제8항에 있어서,

상기 화학식 2-1 중, A₁은,

벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 이속사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 이소티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아 졸 그룹, 1,2,4-트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹, 트리아자실롤 그룹, 시클로 핵산 그룹, 및 시클로핵센 그룹;

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로펜실기, 시클로렉실기, 시클로렉틸기, 시클로렉네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페탈레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다

지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴 놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤 조티오페닐기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리 아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 디벤조실롤일기, 나프토벤조티오페닐기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토퓨라닐기, 디나프토티오페닐기, 디나프토실롤일기, 이미다조피 리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레 닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오페닐기, 아자디벤 조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=0)(Q₃₁), -S(=0)(Q₃₁), -S(=0)₂(Q₃₁), -P(=0)(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -P(=S)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 이속사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 이소티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 1,2,4-트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹, 트리아자실롤 그룹, 시클로헥산 그룹, 및 시클로헥센 그룹; 중에서 선택되고,

 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C_6 - C_{60} 아릴기, C_6 - C_{60} 아릴옥시기, C_6 - C_{60} 아릴티오기, C_1 - C_{60} 헤테로아 릴기, C_1 - C_{60} 헤테로아 릴리오기, C_1 - C_{60} 헤테로아 리로오기, C_1 - C_{60} 헤테로아 리로오기, C_1 - C_{60} 헤테로아 리로오기, C_1 - C_{60} 에테로아 리로오기, C_1 - C_{60} 에테로아 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 12

제8항에 있어서,

상기 화학식 2-1 중, X₁ 내지 X₂는 C(R₃)이고,

상기 화학식 2-2 중, X₁₃은 C(R₁₅)인, 유기금속 화합물.

청구항 13

제8항에 있어서,

상기 화학식 3 중, T₂₁은 *''-C(R₂₄)(R₂₅)-*'''이고, a21은 1 또는 2인, 유기금속 화합물.

청구항 14

제8항에 있어서,

상기 화학식 2-1, 2-2 및 3 중, R_1 내지 R_5 , R_{11} 내지 R_{15} 및 R_{21} 내지 R_{25} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기;

중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, 및 C_1 - C_{20} 알콕시기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 피롤일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 및 트리아지닐기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로렉실기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지

닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 지놀리닐기, 및 트리아지닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=0)(Q_{31})$, $-S(=0)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=0)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로렉실기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 및 트리아지닐기; 및

 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3), -N(Q_1)(Q_2), -B(Q_1)(Q_2), -C(=0)(Q_1), -S(=0)_2(Q_1) \ \not \ \, \exists \ \, -P(=0)(Q_1)(Q_2);$

중에서 선택되고.

Q1 내지 Q3 및 Q31 내지 Q33은 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_2 - C_{20} 알케닐기, C_2 - C_{20} 알키닐기, C_1 - C_{20} 알콕시기, C_3 - C_{10} 시클로알킬기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6 - C_{20} 아릴기, C_1 - C_{20} 에테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중에서 선택되는, 유기금속 화합물.

청구항 15

제8항에 있어서,

상기 화학식 2-1 중, R_2 는 C_1 - C_2 알킬기, $-N(Q_1)(Q_2)$ 및 페닐기; 및 C_1 - C_2 알킬기로 치환된, C_1 - C_2 알킬기, $-N(Q_1)(Q_2)$ 및 페닐기; 중에서 선택되고,

상기 Q_1 및 Q_2 는 C_1 - C_{20} 알킬기인, 유기금속 화합물.

청구항 16

제8항에 있어서,

상기 화학식 2-2 중, R_{11} 및 R_{12} 는 서로 독립적으로, 수소, -F, -C1, 시아노기, C_1-C_{20} 알킬기 및 페닐기 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 17

제8항에 있어서,

상기 n1 및 n2는 1이고, L1은 화학식 2-1로 표시되는 그룹이고,

상기 b1 개의 R_1 중 하나와 인접한 b23 개의 R_{23} 중 하나는 단일 결합 또는 제1연결기를 통하여 연결되는, 유기 금속 화합물.

청구항 18

제8항에 있어서,

상기 n1은 3이고, L1은 화학식 2-2로 표시되는 그룹이고,

상기 3개의 L₁ 중 X₁₃은 모두 C(R₁₅)이고,

상기 3개의 L_1 중 3개의 R_{14} 는 서로 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테 로시클릭 그룹을 통하여 연결되고,

상기 3개의 L_1 중 3개의 R_{15} 는 서로 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테 로시클릭 그룹을 통하여 연결되는, 유기금속 화합물.

청구항 19

제8항에 있어서,

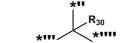
상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-5 중 어느 하나로 표시된 그룹인, 유기금속 화합물:

상기 화학식 1-1 내지 1-5 중,

L₁₁ 내지 L₁₅는 서로 독립적으로, 단일 결합, *''-N(R₄)-*''', *''-B(R₄)-*''', *''-P(R₄)-*''', *''-C(R₄)(R₅)-*''', *''-Si(R₄)(R₅)-*''', *''-Ge(R₄)(R₅)-*''', *''-Se-*''', *''-Se-*''', *''-O-*''', *''-C(=0)-*''', *''-S(=0)-*''', *''-S(=0)-*''', *''-C(R₄)=*', *''-C(R₄)-*''', *''-C(R₄)=C(R₅)-*''', *''-C(=S)-*''' 및 *''-C≡C-*''' 중에서 선택되고,

c11 내지 c15는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, c11이 2 이상인 경우, 2 이상의 L_{11} 은 서로 동일하거나 상이하고, c12가 2 이상인 경우, 2 이상의 L_{12} 는 서로 동일하거나 상이하고, c13이 2 이상인 경우, 2 이상의 L_{13} 은 서로 동일하거나 상이하고, c14가 2 이상인 경우, 2 이상의 L_{14} 는 서로 동일하거나 상이하고, c15가 2 이상인 경우, 2 이상의 L_{15} 는 서로 동일하거나 상이하고,

Ar₁ 및 Ar₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 3가 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환 또는 비치환된 3가 C₁-C₃₀헤



테로시클릭 그룹 및 로 표시된 그룹이고, *'', *''' 및 *''''는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

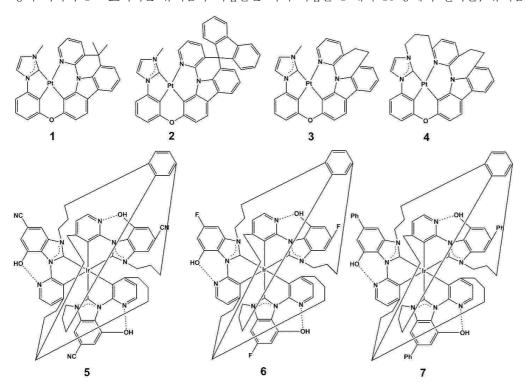
cll 및 cl2는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, cl1이 2 이상인 경우, 2 이상의 L_{11} 은 서로 동일하거나 상이하고, cl2가 2 이상인 경우, 2 이상의 L_{12} 는 서로 동일하거나 상이하고,

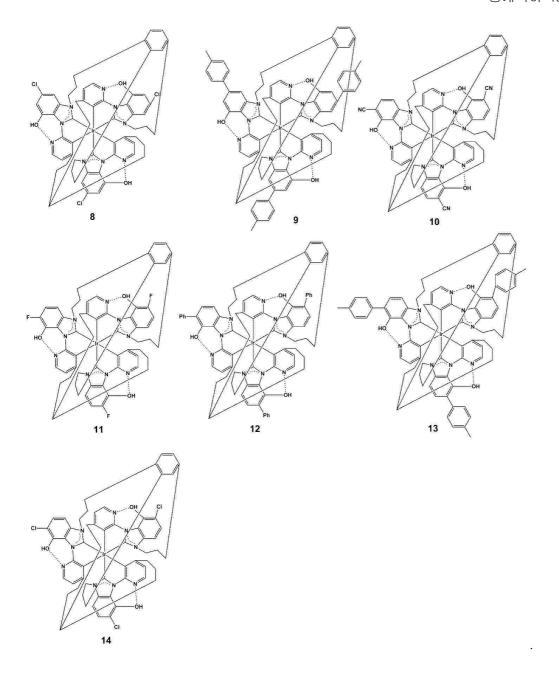
R_{1a} 내지 R_{1c}, R_{3a} 내지 R_{3b}, R_{15a} 내지 R_{15b}, R_{21a} 내지 R_{21c}, R_{22a} 내지 R_{22c}, R_{23a} 내지 R_{23b}, R_{24a} 내지 R_{24b}, R_{25a} 내지 R_{25b} 및 R₃₀은 각각, 제1항 중 R₁, R₃, R₁₅, R₂₁ 내지 R₂₅에 대한 정의를 참조하고, R₂, R₄, R₅ 및 R₁₁ 내지 R₁₃은 각 각, 제1항 중 R₂, R₄, R₅ 및 R₁₁ 내지 R₁₃에 대한 정의를 참조한다.

청구항 20

제8항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 14 중에서 선택된, 유기금속 화합물:





발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 유기금속 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

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

[0003] 상기 유기 발광 소자는 기판 상부에 제1전극이 배치되어 있고, 상기 제1전극 상부에 정공 수송 영역(hole transport region), 발광층, 전자 수송 영역(electron transport region) 및 제2전극이 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 상기 제1전극으로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 제2전극으로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상

태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0004] 신규 유기금속 화합물 및 이를 포함한 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 2-1> <화학식 2-2>

$$R_{12}$$
 R_{13}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{15}
 R_{14}
 R_{15}
 R_{14}
 R_{15}
 R

[0010] <화학식 3>

[0009]

[0011]

$$(R_{21})_{b21}$$
 $(T_{21})_{a21}$
 $(R_{22})_{b22}$
 $(R_{23})_{b23}$

[0012] 상기 화학식 1 중,

[0013] M은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테늄(Ru), 오스뮴(Os), 티탄 (Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고;

[0014] 상기 화학식 1 중, L₁은 상기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시되는 리간드이고, n1은 1, 2 또는 3이고, n1이 2 이상 인 경우, 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고,

[0015] 상기 화학식 1 중, L₂는 상기 화학식 3으로 표시되는 리간드이고, n2는 0, 1 또는 2이고, n2가 2 이상인 경우, 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하고,

- [0016] 상기 화학식 1 중, n1+n2는 2 또는 3이고,
- [0017] 상기 화학식 1 중, n1개의 L₁과 n2개의 L₂는 선택적으로, 단일 결합, 제1연결기 또는 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 통하여 서로 연결될 수 있고,
- [0019] 상기 화학식 2-1 중, A₁은 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;
- [0020] 상기 화학식 2-1 중, X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로, N 또는 C(R₃)이고;
- [0021] 상기 화학식 2-2 중, X₁₁ 및 X₁₂는 C(R₁₅)이고, X₁₃은 N 또는 C(R₁₅)이고;
- [0023] 상기 화학식 2-1, 2-2 및 3 중, R₁ 내지 R₅, R₁₁ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴 기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴 기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴다오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테 로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다한 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=0)(Q₁), -S(=0)₂(Q₁) 및 -P(=0)(Q₁)(Q₂) 중 에서 선택되고,
- [0024] 상기 화학식 2-1 중, b1은 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, b1이 2 이상인 경우, 2 이상의 R₁은 서로 동일하 거나 상이하고,
- [0025] 상기 화학식 3 중, b21 내지 b23은 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b21이 2 이상인 경우, 2 이상의 R₂₁은 서로 동일하거나 상이하고, b22가 2 이상인 경우, 2 이상의 R₂₂는 서로 동일하거나 상이하고, b23이 2 이상인 경우, 2 이상의 R₂₃은 서로 동일하거나 상이하고,
- [0026] 상기 화학식 2-1, 2-2 및 2-3 중, b1 개의 R₁, R₂, R₃, R₁₁ 내지 R₁₄, R₁₅, b21개의 R₂₁, b22개의 R₂₂, b23개의 R₂₃, R₂₄ 및 R₂₅ 중 이웃한 2개는 선택적으로, 서로 연결되어, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0027] 상기 화학식 3 중, a21은 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, a21이 2 이상인 경우, 2 이상의 T₂₁은 서로 동일하 거나 상이하고,
- [0028] 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, * 및 *'는 화학식 1에서 M과의 결합 사이트이고, 상기 화학식 1 및 3 중, *'' 및 *'''는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,
- [0029] 상기 치환된 C_5 - C_{30} 카보시클릭 그룹, 치환된 C_1 - C_{30} 혜테로시클릭 그룹, 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환된 C_2 - C_{60} 알케닐 기, 치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환된 C_4 - C_{10} 혜테로시클로알킬기, 치환된 C_4 - C_{10} 이를로알케닐기, 치환된 C_1 - C_{10} 혜테로시클로알케닐기, 치환된 C_6 - C_{60} 아릴

- 기, 치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환된 C_1 - C_{60} 히테로아릴티오기, 치환된 C_1 - C_{60} 이테로아릴티오기, 치환된 C_1 - C_{60} 이테로아릴리오기, 치환된 C_1 - C_{60} 이테로아필리오기, 치환된 C_1 - C_2 - $C_$
- [0030] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기 및 C_1 - C_{60} 알콕시기;
- [0031] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀혜테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀혜테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴지, C₆-C₆₀아릴디오기, C₁-C₆₀혜테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 혜테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=0)(Q₁₁), -S(=0)₂(Q₁₁) 및 -P(=0)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0032] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴디오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로 축합다환 그룹;
- [0033] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴리오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=0)(Q₂₁), -S(=0)₂(Q₂₁) 및 -P(=0)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로 알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴 옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- $\begin{array}{lll} & & -\text{Si}\left(Q_{31}\right)\left(Q_{32}\right)\left(Q_{33}\right), & -\text{N}\left(Q_{31}\right)\left(Q_{32}\right), & -\text{B}\left(Q_{31}\right)\left(Q_{32}\right), & -\text{C}(=0)\left(Q_{31}\right), & -\text{S}(=0)_{2}\left(Q_{31}\right) & \ \ \, \ \, \ \, \ \, \\ & & -\text{P}(=0)\left(Q_{31}\right)\left(Q_{32}\right); & -\text{P}(=0$
- [0035] 중에서 선택되고,
- [0036] 상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알케닐기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알켈기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.
- [0037] 다른 측면에 따르면, 제1전극;
- [0038] 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및
- [0039] 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고,
- [0040] 하기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0041] 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고휘도, 고효율 및 장수명을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0042] 도 1 내지 4는 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 각각 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0043] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0044] <화학식 1>

[0045] $M(L_1)_{n1}(L_2)_{n2}$

[0048]

[0050]

[0052]

[0046] 상기 화학식 1 중, M은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테늄(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택된다.

[0047] 일 구현예를 따르면, 상기 M은 Pt, Ir, Pd, Cu, Ag 및 Au 중에서 선택될 수 있다.

예를 들어, 상기 M은 Pt 또는 Ir일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0049] <화학식 2-1> <화학식 2-2>

$$R_{12}$$
 R_{13}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{14}
 R_{15}
 R_{15}
 R_{15}
 R_{14}
 R_{15}
 R

[0051] <화학식 3>

$$(R_{21})_{b21}$$
 $(T_{21})_{a21}$
 $(R_{22})_{b22}$
 $(R_{23})_{b23}$

[0053] 상기 화학식 1 중, L₁은 상기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시되는 리간드이고, n1은 1, 2 또는 3이고, n1이 2 이상 인 경우, 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고,

[0054] 상기 화학식 1 중, L₂는 상기 화학식 3으로 표시되는 리간드이고, n2는 0, 1 또는 2이고, n2가 2 이상인 경우, 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하고,

[0055] 상기 화학식 1 중, n1+n2는 2 또는 3이다.

[0056] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, n1+n2는 2이고, M은 Pt이거나, n1+n2는 3이고, M은 Ir일 수 있다.

[0057] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, n1은 1이고, n2는 1이거나, n1은 3이고, n2는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0058] 상기 유기금속 화합물은, 4배위 또는 6배위 리간드 및 금속 원자(M1)를 포함하고, 상기 유기금속 화합물의 ³MC 상태(triplet metal centered state)의 에너지 준위(E3MC)가 상기 유기금속 화합물의 ³MLCT 상태(triplet metal-to-ligand charge transfer state)의 에너지 준위(E3MLCT)보다 높을 수 있다.
- [0059] 예를 들어, 상기 유기금속 화합물이 E₃ ≥ 5 kcal/mol을 만족하고, 상기 E₃는 하기 식 1에 의하여 정의될 수 있다:
- [0060] <식 1>
- [0061] $E_3 = ||E_{MLCT}| |E_{MC}||$
- [0062] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물이 E₃ ≥ 5 kcal/mol를 만족할 수 있다. 다른 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 E₃ ≥ 8 kcal/mol, 예를 들어 E₃ ≥ 19 kcal/mol, 예를 들어 E₃ ≥ 30 kcal/mol을 만족할 수 있다.
- [0063] 예를 들어, 상기 6배위 리간드는 헤미케이지(hemicage) 또는 풀케이지(fullcage) 구조를 가질 수 있다.
- [0064] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 5 kcal/mol ≤ E₃ ≤ 50 kcal/mol, 예를 들어 8 kcal/mol ≤ E₃ ≤ 30 kcal/mol을 만족할 수 있다.
- [0065] 상기 유기금속 화합물이 상기 E₃의 범위를 만족할 때, 상기 유기금속 화합물의 ³MCLT 상태에서 비발광 상태인 ³MC 상태로의 전이 확률이 감소하여 들뜸 상태에서의 안정성이 우수하고, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자의 효율 및 수명이 증가될 수 있다.
- [0066] 상기 화학식 1 중, n1개의 L₁과 n2개의 L₂는 선택적으로, 단일 결합, 제1연결기 또는 치환 또는 비치환된 C₅-C₆¬카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₁-Cஞ헤테로시클릭 그룹을 통하여 서로 연결될 수 있고,
- [0067] 상기 제1연결기는 *''-N(R₄)-*''', *''-B(R₄)-*''', *''-P(R₄)-*''', *''-C(R₄)(R₅)-*''', *''-Si(R₄)(R₅)-*''', *''-Ge(R₄)(R₅)-*''', *''-S-*''', *''-Ge(R₄)(R₅)-*''', *''-S(=0)₂-*''', *''-C(R₄)=*', *''=C(R₄)-*''', *''-C(R₄)=C(R₅)-*''', *''-C(=S)-*''' 및 *''-C≡C-*''' 중에서 선택된다.
- [0068] 일 구현예를 따르면, 상기 n1 및 n2는 1이고, L,은 화학식 2-1로 표시되는 그룹이고,
- [0069] 상기 b1 개의 R_1 중 하나와 인접한 b23 개의 R_{23} 중 하나는 단일 결합 또는 제1연결기를 통하여 연결될 수 있다.
- [0070] 예를 들어, 상기 b1 개의 R_1 중 하나와 인접한 b23 개의 R_{23} 중 하나는 제1연결기를 통하여 연결되고, 상기 제1 연결기는 *''-0-*'''일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0071] 다른 구현예를 따르면, 상기 n1은 3이고, L1은 화학식 2-2로 표시되는 그룹이고,
- [0072] 상기 3개의 L₁ 중 X₁₃은 모두 C(R₁₅)이고,
- [0073] 상기 3개의 L_1 중 3개의 R_{14} 는 서로 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테 로시클릭 그룹을 통하여 연결되고,
- [0074] 상기 3개의 L_1 중 3개의 R_{15} 는 서로 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테 로시클릭 그룹을 통하여 연결될 수 있다.
- [0075] 상기 화학식 2-1 중, A₁은 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택된다.
- [0076] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 2-1 중, A₁은,
- [0077] 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클

로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 이속사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아드리아졸 그룹, 이소티아드리아졸 그룹, 미라졸 그룹, 티아드리아졸 그룹, 이소티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 1,2,4-트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹, 트리아자실롤 그룹, 시클로 핵산 그룹, 및 시클로핵센 그룹;

- [0078] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헨틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐 기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐 기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸 일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다 지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 이소퀴 놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 벤조퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤즈이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤 조티오페닐기, 벤조실롤일기, 벤조티아졸일기, 벤조이소티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 벤조이소옥사졸일기, 트리 아졸일기, 테트라졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조 벤조카바졸일기, 나프토벤조퓨라닐기, 티오페닐기, 디벤조실롤일기, 나프토벤조티오페닐기, 나프토벤조실롤일기, 디벤조카바졸일기, 디나프토퓨라닐기, 디나프토티오페닐기, 디나프토실롤일기, 이미다조피 리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 옥사졸로피리디닐기, 티아졸로피리디닐기, 벤조나프티리디닐기, 아자플루오레 닐기, 아자스파이로-바이플루오레닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오페닐기, 아자디벤 조실롤일기, 인데노피롤일기, 인돌로피롤일기, 인데노카바졸일기, 인돌로카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=0)(Q₃₁), -S(=0)(Q₃₁), -S(=0)₂(Q₃₁), -P(=0)(Q₃₁)(Q₃₂) 및 -P(=S)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 이속사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 이소티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 1,2,4-트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹, 트리아자실롤 그룹, 시클로헥산 그룹, 및 시클로헥센 그룹; 중에서 선택되고,
- [0079] Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴리오기, C₁-C₆₀헤테로아릴리오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중에서 선택될 수 있다.
- [0080] 예를 들어, 상기 A₁은 벤젠 그룹 및 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, 및 C₁-C₂₀알콕시기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 벤젠 그룹; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0081] 상기 화학식 2-1 중, X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로, N 또는 C(R₃)이고; 상기 화학식 2-2 중, X₁₁ 및 X₁₂는 C(R₁₅)이고, X₁₃은 N 또는 C(R₁₅)이다.
- [0082] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 2-1 중, X₁ 내지 X₂는 C(R₃)이고, 상기 화학식 2-2 중, X₁₃은 C(R₁₅)일 수 있다.
- [0084] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 3 중, T₂₁은 *''-C(R₂₄)(R₂₅)-*'''이고, a21은 1 또는 2일 수 있다.

- [0085] 상기 화학식 2-1, 2-2 및 3 중, R₁ 내지 R₅, R₁₁ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀해테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀해테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀해테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴 기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴디오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀해테 로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 해테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=0)(Q₁), -S(=0)₂(Q₁) 및 -P(=0)(Q₁)(Q₂) 중 에서 선택되고,
- [0086] 상기 화학식 2-1 중, b1은 1 내지 6의 정수 중에서 선택되고, b1이 2 이상인 경우, 2 이상의 R₁은 서로 동일하 거나 상이하고,
- [0087] 상기 화학식 3 중, b21 내지 b23은 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, b21이 2 이상인 경우, 2 이상의 R₂₁은 서로 동일하거나 상이하고, b22가 2 이상인 경우, 2 이상의 R₂₂는 서로 동일하거나 상이하고, b23이 2 이상인 경우, 2 이상의 R₂₃은 서로 동일하거나 상이하고,
- [0088] 상기 화학식 2-1, 2-2 및 2-3 중, b1 개의 R₁, R₂, R₃, R₁₁ 내지 R₁₄, R₁₅, b21개의 R₂₁, b22개의 R₂₂, b23개의 R₂₃, R₂₄ 및 R₂₅ 중 이웃한 2개는 선택적으로, 서로 연결되어, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀혜테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.
- [0089] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 2-1, 2-2 및 3 중, R₁ 내지 R₅, R₁₁ 내지 R₁₅ 및 R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기;
- [0090] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, 및 C₁-C₂₀알콕시기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0091] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 피롤일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 및 트리아지닐기; 및
- [0092] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로렉실기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지 닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸 리닐기, 시놀리닐기, 및 트리아지닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=0)(Q₃₁), -S(=0)₂(Q₃₁) 및 -P(=0)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로렉실기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 인다졸일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴 놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 및 트리아지닐기; 및
- [0093] $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-C(=0)(Q_1)$, $-S(=0)_2(Q_1)$ 및 $-P(=0)(Q_1)(Q_2)$;
- [0094] 중에서 선택되고,
- [0095] Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로,
- [0096] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기, C₁-C₂₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₂₀아릴기, C₁-C₂₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0097] 중에서 선택될 수 있다.

[0098] 예를 들어, 상기 화학식 2-1 중, R₂는 C₁-C₂₀알킬기, -N(Q₁)(Q₂) 및 페닐기; 및 C₁-C₂₀알킬기로 치환된, C₁-C₂₀알킬기, -N(Q₁)(Q₂) 및 페닐기; 중에서 선택되고,

[0099] 상기 Q₁ 및 Q₂는 C₁-C₂₀알킬기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0100] 예를 들어, 상기 화학식 2-2 중, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로, 수소, -F, -Cl, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기 및 페닐 기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0101] 상기 화학식 3 중, a21은 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, a21이 2 이상인 경우, 2 이상의 T₂₁은 서로 동일하 거나 상이하다.

[0102] 상기 화학식 2-1 및 2-2 중, * 및 *'는 화학식 1에서 M과의 결합 사이트이고, 상기 화학식 1 및 3 중, *'' 및 *'''는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0103] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-5 중 어느 하나로 표 시된 그룹일 수 있다:

[0106] 상기 화학식 1-1 내지 1-5 중,

[0104]

[0105]

[0107] L₁₁ 내지 L₁₅는 서로 독립적으로, 단일 결합, *''-N(R₄)-*''', *''-B(R₄)-*''', *''-P(R₄)-*''', *''-C(R₄)(R₅)-

*''', *''-Si(R₄)(R₅)-*''', *''-Ge(R₄)(R₅)-*''', *''-S-*''', *''-Se-*''', *''-O-*''', *''-C(=0)-*'''', *''-S(=0)-*'''', *''-S(=0)-*'''', *''-C(R₄)=*', *''=C(R₄)-*''', *''-C(R₄)=C(R₅)-*''', *''-C(=S)-*''' 및 *''-C≡C-*''' 중에서 선택되고,

[0108] c11 내지 c15는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, c11이 2 이상인 경우, 2 이상의 L₁₁은 서로 동일하거나 상이하고, c12가 2 이상인 경우, 2 이상의 L₁₂는 서로 동일하거나 상이하고, c13이 2 이상인 경우, 2 이상의 L₁₃은 서로 동일하거나 상이하고, c14가 2 이상인 경우, 2 이상의 L₁₄는 서로 동일하거나 상이하고, c15가 2 이상인 경우, 2 이상의 L₁₅는 서로 동일하거나 상이하고,

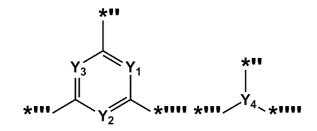
[0109] Ar $_1$ 및 Ar $_2$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 3가 C_5 - C_{30} 카보시클릭 그룹, 치환 또는 비치환된 3가 C_1 - C_{30} 혜

[0110] c11 및 c12는 서로 독립적으로, 1 내지 3의 정수 중에서 선택되고, c11이 2 이상인 경우, 2 이상의 L₁₁은 서로 동일하거나 상이하고, c12가 2 이상인 경우, 2 이상의 L₁₂는 서로 동일하거나 상이하고,

[0111] R_{1a} 내지 R_{1c}, R_{3a} 내지 R_{3b}, R_{15a} 내지 R_{15b}, R_{21a} 내지 R_{21c}, R_{22a} 내지 R_{22c}, R_{23a} 내지 R_{23b}, R_{24a} 내지 R_{24b}, R_{25a} 내지 R_{25b} 및 R₃₀은 각각, 제1항 중 R₁, R₃, R₁₅, R₂₁ 내지 R₂₅에 대한 정의를 참조하고, R₂, R₄, R₅ 및 R₁₁ 내지 R₁₃은 각 각, 제1항 중 R₂, R₄, R₅ 및 R₁₁ 내지 R₁₃에 대한 정의를 참조한다.

[0112] 예를 들어, 상기 Ar₁ 및 Ar₂는 서로 독립적으로, 하기 화학식 2A 또는 2B로 표시된 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0113] <화학식 2A> <화학식 2B>

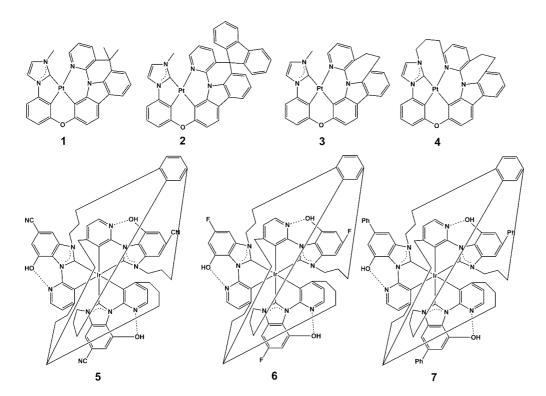


[0115] 상기 화학식 2A 및 2B 중,

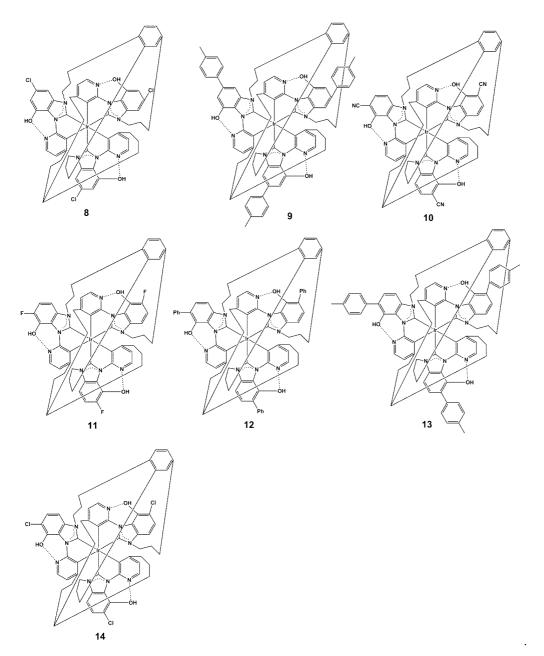
[0114]

[0116] Y₁ 내지 Y₄는 서로 독립적으로, N 또는 C(R₄₀)이고, *'', *''' 및 *''''는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0117] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 14 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0118]



[0119] 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 상기 화학식 2-2로 표시되는 리간드 중, 특정한 위치에 히드록실기 (-OH기) 및 질소 원자를 반드시 포함함으로써, 이웃한 리간드의 히드록실기와 질소 원자 간의 수소 결합에 기인 한 인력 상호 작용 에너지(attractive interaction energy) 획득을 통해, 안정한 청색 인광을 발휘할 수 있다.

[0120] 또한, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 상기 화학식 3으로 표시되는 리간드와 같이, 카바졸 모이어티와 피리딘 모이어티가 링커(T₂₁)을 통해 반드시 연결되는 구조를 가짐으로써, 삼중항에서의 리간드 파열 (rupture)에 필요한 에너지를 크게 상승시키는 메커니즘에 의해 소자의 수명 및 효율이 향상되는 효과를 발휘할수 있다.

[0121] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은, 선택적으로 상기 화학식 2-2로 표시되는 리간드를 3개 포함할 경우, 상기 3개의 리간드들이 화학식 2A 또는 2B로 표시되는 그룹(클리핑 링커)에 의해 서로 연결되는 구조를 가짐으로써, 3차원의 입체적인 헤미케이지 또는 풀케이지 구조의 6배위 리간드를 가지며, 들뜬 상태에서도 화합물의 안정성 및 내구성이 우수하다.

[0122] 또한, 상기 클리핑 링커가 리간드에 포함된 카보시클릭 그룹 또는 헤테로시클릭 그룹들을 서로 연결하고 있어, 상기 유기금속 화합물을 유기 발광 소자에 적용할 경우에, 리간드 분해(ligand rupture)에 의해 삼중항 여기자 (triplet exciton)가 비발광 상태인 ³MC 상태로 전이되는 현상이 방지될 수 있어 들뜸 상태에서의 안정성이 우수하며 유기 발광 소자의 수명 및 효율이 우수하다.

- [0123] 또한, 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물이 전술한 E₃의 범위를 만족할 수 있고, 이때 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물의 ³MCLC 상태에서 비발광 상태인 ³MC 상태로의 전이 확률이 감소하여 들뜸 상태에서의 안정성이 우수하며, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자의 효율 및 수명이 증가될 수 있다.
- [0124] 상기 유기금속 화합물은 청색광을 방출할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은, 440 nm 이상 및 490 nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 청색광(배면 발광 CIE_{x,y} 색좌표 X=0.13, Y=0.05 ~ 0.18)을 방출할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은, 청색광을 방출하는 유기 발광 소자 제작에 유용하게 사용될 수 있다.
- [0125] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0126] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은 발광층에 포함될 수 있다. 상기 발광층에 포함된 유기금속 화합물은 도펀트로서의 역할을 수 있다. 또는, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극의 외측에 위치한 캡핑층 재료로 사용될 수 있다.
- [0127] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0128] 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.
- [0129] 예를 들어, 상기 유기층은, 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1은 발광층에 존재하고 상기 화합물 2는 전자 수송 영역에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0130] 일 구현예에 따르면,
- [0131] 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 애노드이고,
- [0132] 상기 유기 발광 소자의 제2전극은 캐소드이고,
- [0133] 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고,
- [0134] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,
- [0135] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0136] 본 명세서 중 "유기층"은 상기 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 모든 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"의 층에 포함된 물질이 유기물로 한정되는 것은 아니다.
- [0137] 다른 구현예에 따르면, 상기 발광층에 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물이 포함되어 있고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층 중 호스트의 함량이 상기 발광층 중 상기 유기금속 화합물의 함량보다 클 수 있다.
- [0138] 일 구현예에 따르면, 상기 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함하고, 상기 전자 저지층에 상기 유기금속 화합 물이 포함되어 있거나;
- [0139] 또는 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함하고, 상기 정공 저지층에 상기 유기금속 화합물이 포함될 수 있다.

- [0140] 일 구현예에 따르면, 상기 정공 수송 영역이 LUMO 에너지 준위가 -3.5eV 보다 낮은 p-도펀트를 포함할 수 있다.
- [0141] [도 1에 대한 설명]
- [0142] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 상기 유기 발광 소자(10)는 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)을 포함한다.
- [0143] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0144] [제1전극(110)]
- [0145] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0146] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 중착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(110)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록, 제1전극용 물질은, 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다.
- [0147] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0148] 상기 제1전극(110)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(110)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0149] [유기층(150)]
- [0150] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.
- [0151] 상기 유기층(150)은, 상기 제1전극(110)과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역(hole transport region) 및 상기 발광층과 상기 제2전극(190) 사이에 개재된 전자 수송 영역(electron transport region)을 더 포함할 수 있다.
- [0152] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]
- [0153] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0154] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.
- [0155] 예를 들어, 상기 정공 수송 영역은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조를 갖거나, 제1전극(110)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층/정공 수송층, 정공 주입층/정공 수송층/발광 보조층, 정공 주입층/발광 보조층, 정공 수송층/발광 보조층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 다층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0156] 상기 정공 수송 영역은, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB(NPD), β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, 메틸화된-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine (4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid (폴리아닐 린/도데실벤젠술폰산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-예 틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트))), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캠퍼술폰산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할

수 있다:

[0158]

[0157]

[0159]

[0160]

[0161] <화학식 202>

[0162]

[0163] 상기 화학식 201 및 202 중,

[0164] L_{201} 내지 L_{204} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시 클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향 족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

L₂₀₅은, *-O-*', *-S-*', *-N(Q₂₀₁)-*', 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬렌기, 치환 또는 비치환된 [0165] C_2-C_{20} 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬렌기,

치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 혜테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 혜테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 혜테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 혜테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 혜테로하를 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 혜테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

- [0166] xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,
- [0167] xa5는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,
- [0168] R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 및 Q₂₀₁은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤 테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴디오기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴디오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0169] 예를 들어, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁과 R₂₀₂는, 선택적으로(optionally), 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페 닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있고, R₂₀₃과 R₂₀₄는, 선택적으로, 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페 닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0170] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,
- [0171] L₂₀₁ 내지 L₂₀₅는 서로 독립적으로,
- [0172] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페 날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조타라플일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조스를일렌기 및 피리디닐렌기; 및
- [0173] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁- C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐 기, 비페닐기, 터페닐기, C1-C10알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헌탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐 기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐 기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코 로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페 닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오 레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오 란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜 타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌 기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조 티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;
- [0174] 중에서 선택되고,
- [0175] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0176] 다른 구현예에 따르면, xal 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0177] 또 다른 구현예에 따르면, xa5는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.

- [0178] 또 다른 구현예에 따르면, R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 및 Q₂₀₁은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레 닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 페세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세 닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조 퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조류라닐기, 디벤조리오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0179] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁- C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로렉세닐기, 페닐 기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐 기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐 기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코 로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페 닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐 기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루 오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 페세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜 타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조 실롤일기 및 피리디닐기;
- [0180] 중에서 선택될 수 있고,
- [0181] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0182] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₃ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0183] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및
- [0184] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로렌딜기, 시클로렌딜기, 시클로렌테닐기, 시클로렉세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 다벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;
- [0185] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0186] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R₂₀₁과 R₂₀₂은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/ 또는 ii) R₂₀₃과 R₂₀₄은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0187] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 중 적어도 하나는,
- [0188] 카바졸일기; 및
- [0189] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로펜틸기, 시클로펜틸기, 시클로펜테닐기, 시클로렉세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;

[0190] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0191] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201-1로 표시될 수 있다:

[0192] <화학식 201-1>

$$R_{215}$$
 R_{213}
 R_{214}
 R_{216}
 R_{213}
 R_{214}
 R_{216}
 R_{215}
 R_{215}
 R_{215}
 R_{215}
 R_{215}
 R_{216}

[0193] [0194]

예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201-2로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0195] <화학식 201-2>

$$R_{214}$$
 R_{214}
 R_{213}
 R_{214}
 R_{215}
 R_{217}
 R_{217}
 R_{203}
 R_{203}

[0196] [0197]

또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201-2(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0198] <화학식 201-2(1)>

 R_{213} R_{214} R_{214} R_{213} R_{215} R_{217} R_{217} R_{218} R_{219} R_{219}

[0199] [0200]

상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:

[0201] <화학식 201A>

$$R_{215}$$
 R_{211}
 R_{213}
 R_{214}
 R_{216}
 R_{215}
 R_{211}
 R_{216}
 R_{216}

[0202] [0203]

예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것 은 아니다:

[0204] <화학식 201A(1)>

$$R_{211}$$
 R_{213}
 R_{214}
 R_{213}
 R_{214}
 R_{215}
 R_{215}
 R_{217}
 R_{217}

[0205] [0206]

또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0207] <화학식 201A-1>

[0208] [0209]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202-1로 표시될 수 있다:

[0210] <화학식 202-1>

$$R_{215}$$
 R_{216}
 R_{202}
 R_{204}

[0211]

[0212] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202-1(1)로 표시될 수 있다:

[0213] <화학식 202-1(1)>

$$R_{215}$$
 R_{216}
 R_{202}
 R_{204}

[0214] [0215]

한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

[0216] <화학식 202A>

$$R_{215}$$
 R_{216}
 R_{202}
 R_{203}
 R_{204}

[0217] [0218]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0219] <화학식 202A-1>

[0220] [0221]

[0224]

상기 화학식 201-1, 201-2, 201-2(1), 201A, 201A(1), 201A-1, 202-1, 202-1(1), 202A 및 202A-1 중,

[0222] L₂₀₁ 내지 L₂₀₃, xa1 내지 xa3, xa5 및 R₂₀₂ 내지 R₂₀₄에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0223] L₂₀₅는 페닐렌기 및 플루오레닐렌기 중에서 선택되고,

X₂₁₁은 O, S 및 N(R₂₁₁) 중에서 선택되고,

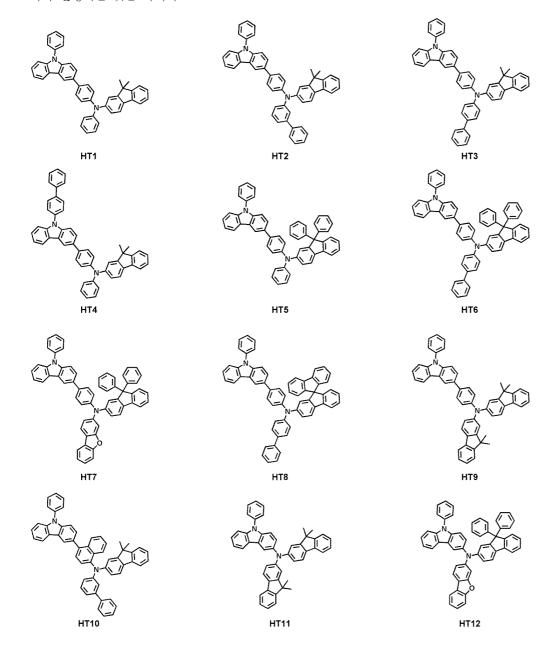
[0225] X₂₁₂은 O, S 및 N(R₂₁₂) 중에서 선택되고,

[0226] R₂₁₁ 및 R₂₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀₃에 대한 설명을 참조하고,

[0227] R₂₁₃ 내지 R₂₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노 기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로펜틸기, 시클로렌틸기, 시클로펜틸기, 사를로펜틸기, 사를로펜틸기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, আ탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오랜테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이

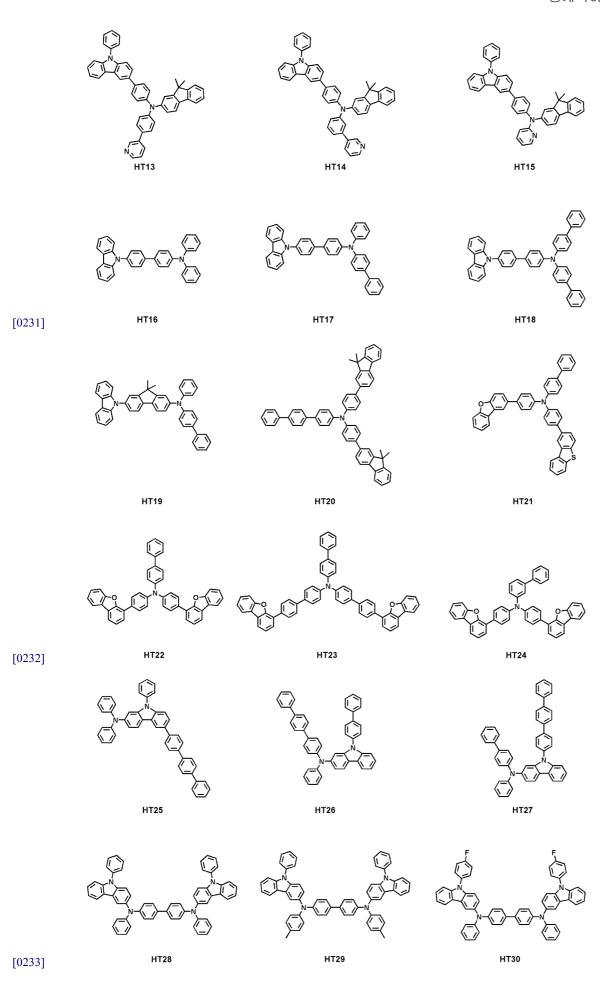
소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0228] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT48 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0229]

[0230]



- [0237] 상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 하나를 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 9000Å, 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.
- [0238] 상기 발광 보조층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가 시키는 역할을 하는 층이고, 상기 전자 저지층은 전자 수송 영역으로부터의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다. 상기 발광 보조층 및 전자 저지층에는 상술한 바와 같은 물질이 포함될 수 있다.
- [0239] [p-도펀트]
- [0240] 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.
- [0241] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.
- [0242] 일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 보다 낮을 수 있다.
- [0243] 상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0244] 예를 들어, 상기 p-도펀트는,
- [0245] TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체;
- [0246] 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;
- [0247] HAT-CN (1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및
- [0248] 하기 화학식 221로 표시되는 화합물;
- [0249] 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0250] <HAT-CN> <F4-TCNQ>

[0252] <화학식 221>

[0251]

[0253]

- [0254] 상기 화학식 221 중,
- [0255] R₂₂₁ 내지 R₂₂₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클

로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 히테로하릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{20} 라함 및 치환 또는 비치환된 C_1 - C_2 0라기 및 기가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되되, 상기 C_2 1 내지 C_2 23 중 적어도 하나는 시아노기, C_1 5 - C_1 7 - C_1 8 시환된 C_1 - C_2 0라기 및 C_1 7 - C_2 1 시환된 C_1 - C_2 0라기 및 C_1 7 - C_2 1 시환된 C_1 1 - C_2 1 시환된 C_1 1 - C_2 2 시환된 C_1 2 시환된 C_1 2 시환된 C_1 3 - C_2 4 시환된 C_1 4 - C_2 4 시환된 C_1 4 시한된 C_1 5 시환된 C_1 5 시참 C_1 5 시참 C

- [0256] [유기층(150) 중 발광층]
- [0257] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.
- [0258] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 또한, 상기 인광 도펀트는 본 명세서 중 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.
- [0259] 상기 발광충 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0260] 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.
- [0261] [발광층 중 호스트]
- [0262] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0263] <화학식 301>
- [0264] $[Ar_{301}]_{xb11} [(L_{301})_{xb1} R_{301}]_{xb21}$
- [0265] 상기 화학식 301 중,
- [0266] Ar₃₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0267] xb11은 1, 2 또는 3이고,
- [0268] L₃₀₁은, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀ 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0269] xb1는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0270] R₃₀₁은, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₃₀₁)(Q₃₀₂)(Q₃₀₃), -N(Q₃₀₁)(Q₃₀₂), -B(Q₃₀₁)(Q₃₀₂), -C(=0)(Q₃₀₁), -S(=0)₂(Q₃₀₁) 및 -P(=0)(Q₃₀₁)(Q₃₀₂) 중에서 선택되고,

- [0271] xb21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0272] Q₃₀₁ 내지 Q₃₀₂는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에 서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0273] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar₃₀₁은,
- [0274] 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹; 및
- [0275] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=0)(Q₃₁), -S(=0)₂(Q₃₁) 및 -P(=0)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페낟트 렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피 센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;
- [0276] 중에서 선택되고.
- [0277] Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0278] 상기 화학식 301 중 xb11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₃₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0279] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:
- [0280] <화학식 301-1>

$$\begin{bmatrix} R_{303} - (L_{303})_{xb3} \end{bmatrix}_{xb23} A_{301} A_{302} \begin{bmatrix} (L_{302})_{xb2} - R_{302} \end{bmatrix}_{xb22}$$

[0282] <화학식 301-2>

[0281]

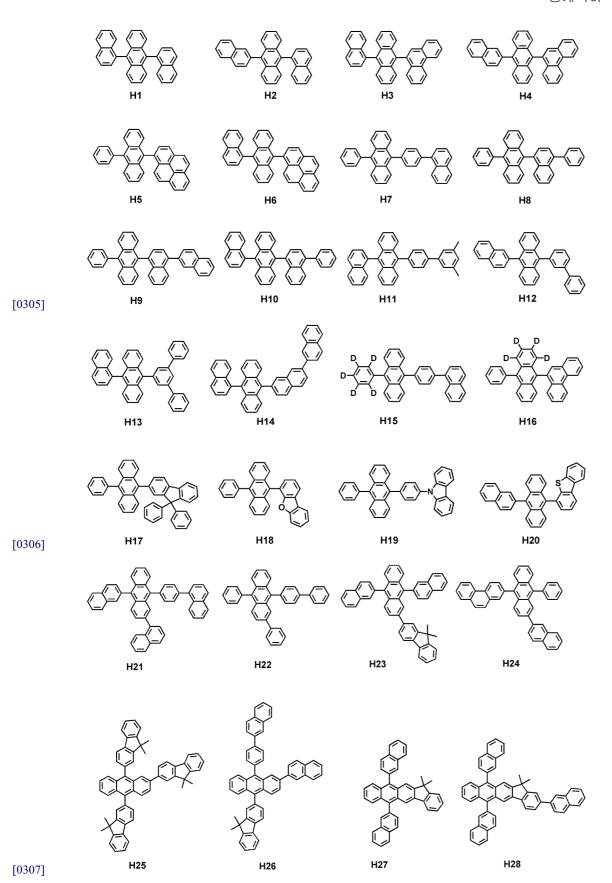
[0283]

$$\begin{bmatrix} R_{303} - (L_{303})_{xb3} & A_{301} \\ R_{311} & A_{302} & R_{312} \\ R_{311} & A_{303} & A_{304} & (L_{302})_{xb2} - R_{302} \end{bmatrix}_{xb22}$$

- [0284] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중
- [0285] A₃₀₁ 내지 A₃₀₄는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 피리딘, 미리미딘, 인덴, 플루오렌, 스파이로-비플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 인돌, 카바졸, 벤조카바졸, 디벤조카바졸, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 나프토퓨란, 벤조나프토퓨란, 디나프토퓨란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 나프토티오펜, 벤조나프토티오펜 및 디나프토티오펜 중에서 선택되고,
- [0286] X₃₀₁은 O, S 또는 N-[(L₃₀₄)_{xb4}-R₃₀₄]이고,

- [0287] R₃₁₁ 내지 R₃₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노 기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=0)(Q₃₁), -S(=0)₂(Q₃₁) 및 -P(=0)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택되고,
- [0288] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,
- [0289] L₃₀₁, xb1, R₃₀₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,
- [0290] L₃₀₂ 내지 L₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L₃₀₁에 대한 설명을 참조하고,
- [0291] xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,
- [0292] R₃₀₂ 내지 R₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R₃₀₁에 대한 설명을 참조한다.
- [0293] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L₃₀₁ 내지 L₃₀₄는 서로 독립적으로,
- [0294] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌 기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페 릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 디벤조리오페닐렌기, 디벤조라오페닐렌기, 티아졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라즈일렌기, 티아졸일렌기, 이소디아졸일렌기, 목사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이오벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및
- 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1 -[0295] C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤 조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐 기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌 일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤 조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일 기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=0)(Q_{31})$, -S(=0)₂(Q₃₁) 및 -P(=0)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플 루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라 닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지 닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌 기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페 나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일 렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;
- [0296] 중에서 선택되고,

- [0297] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.
- [0298] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R₃₀₁ 내지 R₃₀₄는 서로 독립적으로,
- [0299] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조류라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조류라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 프라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조틱아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및
- [0300] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁- C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤 조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐 기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌 일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤 조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일 기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=0)(Q_{31})$, -S(=0)₂(Q₃₁) 및 -P(=0)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아 졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아 크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥 사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;
- [0301] 중에서 선택되고,
- [0302] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.
- [0303] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 알칼리토 금속 착체를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 Be 착체 (예를 들면, 하기 화합물 H55), Mg 착체 및 Zn 착체 중에서 선택될 수 있다.



[0311] [0312]

[0314]

[0315]

[0316]

또는, 상기 호스트는 실리콘-함유 화합물(예를 들면, 하기 실시예에서 사용된 BCPDS 등) 및 포스핀 옥사이드-함 유 화합물(예를 들면, 하기 실시예에서 사용된 POPCPA 등) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0313] 상기 호스트는 1종의 화합물만을 포함하거나, 서로 상이한 2종 이상의 화합물을 포함할 수 있는 등(예를 들면, 하기 실시예의 호스트는 BCPDS 및 POPCPA로 이루어짐), 다양한 변형이 가능하다.

[유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]

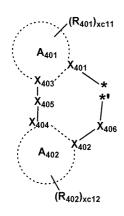
상기 인광 도펀트는 본 명세서 중 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.

또한, 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 401로 표시되는 유기금속 착체를 포함할 수 있다:

[0317] <화학식 401>

[0318] $M(L_{401})_{xc1}(L_{402})_{xc2}$

[0319] <화학식 402>



[0320]

[0321] 상기 화학식 401 및 402 중,

[0322] M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 로듐(Rh) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고,

[0323] L₄₀₁은 상기 화학식 402로 표시되는 리간드 중에서 선택되고, xc1은 1, 2 또는 3이고, xc1이 2 이상일 경우 2 이 상의 L₄₀₁은 서로 동일하거나 상이하고,

[0324] L₄₀₂는 유기 리간드이고, xc2는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고, xc2가 2 이상일 경우 2 이상의 L₄₀₂는 서로 동일하거나 상이하고,

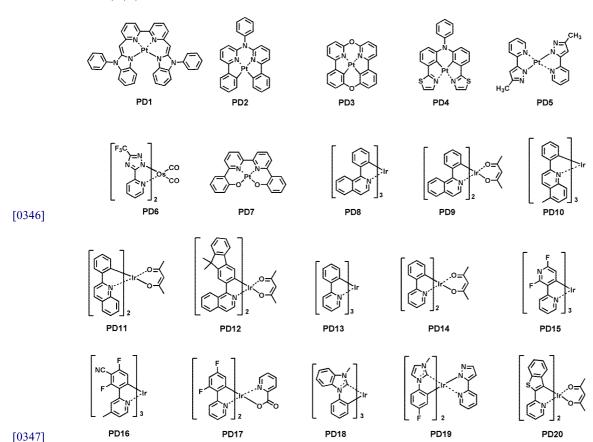
[0325] X₄₀₁ 내지 X₄₀₄는 서로 독립적으로, 질소 또는 탄소이고,

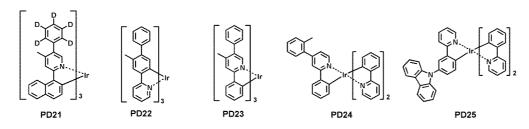
[0326] X₄₀₁과 X₄₀₃은 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고, X₄₀₂와 X₄₀₄는 단일 결합 또는 이중 결합을 통하여 연결되고,

- [0327] A₄₀₁ 및 A₄₀₂는 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0328] X₄₀₅는 단일 결합, *-0-*', *-S-*', *-C(=0)-*', *-N(Q₄₁₁)-*', *-C(Q₄₁₁)(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₂)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₁)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₁)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₁)-*', *-C(Q₄₁₁)=C(Q₄₁₁)-*', *-C(Q₄₁₁)-*', *-C(Q₄₁₁)-*
- [0329] X₄₀₆은 단일 결합, 0 또는 S이고,
- [0330] R₄₀₁ 및 R₄₀₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀시클로알켈기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알켈기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₄₀₁)(Q₄₀₂)(Q₄₀₃), -N(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -B(Q₄₀₁)(Q₄₀₂), -C(=0)(Q₄₀₁), -S(=0)₂(Q₄₀₁) 및 -P(=0)(Q₄₀₁)(Q₄₀₂) 중에서 선택되고, 상기 Q₄₀₁ 내지 Q₄₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, C₆-C₂₀아릴기 및 C₁-C₂₀헤테로아릴기 중에서 선택되고,
- [0331] xc11 및 xc12는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,
- [0332] 상기 화학식 402 중 * 및 *'은 상기 화학식 401 중 M과의 결합 사이트이다.
- [0333] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 A_{401} 및 A_{402} 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 인덴 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란(furan) 그룹, 이미다졸 그룹, 피라질 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸(isoxazole) 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 휘놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 케녹살린 그룹, 퀴누살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 카바졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조퓨란(benzofuran) 그룹, 벤조티오펜 그룹, 인소벤조티오펜 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 데트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 디벤조퓨란(dibenzofuran) 그룹 및 디벤조티오펜 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0334] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 i) X_{401} 은 질소이고, X_{402} 는 탄소이거나, 또는 ii) X_{401} 과 X_{402} 가 모두 질소일 수 있다.
- [0335] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 402 중 R₄₀₁ 및 R₄₀₂는 서로 독립적으로,
- [0336] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, Cl-C20알킬기 및 Cl-C20알콕시기;
- [0337] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 페닐기, 나프틸기, 시클로펜틸기, 시클로렉실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기 및 노르보네닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0338] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;
- [0339] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로렉실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지 닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페 닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로렉실기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보 네닐기 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다

지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및

- $\begin{array}{lll} & & -\text{Si}\left(Q_{401}\right)\left(Q_{402}\right)\left(Q_{403}\right), & -\text{N}\left(Q_{401}\right)\left(Q_{402}\right), & -\text{B}\left(Q_{401}\right)\left(Q_{402}\right), & -\text{C}(=0)\left(Q_{401}\right), & -\text{S}(=0)_{2}\left(Q_{401}\right) & \\ & & & \\ & & & \\ \end{array} \right) \begin{array}{lll} & -\text{P}(=0)\left(Q_{401}\right)\left(Q_{402}\right); & -\text{P}(=0)\left(Q_{401}\right)\left(Q_$
- [0341] 중에서 선택되고,
- [0342] 상기 Q₄₀₁ 내지 Q₄₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0343] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 401 중 xc1이 2 이상일 경우, 2 이상의 L₄₀₁ 중 2개의 A₄₀₁은 선택적으로 (optionally), 연결기인 X₄₀₇을 통하여 서로 연결되거나, 2개의 A₄₀₂는 선택적으로, 연결기인 X₄₀₈을 통하여 서로 연결될 수 있다 (하기 화합물 PD1 내지 PD4 및 PD7 참조). 상기 X₄₀₇ 및 X₄₀₈은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*', *-S-*', *-C(=O)-*', *-N(Q₄₁₃)-*', *-C(Q₄₁₃)(Q₄₁₄)-*' 또는 *-C(Q₄₁₃)=C(Q₄₁₄)-*' (여기서, Q₄₁₃ 및 Q₄₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기임)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0344] 상기 화학식 401 중 L₄₀₂는 임의의 1가, 2가 또는 3가의 유기 리간드일 수 있다. 예를 들어, 상기 L₄₀₂는 할로겐, 디케톤 (예를 들면, 아세틸아세토네이트), 카르복실산(예를 들면, 피콜리네이트), -C(=0), 이소니트릴, -CN 및 포스포러스 함유 물질(예를 들면, 포스핀(phosphine), 포스파이트(phosphite)) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0345] 또는, 상기 인광 도펀트는 예를 들어, 하기 화합물 PD1 내지 PD25 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:





[0348] [0349]

[발광층 중 형광 도펀트]

[0350] 상기 형광 도펀트는 아릴아민 화합물 또는 스티릴아민 화합물을 포함할 수 있다.

[0351] 상기 형광 도펀트는 하기 화학식 501로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

[0352] <화학식 501>

$$Ar_{501} - (L_{503})_{xd3} - N - (L_{502})_{xd2} - R_{502}$$

[0353] [0354]

상기 화학식 501 중,

[0355] Ar₅₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0356] L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시 클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향 족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0357] xd1 내지 xd3는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0358] R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₁₀에테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴디오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0359] xd4는 1 내지 6의 정수 중에서 선택될 수 있다.

[0360] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 Ar₅₀₁은,

[0361] 나프탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹; 및

[0362] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프 탈렌 그룹, 헵탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹 및 인데노페난트렌 그룹;

[0363] 중에서 선택될 수 있다.

[0364] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 L₅₀₁ 내지 L₅₀₃은 서로 독립적으로,

[0365] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌

기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페 릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조 카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기; 및

- [0366] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, Cl-C20알킬기, Cl-C20알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오래닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤 조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 대地조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조라오페닐기, 다판틸렌기, 플루오레닐렌기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 벡자세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 유라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조타라졸일렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조라오크일렌기, 디벤조라오페닐렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조라
- [0367] 중에서 선택될 수 있다.
- [0368] 또 다른 구현에에 따르면, 상기 화학식 501 중 R₅₀₁ 및 R₅₀₂는 서로 독립적으로,
- [0369] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조 퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0370] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, Cl-C20알킬기, Cl-C20알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤 조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 베조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조를입기, 피리디닐기 및 -Si(Q31)(Q32)(Q33) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페란트레닐기, 만트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조타오페닐기, 덴제조라오페닐기, 디벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조
- [0371] 중에서 선택되고,
- [0372] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0373] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 501 중 xd4는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0374] 예를 들어, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물 FD1 내지 FD22 중에서 선택될 수 있다:

[0375]

[0376]

[0377]

[0378]

FD10

FD11

[0384] 또는, 상기 형광 도펀트는 하기 화합물들 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0386]

[0385]

- [0387] [유기층(150) 중 전자 수송 영역]
- [0388] 상기 전자 수송 영역은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0389] 상기 전자 수송 영역은, 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0390] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적충된 전자 수송층/전자 주입층, 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층, 전자 조절층/전자 수송층/전자 주입층, 또는 버퍼층/전자 수송층/전자 주입층 등의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0391] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송 층)은, π 전자 결핍성 함질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0392] 상기 " π 전자 결핍성 함질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 *-N=*' 모이어티를 갖는 C_1 C_{60} 해테로시클릭 그룹을 의미한다.
- [0393] 예를 들어, 상기 "π 전자 결핍성 함질소 고리"는, i) 적어도 하나의 *-N=*' 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹이거나, ii) 적어도 하나의 *-N=*' 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 2 이상이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹이거나, 또는 iii) 적어도 하나의 *-N=*' 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 적어도 하나와, 적어도 하나의 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0394] 상기 π 전자 결핍성 함질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 인다졸, 푸린(purine), 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 프탈라진, 나프티리딘, 퀴녹살린, 퀴나졸린, 시놀린, 페난트리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 벤조이미다졸, 이소벤조티아졸, 벤조옥사졸, 이소벤조옥사졸, 트리아졸, 테트라졸, 옥사디아졸, 트리아진, 티아디아졸, 이미다조피리미딘, 아자카바졸 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0395] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

- [0396] <화학식 601>
- [0397] $[Ar_{601}]_{xe11} [(L_{601})_{xe1} R_{601}]_{xe21}$
- [0398] 상기 화학식 601 중,
- [0399] Ar₆₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0400] xell은 1, 2 또는 3이고,
- [0401] L₆₀₁은, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀ 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0402] xe1는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0403] R₆₀₁은, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴리오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아 릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₆₀₁)(Q₆₀₂)(Q₆₀₃), -C(=0)(Q₆₀₁), -S(=0)₂(Q₆₀₁) 및 -P(=0)(Q₆₀₁)(Q₆₀₂) 중에서 선택되고,
- [0404] 상기 Q₆₀₁ 내지 Q₆₀₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0405] xe21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0406] 일 구현예에 따르면, 상기 xell개의 Ar₆₀₁ 및 xe21개의 R₆₀₁ 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 함질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0407] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar₆₀₁은,
- [0408] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티 오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리디 그룹, 피리디 그룹, 피리디 그룹, 피리디 그룹, 파라진 그룹, 파라진 그룹, 이소 퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아존 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디 아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리민 그룹 및 아자카바졸 그룹; 및
- [0409] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -S(=0)₂(Q₃₁) 및 -P(=0)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 패난트렌 그룹, 앤트라센 그룹, 플루오란 라덴 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 내프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리민 그

룹 및 아자카바졸 그룹;

- [0410] 중에서 선택될 수 있고,
- [0411] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0412] 상기 화학식 601 중 xell이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0413] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.
- [0414] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:
- [0415] <화학식 601-1>

$$R_{613}$$
— $(L_{611})_{xe611}$ — R_{611}
 X_{614}
 X_{615}
 X_{613} — $(L_{613})_{xe613}$
 X_{616}
 $(L_{612})_{xe612}$ — R_{612}

[0417] 상기 화학식 601-1 중,

[0416]

- [0418] X₆₁₄는 N 또는 C(R₆₁₄)이고, X₆₁₅는 N 또는 C(R₆₁₅)이고, X₆₁₆은 N 또는 C(R₆₁₆)이고, X₆₁₄ 내지 X₆₁₆ 중 적어도 하나는 N이고.
- [0419] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,
- [0420] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,
- [0421] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,
- [0422] R₆₁₄ 내지 R₆₁₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0423] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L₆₀₁ 및 L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로,
- [0424] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌 기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 듀라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조타오페닐렌기, 비조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실룔일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리디니닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및
- [0425] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조사졸일기, 디벤조사졸일기, 티아디아졸일기, 목사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 목사대아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기,

퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디널기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오 레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세 닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥 사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐 렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤 조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아 지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐 렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤 조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸 일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;

- [0426] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0427] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0428] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R₆₀₁ 및 R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로,
- [0429] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조 퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라즈일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 꼭사디아졸일기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;
- [0430] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁- C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤 조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐 기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌 일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤 조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일 기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안 트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오 페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아 크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥 사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0431] $-S(=0)_2(Q_{601}) \ \ \c{Q} \ \ -P(=0)(Q_{601})(Q_{602});$

[0432] 중에서 선택되고,

[0435]

[0436]

[0437]

[0438]

ET10

[0433] 상기 Q_{601} 및 Q_{602} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0434] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

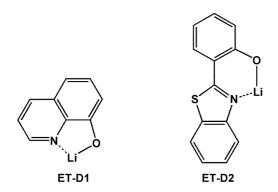
ET12

ET11

[0447] 또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, BAlq, TAZ(3-(Biphenyl-4-yl)-5-(4-tert-butylphenyl)-4-phenyl-4H-1,2,4-triazole) 및 NTAZ 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다.

[0448]

- [0449] 또 다른 예로서, 상기 전자 수송 영역은 포스핀 옥사이드-함유 화합물 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 일 구현예에 따르면, 상기 포스핀 옥사이드-함유 화합물은 전자 수송 영역 중 정공 저지층에 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0450] 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성 또는 전자 조절 특성을 얻을 수 있다.
- [0451] 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.
- [0452] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함 유 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0453] 상기 금속-함유 물질은 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체의 금속 이온은, Li 이온, Na 이온, K 이온, Rb 이온 및 Cs 이온 중에서 선택될 수 있고, 상기 알칼리 토금속 착체의 금속 이온은 Be 이온, Mg 이온, Ca 이온, Sr 이온 및 Ba 이온 중에서 선택될 수 있다. 상기 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시베조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시페닐지리딘, 히드록시페닐지리딘, 히드록시페닐지리딘, 히드록시페닐지라는, 히드록시페닐지라는, 히드록시페닐지라는, 이드록시페닐지라는, 이드록시페닐지라는, 이드록시페닐지라는, 이드록시페닐지라는, 이드록시페닐지라는, 이드록시페닐지라는, 이드록시페닐지라는, 이드록시페닐지라는, 이드록시퍼닐지라는, 이드록시퍼널지라는, 이트록시퍼널지라는, 이트록시크로드, 이트록
- [0454] 예를 들면, 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2을 포함할 수 있다.



[0455]

- [0456] 상기 전자 수송 영역은, 제2전극(190)으로부터의 전자 주입을 용이하게 하는 전자 주입층을 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층은 상기 제2전극(190)과 직접(directly) 접촉할 수 있다.
- [0457] 상기 전자 주입층은 i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이

루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

- [0458] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희 토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합을 포함 할 수 있다.
- [0459] 상기 알칼리 금속은, Li, Na, K, Rb 및 Cs 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li, Na 또는 Cs일 수 있다. 다른 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속은 Li 또는 Cs일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0460] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.
- [0461] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.
- [0462] 상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.
- [0463] 상기 알칼리 금속 화합물은, Li₂0, Cs₂0, K₂0 등과 같은 알칼리 금속 산화물 및 LiF, NaF, CsF, KF, LiI, NaI, CsI, KI 등과 같은 알칼리 금속 할로겐화물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 금속 화합물은, LiF, Li₂0, NaF, LiI, NaI, CsI, KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0464] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO, Ba_xSr_{1-x}O(0<x<1), Ba_xCa_{1-x}O(0<x<1) 등과 같은 알칼리 토금속 화합물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0465] 상기 희토류 금속 화합물은, YbF₃, ScF₃, ScO₃, Y₂O₃, Ce₂O₃, GdF₃, 및 TbF₃ 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은 YbF₃, ScF₃, TbF₃, YbI₃, ScI₃, TbI₃ 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0466] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시피닐옥사디아졸, 히드록시데닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0467] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 회토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합만으로 이루어져 있거나, 상기 유기물을 더 포함할 수 있다. 상기 전자 주입층이 유기물을 더 포함할 경우, 상기 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합은 상기 유기물로 이루어진 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.
- [0468] 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.
- [0469] [제2전극(190)]
- [0470] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극 인 캐소드(cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(190)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합(combination)을 사용할 수 있다.
- [0471] 상기 제2전극(190)은, 리튬(Li), 은(Ag), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag), ITO 및 IZO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정

되는 것은 아니다. 상기 제2전극(190)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다.

- [0472] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0473] [도 2 내지 4에 대한 설명]
- [0474] 한편, 도 2의 유기 발광 소자(20)는 제1캡핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)이 차례로 적 층된 구조를 갖고, 도 3의 유기 발광 소자(30)는 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캡핑층(220)이 차례로 적충된 구조를 갖고, 도 4의 유기 발광 소자(40)는 제1캡핑층(210), 제1전극(110), 유기층(150), 제2전극(190) 및 제2캡핑층(220)이 차례로 적충된 구조를 갖는다.
- [0475] 도 2 내지 4 중 제1전극(110), 유기층(150) 및 제2전극(190)에 대한 설명은 도 1에 대한 설명을 참조한다.
- [0476] 유기 발광 소자(20, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제1전극 (110) 및 제1캡핑층(210)을 지나 외부로 취출될 수 있고, 유기 발광 소자(30, 40)의 유기층(150) 중 발광층에서 생성된 광은 반투과형 전극 또는 투과형 전극인 제2전극(190) 및 제2캡핑층(220)을 지나 외부로 취출될 수 있다.
- [0477] 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220)은 보강 간섭의 원리에 의하여 외부 발광 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다.
- [0478] 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220)은 서로 독립적으로, 유기물로 이루어진 유기 캡핑층, 무기물로 이루어 진 무기 캡핑층, 또는 유기물 및 무기물을 포함한 복합 캡핑층일 수 있다.
- [0479] 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물, 아민계 화합물, 포르핀 유도체 (porphine derivatives), 프탈로시아닌 유도체 (phthalocyanine derivatives), 나프탈로시아닌 유도체 (naphthalocyanine derivatives), 알칼리 금속 착체 및 알칼리 토금속 착체 중에서 선택된 적어도 하나의 물질을 포함할 수 있다. 상기 카보시클릭 화합물, 헤테로시클릭 화합물 및 아민계 화합물은, 선택적으로, 0, N, S, Se, Si, F, Cl, Br 및 I 중에서 선택된 적어도 하나의 원소를 포함한 치환기로 치환될 수 있다.
- [0480] 일 구현예에 따르면, 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 아민계 화합물을 포함할 수 있다.
- [0481] 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화학 식 201로 표시되는 화합물 또는 상기 화학식 202로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0482] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 제1캡핑층(210) 및 제2캡핑층(220) 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로, 상기 화합물 HT28 내지 HT33 및 하기 화합물 CP1 내지 CP5 중에서 선택된 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0483]

- [0484] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1 내지 4를 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0485] 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층은 각각, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여, 소정 영역에 형성될 수 있다.
- [0486] 진공 증착법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 증착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500℃의 증착 온도, 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0487] 스핀 코팅법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 코팅 조건은, 예를 들면, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도 및 약 80℃ 내지 200℃의 열처리 온도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0488] [치환기의 일반적인 정의]
- [0489] 본 명세서 중 C_1 - C_{60} 알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1 - C_{60} 알킬렌기는 상기 C_1 - C_{60} 알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 (divalent) 그룹을 의미한다.
- [0490] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0491] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기, 프로피닐기, 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알 키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0492] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는, -0A₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0493] 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로렉실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알킬렌기는 상기 C_3 - C_{10} 시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0494] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리 아졸리디닐기(1,2,3,4-oxatriazolidinyl), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오페닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖 는 2가 그룹을 의미한다.
- [0495] 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_3 - C_{10} 시클로알케닐렌기는 상기 C_3 - C_{10} 시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0496] 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리 -형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸일기, 2,3-디히드로유라닐기, 2,3-디히드로티오페닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C_1 - C_{10}

헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0497] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0498] 본 명세서 중 C_1 - C_{60} 해테로아릴기는 N, 0, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C_1 - C_{60} 헤테로 아릴렌기는 N, 0, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함되다. 상기 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기 및 C_1 - C_{60} 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0499] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -0A₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기 (arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기기임)를 가리킨다.
- [0500] 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, 탄소수 8 내지 60을 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예에는, 플루오레닐기 등이 포함되다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0501] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상 의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 탄소수 1 내지 60을 가짐)을 의 미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 구체예에는, 카바졸일기 등이 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0502] 본 명세서 중 C_4 - C_{60} 카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 4 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C_4 - C_{60} 카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C_4 - C_{60} 카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌 기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C_4 - C_{60} 카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C_4 - C_{60} 카보시클릭 그룹은 당한 변형이 가능하다.
- [0503] 본 명세서 중 C₂-C₆₀혜테로시클릭 그룹이란, 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹과 동일한 구조를 갖되, 고리-형성 원자로서, 탄소(탄소수는 2 내지 60일 수 있음) 외에, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 그룹을 의미한다.
- [0504] 본 명세서 중, 상기 치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌 기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 해테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중

적어도 하나는,

- [0505] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0506] 중수소, -F, -C1, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=0)(Q₁₁), -S(=0)₂(Q₁₁) 및 -P(=0)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0507] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴디오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로 축합다환 그룹;
- [0508] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=0)(Q₂₁), -S(=0)₂(Q₂₁) 및 -P(=0)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알키기, C₁-C₁₀헤테로시클로알키기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴 옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0509] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=0)(Q_{31})$, $-S(=0)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=0)(Q_{31})(Q_{32})$;
- [0510] 중에서 선택되고.
- [0511] 상기 Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실 기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알퀴닐 기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알 케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.
- [0512] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu^t"은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"는 메톡시기를 의미한다.
- [0513] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.
- [0514] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴 기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.
- [0515] 본 명세서 중 *, *' 및 *"은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.
- [0516] 이하에서, 합성예 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성예 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.
- [0517] [합성예]

[0518] 합성예 1: 화합물 1의 합성

[0519] [0520]

1) 중간체 화합물 [1-A]의 합성

[0521] 1-Bromo-2-nitrobenzene (1.0 eq), 4-methoxy phenylboronic acid (1.2 eq), K₂CO₃ (2.0 eq), 및 0.01g의 Pd(dppl)₂Cl₂ 촉매를 첨가하여 DMSO 용액상에서 용해시킨 후, 130℃에서 6시간동안 반응물이 전부 소비될 때까지 교반을 진행하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 에틸 아세테이트(ethyl acetate)와 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 혼합물 층에서 분리 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 황산 마그네슘(magnesium sulfate) 으로 건조시킨 후, 농축하여 컬럼 크로마토그래피를 이용해 중간체 화합물 [1-A] (수율 78%)를 수득하였다.

[0522] 2) 중간체 화합물 [1-B]의 합성

[0523] 중간체 화합물 [1-A] (1.2 eq)를 dichloromethane (0.1 M)에 용해시킨 후, -78℃에서 교반하면서, 여기에 PPh₃ (2.0 eq)를 천천히 첨가한 후, 2시간 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 에틸 아세테이트와 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 혼합물 층에서 분리 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 황산 마그네슘으로 건조시킨 후, 농축하여 중간체 화합물 [1-B] (수율 61 %)를 수득하였다.

[0524] <u>3) 중간체 화합물 [1-C]의 합성</u>

- [0525] 중간체 화합물 [1-B] (1.5 eq)와 methyl-2-bromoicotinate (1.1 eq)를 CuI (0.03 g), K₂CO₃ (2.0 eq), 및 L-Proline (0.04 eq)를 toluene (0.1 M)에 함께 용해시킨 후, 130℃에서 12시간 교반하였다. 반응 혼합물을 상 온으로 식힌 후, 유기층을 황산 마그네슘으로 건조시킨 후, 농축하여 컬럼 크로마토 그래피를 이용해 중간체 화합물 [1-C] (수율 59%)를 수득하였다.
- [0526] 4) 중간체 화합물 [1-D]의 합성
- [0527] 중간체 화합물 [1-C] (1.3eq), Griniard reagent (1.3 eq)를 THF에 용해하여 24시간 동안 상온에서 반응물이 전부 소비될때까지 교반을 진행한다. Dichloromethane과 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 황산 마그네슘으로 건조시킨 후, 농축하여 컬럼 크로마토그래피를 이용해 중간체 화합물 [1-D] (수율 45 %)를 수득하였다.
- [0528] <u>5) 중간체 화합물 [1-E/1-F]의 합성</u>
- [0529] 중간체 화합물 [1-D] (1.0 eq), di-p-tolyliodonium trifluoromethane sulfonate (1.5 eq), CuOAc (0.1 eq)를 toluene (0.1 M)에 용해시킨 후, 100도 온도에서 10시간 반응물이 전부 소비될 때까지 교반하였다. 얻어진 중 간체 화합물 [1-E] (1.0 eq)를 Pd/C 촉매 (0.02 g)하에서 고온 (500K), 고압 (10 atm) 수소첨가 반응을 통해서 중간체 화합물 [1-F] (수율 74 %)를 수득하였다.
- [0530] 6) 중간체 화합물 및 최종 화합물 [1-G/1-H/1]의 합성
- [0531] 중간체 화합물 [1-F] (1.2 eq), 1-(3-boromo-phenyl)-1H-imidazole (1.0 eq), CuI (0.02 eq), tBuONa (2.0 eq), 그리고 L-Proline (0.04 eq)를 toluene (0.1 M)에 용해시킨 후, 160℃에서 48시간 교반하였다. 얻어진 중간체 화합물 [1-G]을 상온으로 식힌 후, CH₂Cl₂와 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득하였다. 상기 수 득한 유기층을 Na₂SO₃로 건조시킨 후, 농축하여 크로마토 그래피를 이용해서 중간체 [1-H] ligand 화합물(수율 85%)을 수득하였다. 얻어진 중간체 [1-H] ligand 화합물(1.0 eq)를 dicholo(1,5-cyclootadienyl) plantinum (II) (1.05 eq), sodium acetate (3.0 eq)를 THF (0.1 M)에 용해시킨 후, 120℃ 질소 분위기 하에서 72시간 동안 교반하였다. 반응물을 상온으로 식힌 후, 감압하여 용매를 제거하였다. 농축된 반응물을 디클로로메탄 (dichloromethane)에 용해시키고, 남아 있는 침전물을 여과를 통해 걸러주었다. 여액은 컬럼 크로마토 그래피를 이용하여 정제하여서 화합물 1(수율 20%)을 수득하였다..
- [0532] MS cald. For $C_{30}H_{22}N_4OPt$ (MS+1), m/z 649.6; observed 649.6

[0533] 합성예 2: 화합물 3의 합성

[0535] <u>1) 중간체 화합물 [3-A]의 합성</u>

[0534]

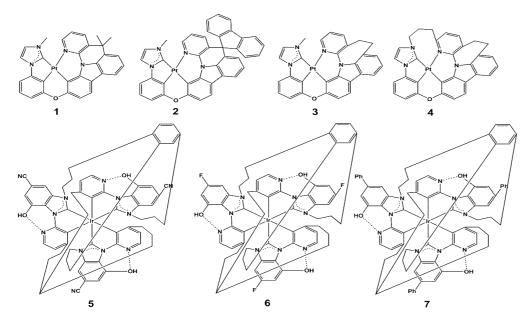
[0536] 1-Bromo-3-chloro-2-nitrobenzene (1.0 eq), 4-methoxy phenylboronic acid (1.2 eq), K₂CO₃ (2.0 eq), 및 0.01g의 Pd(dppl)₂Cl₂ 촉매를 첨가하여 DMSO 용액상에서 용해시킨 후, 130℃에서 6시간동안 반응물이 전부 소비될 때까지 교반을 진행하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 에틸 아세테이트와 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 혼합물 층에서 분리 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 황산 마그네슘으로 건조시킨 후, 농축하여 컬럼 크로마토그래피를 이용해 중간체 화합물 [3-A] (수율 75%)를 수득하였다.

[0537] <u>2) 중간체 화합물 [3-B]의 합성</u>

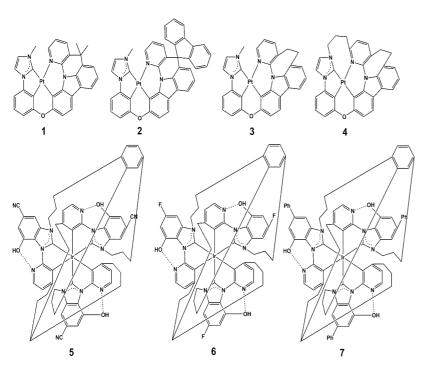
[0538] 중간체 화합물 [3-A] (1.2 eq)를 dichloromethane (0.1 M)에 용해시킨 후, -78℃에서 교반하면서, 여기에 PPh₃ (2.0 eq)를 천천히 첨가한 후, 2시간 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 에틸 아세테이트와 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 혼합물 층에서 분리 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 황산 마그네슘으로 건조시킨 후, 농축하여 중간체 화합물 [3-B] (수율 59%)를 수득하였다.

[0539] <u>3) 중간체 화합물 [3-C]의 합성</u>

- [0540] 중간체 화합물 [3-B] (1.5 eq)와 2-bromo-3-vinylpyridine (1.1 eq)를 Pd₂(dba)₃ (0.03 g), PPh₃ (2 eq), t-BuONa (2.0 eq)를 Dioxane (0.1 M)에 함께 용해시킨 후, 130℃에서 12시간 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 유기층을 황산 마그네슘으로 건조시킨 후, 농축하여 컬럼 크로마토 그래피를 이용해 중간체 화합물 [3-C] (수율 51%)를 수득하였다.
- [0541] 4) 중간체 화합물 [3-D]의 합성
- [0542] 중간체 화합물 [3-C] (1.3eq), Pd₂(dba)₃ (0.03 g), DavePhos (1.3 eq), t-BuONa (0.02 eq)를 Dioxane에 용해하여 24시간 동안 상온에서 반응물이 전부 소비될때까지 교반을 진행하였다. Dichloromethane과 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 황산 마그네슘으로 건조시킨 후, 농축하여 컬럼 크로마토그래피를 이용해 중간체 화합물 [3-D] (수율 41%)를 수득하였다.
- [0543] 5) 중간체 화합물 [3-E/3-F]의 합성
- [0544] 중간체 화합물 [3-D] (1.0 eq), di-p-tolyliodonium trifluoromethane sulfonate (1.5 eq), CuOAc (0.1 eq)를 toluene (0.1 M)에 용해시킨 후, 100도 온도에서 10시간 반응물이 전부 소비될 때까지 교반하였다. 얻어진 중 간체 화합물 [3-E] (1.0 eq)를 Pd/C 촉매 (0.02 g)하에서 고온 (500K), 고압 (10 atm) 수소첨가 반응을 통해서 중간체 화합물 [3-F] (수율 42%)를 수득하였다.
- [0545] 7) 중간체 화합물 및 최종 화합물 [3-G/3-H/3]의 합성
- [0546] 중간체 화합물 [3-F] (1.2 eq), 1-(3-boromo-phenyl)-1H-imidazole (1.0 eq), CuI (0.02 eq), tBuONa (2.0 eq), 그리고 L-Proline (0.04 eq)를 toluene (0.1 M)에 용해시킨 후, 160℃에서 48시간 교반하였다. 얻어진 중간체 화합물 [3-G]을 상온으로 식힌 후, CH₂Cl₂와 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득하였다. 상기 수 득한 유기층을 Na₂SO₃로 건조시킨 후, 농축하여 크로마토 그래피를 이용해서 중간체 [3-H] ligand 화합물(수율 80%)을 수득하였다. 얻어진 중간체 [3-H] ligand 화합물 (1.0 eq)를 dicholo(1,5-cyclootadienyl) plantinum (II) (1.05 eq), sodium acetate (3.0 eq)를 THF (0.1 M)에 용해시킨 후, 120℃ 질소 분위기 하에서 72시간 동안 교반하였다. 반응물을 상온으로 식힌 후, 감압하여 용매를 제거하였다. 농축된 반응물을 dichloromethane 에 용해시키고, 남아 있는 침전물을 여과를 통해 걸러주었다. 여액은 컬럼 크로마토 그래피를 이용하여 정제하여서 화합물 3 (수율 22%)을 수득하였다..
- [0547] MS cald. For $C_{29}H_{20}N_4OPt$ (MS+1), m/z 635.6; observed 635.6
- [0548] 상기 합성예 1 및 2에 개시된 방법을 참조하여, 화합물 1 및 3 외에 화합물 2, 4, 5를 합성하였다.



[0549]



[0550] [0551]

[0552]

평가예 1: 양자 시뮬레이션 분석

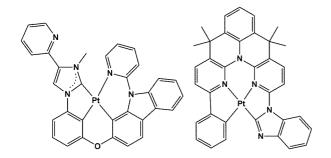
상기 화합물 1 내지 5 및 비교 화합물로서 하기 화합물 A 내지 C의 3 MLCT state의 에너지 레벨 값을 B3LYP functional을 사용하여 평가하고, Ir의 경우 LANL2DZ basis set을 그외의 C, H, N, F의 원자는 6-311G(d,p) basis set 수준에서 구조 최적화한 Gaussian 프로그램을 채용한 DFT 방법을 이용하여 평가한, 기저상태의 에너지 및 삼중항 에너지를 3 MC state 에너지 레벨값에 기초하여 계산하고, 이로부터 E_3 는 전술한 바와 같이 상기 식 1에 따라 계산하여 표 1에 나타내었다.

[0553]

| 화합물 | T ₁ (eV) | ³MC (Kcal/mol) | ³ MCLT | E ₃ (kcal/mol) |
|-------|---------------------|----------------|-------------------|---------------------------|
| 화합물 1 | 2.68 | 27.4 | 12.11 | 27.4 |
| 화합물 2 | 2.65 | 27.2 | 12.32 | 27.2 |
| 화합물 3 | 2.65 | 27.4 | 12.24 | 27.4 |
| 화합물 4 | 2.61 | _ | 19.50 | _ |
| 화합물 5 | 2.79 | 31.0 | 24.08 | 31.0 |
| 화합물 A | 2.71 | 9.87 | 9.82 | 9.87 |
| 화합물 B | 2.14 | 22.45 | 15.32 | 6.08 |
| 화합물 C | 2.39 | 10.96 | 22.08 | 10.96 |

丑 1

[0554] <화합물 A> <화합물 B>



[0555]

[0556] <화합물 C>

[0557]

[0558] 상기 표 1로부터, 상기 화합물 1 내지 5의 E₃ 값은 화합물 A 내지 C의 E₃ 값에 비해 현저히 높게 나타났다. 따라서, 상기 화합물 1 내지 5는 ³MCLT 상태에서 비발광 상태인 ³MC 상태로의 전이 확률이 감소하여 들뜸 상태에서 의 안정성이 우수하고, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자의 효율 및 수명이 증가될 수 있다.

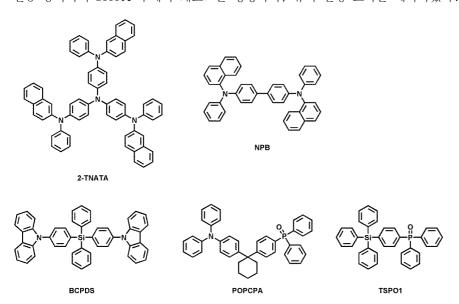
[0559] 실시예 1

[0560] 기판 및 애노드로서 코닝(corning)사의 $15\Omega/\text{cm}^2$ (1200Å) ITO가 형성된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음과 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 상기 유리 기판을 설치하였다.

[0561] 상기 유기 기판에 형성된 ITO 애노드 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0562] 상기 정공 수송층 상부에 코-호스트인 BCPDS(bis(4-(9H-carbazol-9-yl)phenyl)diphenylsilane) 및 POPCPA((4-(1-(4-(diphenylamino)phenyl)cyclohexyl)phenyl)diphenyl-phosphine oxide) (BCPDS와 POPCPA의 중량비는 1:1)와 도편트인 화합물 1을 코-호스트와 도펀트의 중량비가 90 : 10이 되도록 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0563] 상기 발광층 상부에 TSPO1(diphenyl(4-(triphenylsilyl)phenyl)-phosphine oxide)을 증착하여 50Å 두께의 정 공 저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상부에 Alq3를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 상 기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 후, 상기 전자 주입층 상부에 Al를 진공 증착하여 3000Å 두께의 캐소드를 형성하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0564] [0565]

실시예 2 내지 3 및 비교예 1

[0566] 발광층 형성시 도펀트로서 화합물 1 대신 표 2에 기재된 화합물을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실 시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0567] <u>평가예 2</u>

[0568] 상기 실시예 1 내지 3 및 비교예 1에서 제작된 유기 발광 소자의 구동전압, 전류밀도, 수명(LT₉₅), 발광 효율, 발광색 및 최대 발광 파장을 Keithley SMU 236 및 휘도계 PR650을 이용하여 측정하여, 그 결과를 표 2에 나타내었다.

丑 2

[0569]

| | 발광층 | 구동전압 | 전류밀도 | 수명(LT ₉₅) | 발광색 | 발광 파장 (nm) |
|-------|-------|------|----------|-----------------------|-----|------------|
| | 중 도펀트 | (V) | (mA/cm²) | (hr) | | |
| 실시예 1 | 1 | 4.8 | 0.383 | 45 | 청색 | 464 |
| 실시예 2 | 3 | 4.6 | 0.356 | 58 | 청색 | 468 |
| 실시예 3 | 5 | 5.1 | 0.427 | 33 | 청색 | 445 |
| 비교예 1 | A | 4.6 | 0.320 | 10 | 청색 | 467 |

[0570] 상기 표 2를 참조하면, 상기 실시예 1 내지 3에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1에 따른 유기 발광 소자에 비해 전류밀도와 수명 특성이 현저히 우수함을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0571] 10: 유기 발광 소자

110: 제1전극

150: 유기층

190: 제2전극

210: 제1캡핑층

220: 제2캡핑층

도면

도면1

10

| 190 | |
|-----|--|
| 150 | |
| 110 | |

도면2

20

| 190 |
|-----|
| 150 |
| 110 |
| 210 |

도면3

30

| Γ | 220 |
|---|-----|
| | 190 |
| | 150 |
| Γ | 110 |

도면4

40

| 220 | |
|-----|--|
| 190 | |
| 150 | |
| 110 | |
| 210 | |



| 专利名称(译) | 有机金属化合物和包括该有机金属化合物的有机发光器件 | | |
|----------------|---|---------|------------|
| 公开(公告)号 | KR1020200062022A | 公开(公告)日 | 2020-06-03 |
| 申请号 | KR1020190123360 | 申请日 | 2019-10-04 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 三星显示有限公司 | | |
| 申请(专利权)人(译) | 三星显示器有限公司 | | |
| [标]发明人 | 강선우 전상호 조영미 | | |
| 发明人 | 강선우 전상호 조영미 | | |
| IPC分类号 | H01L51/00 C07F15/00 H01L51/50 | | |
| CPC分类号 | H01L51/0084 C07F15/0033 C07F15/0086 H01L51/0085 H01L51/0087 H01L51/5012 | | |
| 优先权 | 1020180146767 2018-11-23 KR | | |
| 外部链接 | <u>Espacenet</u> | | |
| | | | |

摘要(译)

公开了一种有机金属化合物和包括该有机金属化合物的有机发光器件。