



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0122922
(43) 공개일자 2019년10월31일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) C07F 15/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류
H01L 51/0091 (2013.01)
C07F 15/0033 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0046291

(22) 출원일자 2018년04월20일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

강선우

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

고수병

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

유기금속 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1

10

190

150

110

(52) CPC특허분류

H01L 51/0085 (2013.01)

H01L 51/0086 (2013.01)

H01L 51/0087 (2013.01)

H01L 51/0088 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 2251/30 (2013.01)

(72) 발명자

김태경

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

전상호

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

조영미

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

명세서

청구범위

청구항 1

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

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

상기 유기층은 유기금속 화합물을 포함하고,

상기 유기금속 화합물은 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 2

제1항에 있어서,

상기 유기금속 화합물이 $E_3 \geq 5$ kcal/mol을 만족하고,

상기 E_3 는 하기 식 1에 의하여 정의된, 유기 발광 소자:

<식 1>

$$E_3 = ||E_{3MLCT}| - |E_{3MC}||$$

청구항 3

제1항에 있어서,

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

청구항 4

제3항에 있어서,

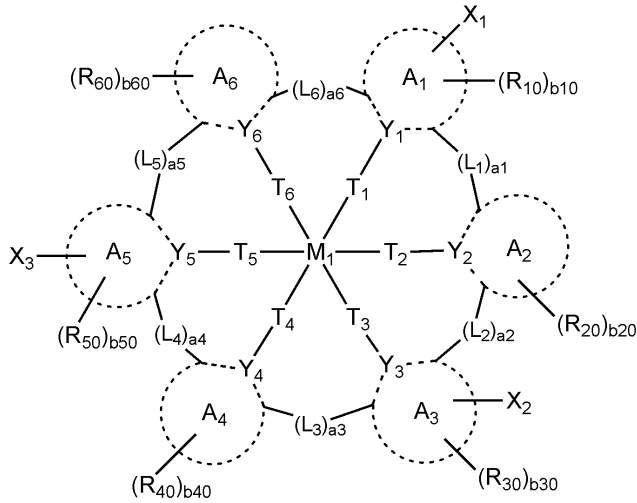
상기 발광층이 최대 발광 파장이 440nm 내지 490nm인 청색 인광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 5

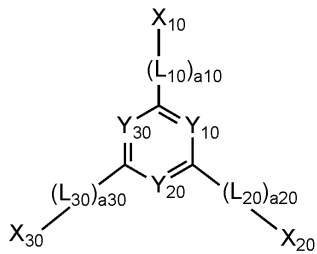
제1항에 있어서,

상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된 화합물인, 유기 발광 소자:

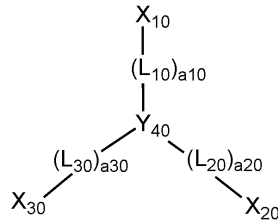
<화학식 1>



<화학식 2A>



<화학식 2B>



상기 화학식 1, 2A 및 2B 중,

M_1 은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고;

A_1 내지 A_6 은 서로 독립적으로, C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 및 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

L_1 내지 L_6 은 서로 독립적으로, 단일 결합, $*-O-*$, $*-S-*$, $*-C(R_1)(R_2)-*$, $*-C(R_1)=*$, $*=C(R_1)-*$, $*-C(R_1)=C(R_2)-*$, $*-C(=O)-*$, $*-C(=S)-*$, $*-C\equiv C-*$, $*-B(R_1)-*$, $*-N(R_1)-*$, $*-P(R_1)-*$, $*-Si(R_1)(R_2)-*$, $*-P(R_1)(R_2)-*$ 및 $*-Ge(R_1)(R_2)-*$ 중에서 선택되고;

a_1 , a_3 및 a_5 는 서로 독립적으로 1, 2 및 3 중에서 선택되고,

a_2 , a_4 및 a_6 은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고,

a_2 가 0이면, A_2 및 A_3 은 서로 연결되어 있지 않고,

a_4 가 0이면, A_4 및 A_5 은 서로 연결되어 있지 않고,

a_6 이 0이면, A_6 및 A_1 은 서로 연결되어 있지 않고,

Y_1 내지 Y_6 은 서로 독립적으로, N 또는 C이고;

T_1 내지 T_6 은 서로 독립적으로, 단일 결합, O 및 S 중에서 선택되고;

A_1 , A_3 및 A_5 는 화학식 2A 또는 2B로 표시된 클리핑 링커(clipping linker)를 통해 서로 연결되고,

X_1 은 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X_{10} 과 결합되고,

X_2 는 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X_{20} 과 결합되고,

X₃은 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₃₀과 결합되고,

Y₁₀, Y₂₀, Y₃₀ 및 Y₄₀은 서로 독립적으로, N 또는 C(R₃)이고,

L₁₀, L₂₀ 및 L₃₀은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₄)(R₅)-*, *-C(R₄)=*, *=C(R₄)-*, *-C(R₄)=C(R₅)-*, *-C(=O)-*, *-C(=S)-*, *-C≡C-*, *-B(R₄)-*, *-N(R₄)-*, *-P(R₄)-*, *-Si(R₄)(R₅)-*, *-P(R₄)(R₅)-* 및 *-Ge(R₄)(R₅)-* 중에서 선택되고;

a₁₀, a₂₀ 및 a₃₀은 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5 중에서 선택되고,

R₁ 내지 R₅, R₁₀, R₂₀, R₃₀, R₄₀, R₅₀ 및 R₆₀은 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-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

R₁과 R₁₀; R₁과 R₂₀; R₁과 R₃₀; R₁과 R₄₀; R₁과 R₅₀; 또는 R₁과 R₆₀은 선택적으로, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

b₁₀, b₂₀, b₃₀, b₄₀, b₅₀ 및 b₆₀은 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 중에서 선택되고;

* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

상기 치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -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(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀

시클로알케닐기, 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(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

-Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

중에서 선택되고,

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-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 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 선택된다.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 배치된 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 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 7

6배위 리간드 및 금속 원자(M₁)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, 유기금속 화합물.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 유기금속 화합물이 E₃ ≥ 5 kcal/mol을 만족하고,

상기 E₃는 하기 식 1에 의하여 정의된, 유기 발광 소자:

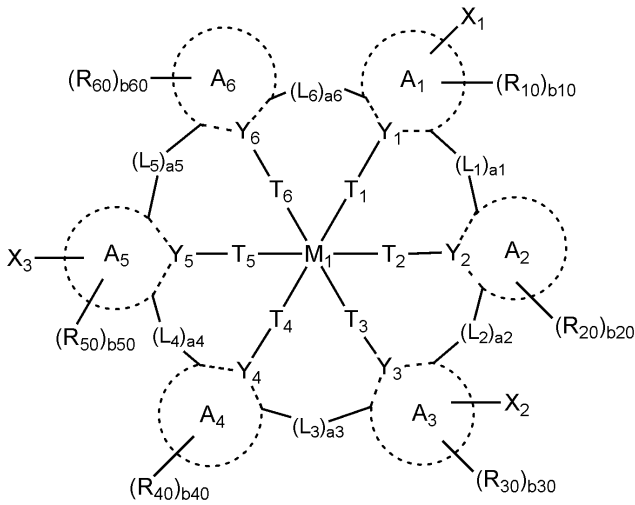
<식 1>

$$E_3 = ||E_{3MLCT} - E_{3MC}||$$

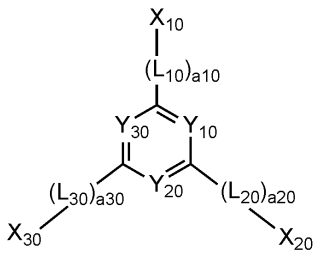
청구항 9

하기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물:

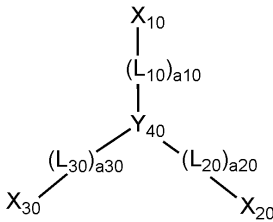
<화학식 1>



<화학식 2A>



<화학식 2B>



상기 화학식 1, 2A 및 2B 중,

M₁은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고;

A₁ 내지 A₆은 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;

L₁ 내지 L₆은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₁)(R₂)-*, *-C(R₁)=*, *=C(R₁)-*, *-C(R₁)=C(R₂)-*, *-C(=O)-*, *-C(=S)-*, *-C≡C-*, *-B(R₁)-*, *-N(R₁)-*, *-P(R₁)-*, *-Si(R₁)(R₂)-*, *-P(R₁)(R₂)-* 및 *-Ge(R₁)(R₂)-* 중에서 선택되고;

a₁, a₃ 및 a₅는 서로 독립적으로 1, 2 및 3 중에서 선택되고,

a₂, a₄ 및 a₆은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고,

a₂가 0이면, A₂ 및 A₃은 서로 연결되어 있지 않고,

a₄가 0이면, A₄ 및 A₅는 서로 연결되어 있지 않고,

a₆이 0이면, A₆ 및 A₁은 서로 연결되어 있지 않고,

Y₁ 내지 Y₆은 서로 독립적으로, N 또는 C이고;

T₁ 내지 T₆은 서로 독립적으로, 단일 결합, O 및 S 중에서 선택되고;

A₁, A₃ 및 A₅는 화학식 2A 또는 2B로 표시된 클리핑 링커(clipping linker)를 통해 서로 연결되고,

X₁은 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₁₀과 결합되고,

X₂는 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₂₀과 결합되고,

X₃은 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₃₀과 결합되고,

Y₁₀, Y₂₀, Y₃₀ 및 Y₄₀은 서로 독립적으로, N 또는 C(R₃)이고,

L₁₀, L₂₀ 및 L₃₀은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₄)(R₅)-*, *-C(R₄)=*, *=C(R₄)-*, *-C(R₄)=C(R₅)-*, *-C(=O)-*, *-C(=S)-*, *-C≡C-*, *-B(R₄)-*, *-N(R₄)-*, *-P(R₄)-*, *-Si(R₄)(R₅)-*, *-P(R₄)(R₅)-* 및 *-Ge(R₄)(R₅)-* 중에서 선택되고;

a₁₀, a₂₀ 및 a₃₀은 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5 중에서 선택되고,

R₁ 내지 R₅, R₁₀, R₂₀, R₃₀, R₄₀, R₅₀ 및 R₆₀은 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-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

R₁과 R₁₀; R₁과 R₂₀; R₁과 R₃₀; R₁과 R₄₀; R₁과 R₅₀; 또는 R₁과 R₆₀;은 선택적으로, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

b₁₀, b₂₀, b₃₀, b₄₀, b₅₀ 및 b₆₀은 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 중에서 선택되고;

* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

상기 치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -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(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로

축합다환 그룹;

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(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

-Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

중에서 선택되고,

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-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 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 선택된다.

청구항 10

제9항에 있어서,

M₁은 Pt, Pd, Cu, Ag 및 Au 중에서 선택되는, 유기금속 화합물.

청구항 11

제9항에 있어서,

A₁, A₃ 및 A₅는 5원(5-membered) 헤테로시클릭 그룹; 또는 5원 헤테로시클릭 그룹을 포함한 C₁-C₆₀헤테로축합다환 그룹;이고,

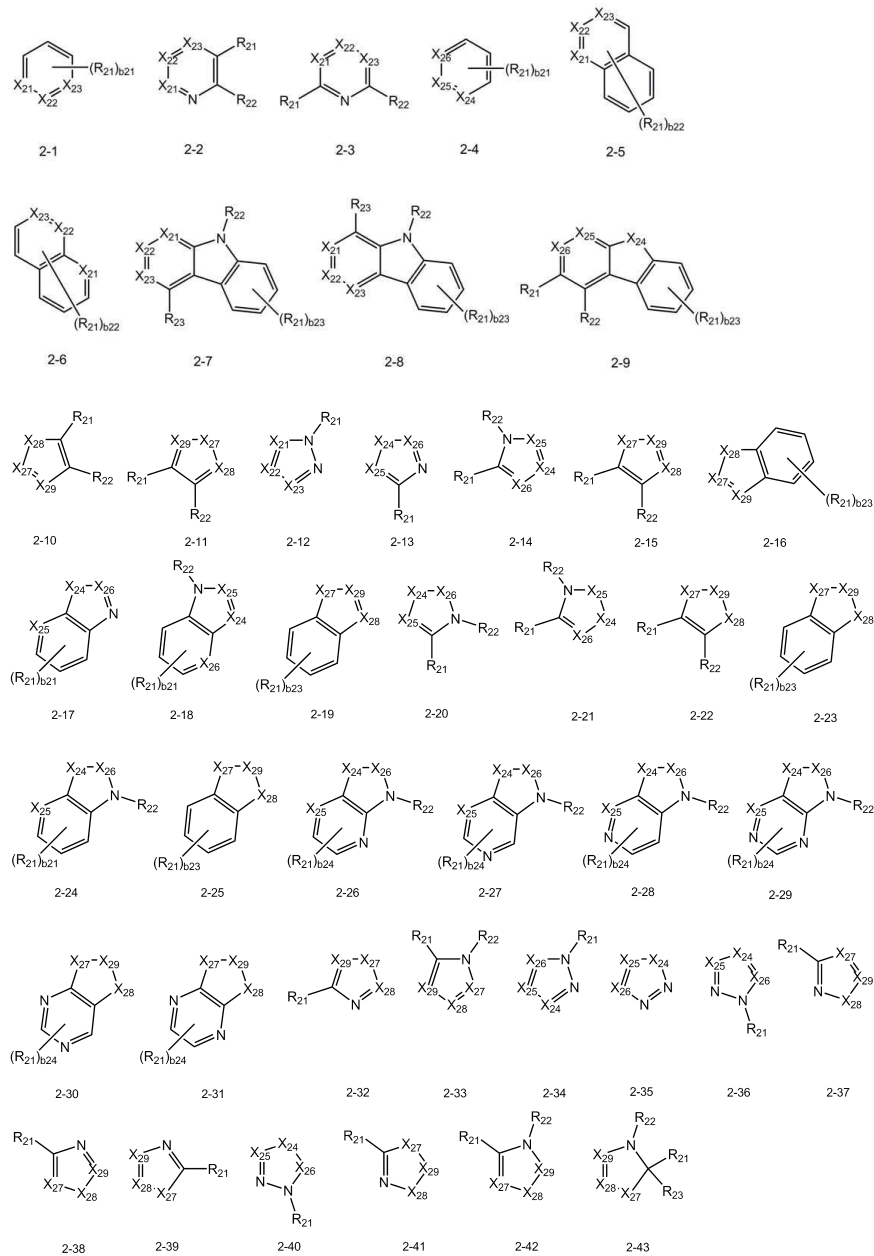
A₂, A₄ 및 A₆는 6원(6-membered) 카보시클릭 그룹; 6원 헤테로시클릭 그룹; 6원 카보시클릭 그룹을 포함한 C₆-C₆₀축합다환 그룹; 6원 카보시클릭 그룹을 포함한 C₆-C₆₀헤테로축합다환 그룹; 또는 6원 헤테로시클릭 그룹을 포함한 C₁-C₆₀헤테로축합다환 그룹;인 유기금속 화합물.

청구항 12

제9항에 있어서,

A₂, A₄ 및 A₆는 하기 화학식 2-1 내지 2-9 중에서 선택되고,

A₁, A₃ 및 A₅는 하기 화학식 2-10 내지 2-43 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



상기 화학식 2-1 내지 2-43 중,

X₂₁ 내지 X₂₃은 서로 독립적으로 C(R₂₄) 및 C-* 중에서 선택되며, X₂₁ 내지 X₂₃ 중 적어도 둘 이상은 C-*이고,

X₂₄는 N-*이고, X₂₅ 및 X₂₆은 서로 독립적으로, C(R₂₄) 및 C-* 중에서 선택되며, X₂₅ 및 X₂₆ 중 적어도 하나 이상은 C-*이고,

X₂₇ 및 X₂₈은 서로 독립적으로 N, N(R₂₅) 및 N-* 중에서 선택되며, X₂₉는 C(R₂₄) 및 C-* 중에서 선택되며, i) X₂₇ 및 X₂₈ 중 하나 이상은 N-*이고, X₂₉는 C-*이거나, ii) X₂₇ 및 X₂₈는 N-*이고 X₂₉는 C(R₂₄)이고,

R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 제1항 중 R₁₀에 대한 설명을 참조하고,

b₂₁은 1, 2 및 3 중에서 선택되고,

b₂₂은 1, 2, 3, 4 및 5 중에서 선택되고,

b₂₃은 1, 2, 3 및 4 중에서 선택되고,

b24는 1 및 2 중에서 선택되고,

*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 13

제9항에 있어서,

L₁ 내지 L₆은 각각 단일결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₁)(R₂)-*, *-C(R₁)=*, *=C(R₁)-*, *-C(R₁)=C(R₂)-*, *-C(=O)-*, *-C(=S)-* 및 *-N(R₁)-* 중에서 선택되고,

a₁, a₃ 및 a₅는 각각 1이고,

a₂, a₄ 및 a₆은 서로 독립적으로 0 또는 1인, 유기금속 화합물.

청구항 14

제9항에 있어서,

Y₁, Y₃ 및 Y₅는 C 또는 N이고,

Y₂, Y₄ 및 Y₆은 C인, 유기금속 화합물.

청구항 15

제9항에 있어서,

T₁ 내지 T₆이 모두 단일 결합인, 유기금속 화합물.

청구항 16

제9항에 있어서,

Y₁₀, Y₂₀ 및 Y₃₀은 서로 독립적으로 C(R₃)인, 유기금속 화합물.

청구항 17

제9항에 있어서,

L₁₀, L₂₀ 및 L₃₀은 서로 독립적으로, *-C(R₄)(R₅)-*, *-C(R₄)=*, *=C(R₄)-* 또는 *-C(R₄)=C(R₅)-*이고,

a₁₀, a₂₀ 및 a₃₀은 서로 독립적으로 1 또는 2인, 유기금속 화합물.

청구항 18

제9항에 있어서,

R₁ 내지 R₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스피이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기; 및

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스피이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기;

중에서 선택되고,

R₁₀, R₂₀, R₃₀ 및 R₄₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기; 및

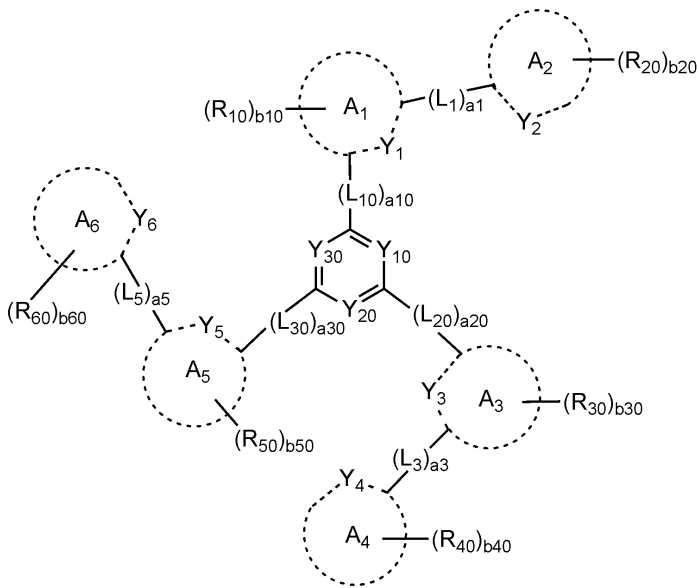
페닐기, 나프틸기 및 피리디닐기; 중에서 선택되는, 유기금속 화합물.

청구항 19

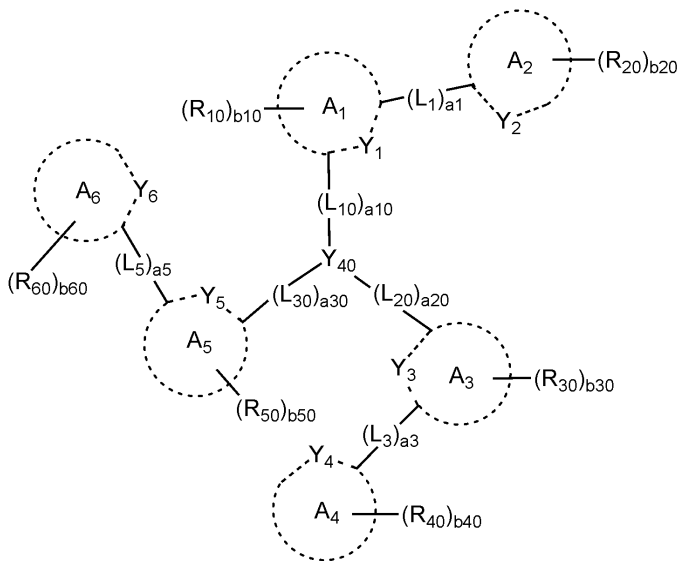
제9항에 있어서,

상기 화학식 1 중 M₁을 제외한 리간드 부분은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시된, 유기금속 화합물:

<화학식 1-1>



<화학식 1-2>



상기 화학식 1-1 및 1-2 중,

A₁ 내지 A₆, L₁, L₃, L₅, a₁, a₃, a₅, Y₁₀, Y₂₀, Y₃₀, Y₄₀, L₁₀, L₂₀, L₃₀, R₁ 내지 R₅, R₁₀, R₂₀, R₃₀, R₄₀, R₅₀, R₆₀, b₁₀, b₂₀, b₃₀, b₄₀, b₅₀ 및 b₆₀에 대한 설명은 각각 제9항에 기재된 설명을 참조하고,

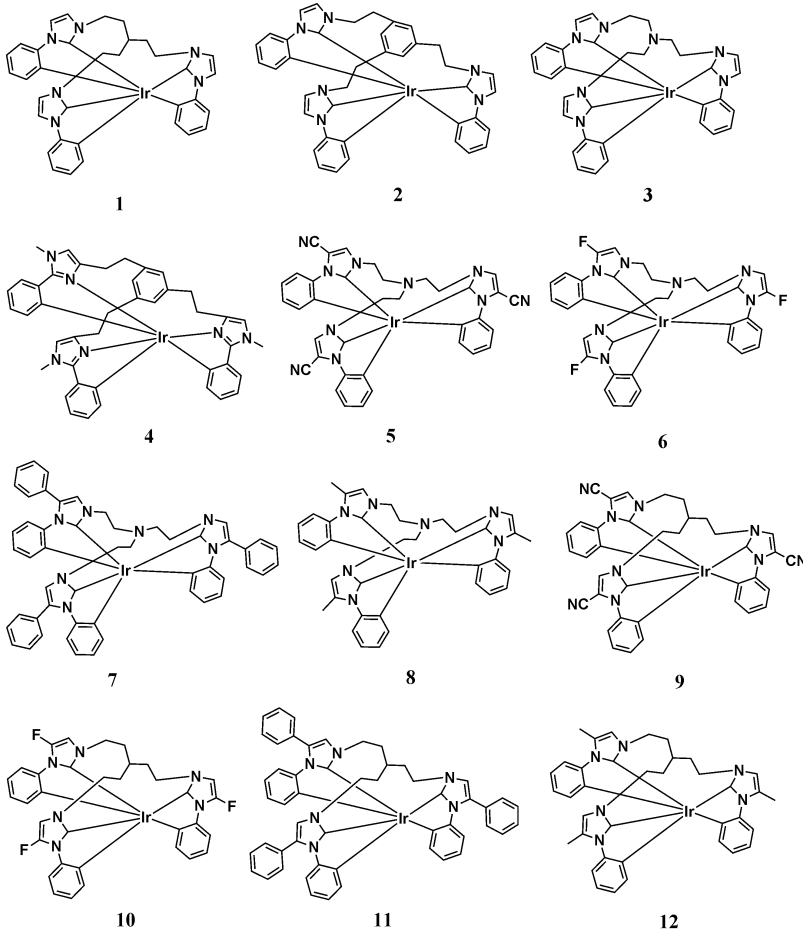
Y_1 내지 Y_6 은 서로 독립적으로, N 또는 C이고,

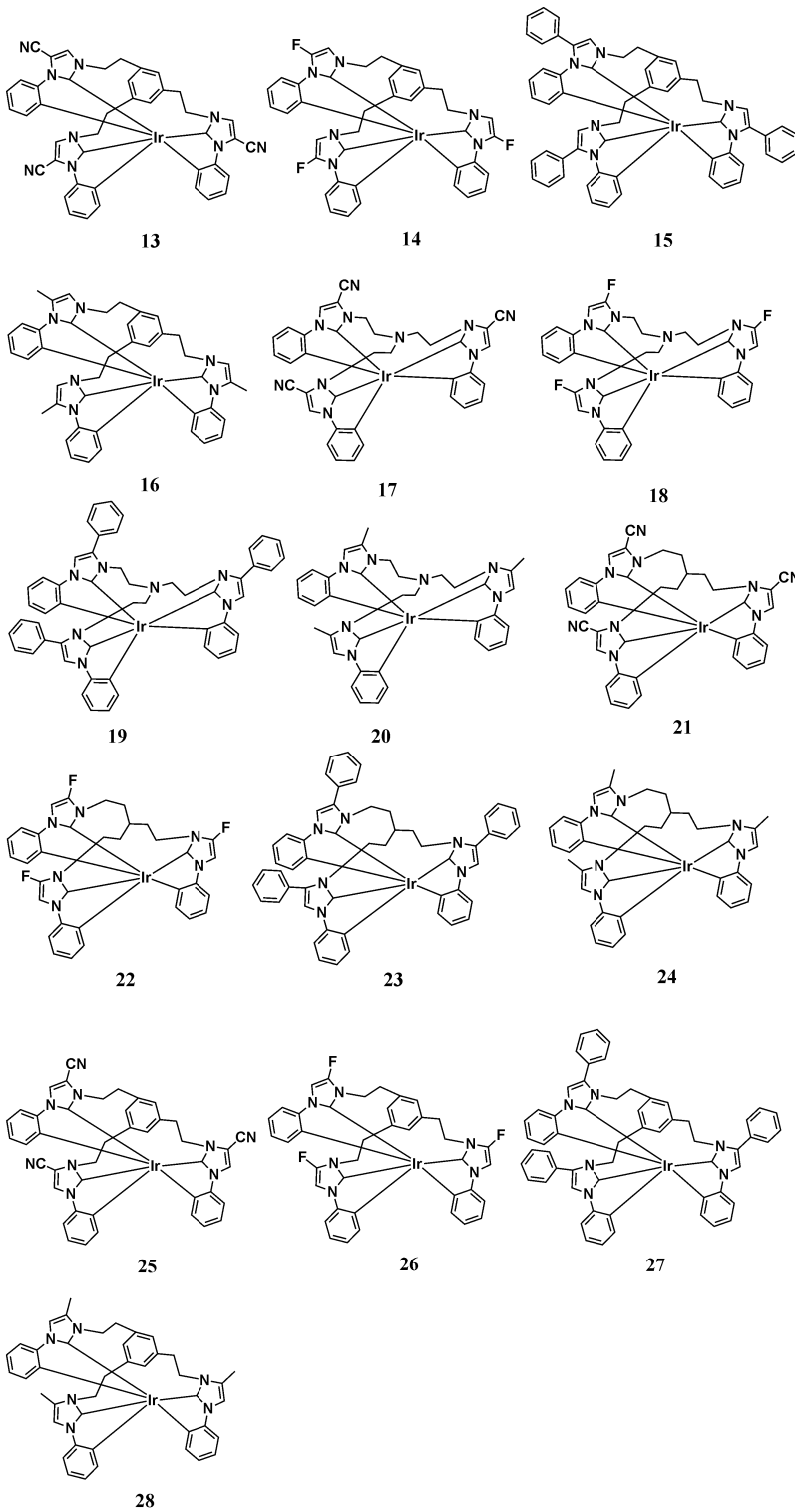
Y_1 내지 Y_6 는 상기 화학식 1 중 M_1 에 결합된다.

청구항 20

제9항에 있어서,

상기 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 28 중에서 선택되는, 유기금속 화합물:





발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[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 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

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

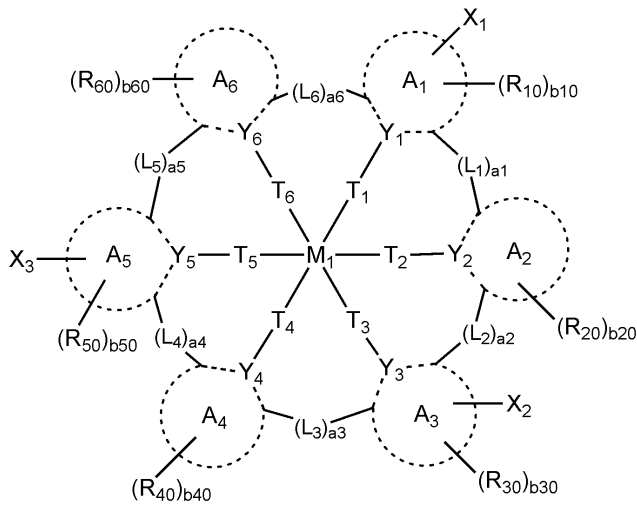
과제의 해결 수단

[0005] 일 측면에 따르면, 6배위 리간드 및 금속 원자(M₁)를 포함하고,

[0006] 상기 유기금속 화합물의 ³MC 상태의 에너지 준위(E_{3MC})가 상기 유기금속 화합물의 ³MLCT 상태(triplet metal-to-ligand charge transfer state)의 에너지 준위(E_{3MLCT})보다 높은, 유기금속 화합물이 제공된다.

[0007] 다른 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물이 제공된다:

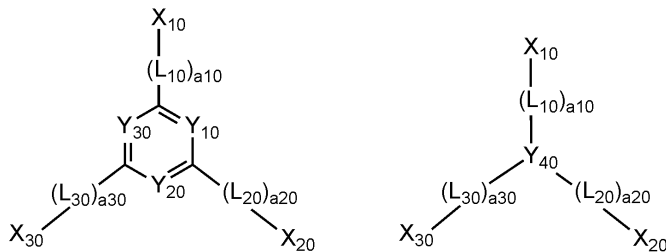
[0008] <화학식 1>



[0009]

[0010] <화학식 2A>

<화학식 2B>



[0011]

[0012] 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중,

[0013] M₁은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택되고;

- [0014] A₁ 내지 A₆은 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고;
- [0015] L₁ 내지 L₆은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₁)(R₂)-*, *-C(R₁)=*, *=C(R₁)-*, *-C(R₁)=C(R₂)-*, *-C(=O)-*, *-C(=S)-*, *-C≡C-*, *-B(R₁)-*, *-N(R₁)-*, *-P(R₁)-*, *-Si(R₁)(R₂)-*, *-P(R₁)(R₂)-* 및 *-Ge(R₁)(R₂)-* 중에서 선택되고;
- [0016] a₁, a₃ 및 a₅는 서로 독립적으로 1, 2 및 3 중에서 선택되고,
- [0017] a₂, a₄ 및 a₆은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고,
- [0018] a₂가 0이면, A₂ 및 A₃은 서로 연결되어 있지 않고,
- [0019] a₄가 0이면, A₄ 및 A₅는 서로 연결되어 있지 않고,
- [0020] a₆이 0이면, A₆ 및 A₁은 서로 연결되어 있지 않고,
- [0021] Y₁ 내지 Y₆은 서로 독립적으로, N 또는 C이고;
- [0022] T₁ 내지 T₆은 서로 독립적으로, 단일 결합, O 및 S 중에서 선택되고;
- [0023] A₁, A₃ 및 A₅는 화학식 2A 또는 2B로 표시된 클리핑 링커를 통해 서로 연결되고,
- [0024] X₁은 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₁₀과 결합되고,
- [0025] X₂는 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₂₀과 결합되고,
- [0026] X₃은 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₃₀과 결합되고,
- [0027] Y₁₀, Y₂₀, Y₃₀ 및 Y₄₀은 서로 독립적으로, N 또는 C(R₃)이고,
- [0028] L₁₀, L₂₀ 및 L₃₀은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₄)(R₅)-*, *-C(R₄)=*, *=C(R₄)-*, *-C(R₄)=C(R₅)-*, *-C(=O)-*, *-C(=S)-*, *-C≡C-*, *-B(R₄)-*, *-N(R₄)-*, *-P(R₄)-*, *-Si(R₄)(R₅)-*, *-P(R₄)(R₅)-* 및 *-Ge(R₄)(R₅)-* 중에서 선택되고;
- [0029] a₁₀, a₂₀ 및 a₃₀은 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5 중에서 선택되고,
- [0030] R₁ 내지 R₅, R₁₀, R₂₀, R₃₀, R₄₀, R₅₀ 및 R₆₀은 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-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -B(Q₁)(Q₂), -N(Q₁)(Q₂), -P(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁), -P(=O)(Q₁)(Q₂) 및 -P(=S)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,
- [0031] R₁과 R₁₀; R₁과 R₂₀; R₁과 R₃₀; R₁과 R₄₀; R₁과 R₅₀; 또는 R₁과 R₆₀은 선택적으로, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0032] b₁₀, b₂₀, b₃₀, b₄₀, b₅₀ 및 b₆₀은 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 중에서 선택되고;
- [0033] * 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

- [0034] 상기 치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는,
- [0035] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0036] 중수소, -F, -Cl, -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(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0037] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0038] 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(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0039] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0040] 중에서 선택되고,
- [0041] 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-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 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 선택된다.
- [0042] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 유기금속 화합물을 포함하고, 상기 유기금속 화합물은 6배위 리간드 및 금속 원자(M₁)를 포함하고, 상기 유기금속 화합물의 ³MC 상태의 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 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0043] 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고휘도, 고효율 및 장수명을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0044] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0045] 일 측면에 따른 유기금속 화합물은, 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 높다.

[0046] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물이 $E_3 \geq 5$ kcal/mol을 만족하고, 상기 E_3 는 하기 식 1에 의하여 정의될 수 있다:

[0047] <식 1>

[0048]
$$E_3 = ||E_{3MLCT}| - |E_{3MC}||$$

[0049] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물이 $E_3 \geq 5$ kcal/mol를 만족할 수 있다. 다른 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 $E_3 \geq 8$ kcal/mol, 예를 들어 $E_3 \geq 19$ kcal/mol을 만족할 수 있다.

[0050] 일 구현예를 따르면, 상기 6배위 리간드는, 5원(5-membered) 헤테로시클릭 그룹; 및 5원 헤테로시클릭 그룹을 포함한 C_1-C_{60} 헤테로축합다환 그룹; 중에서 선택된 적어도 하나, 및 6원(6-membered) 카보시클릭 그룹; 6원 헤테로시클릭 그룹; 6원 카보시클릭 그룹을 포함한 C_6-C_{60} 축합다환 그룹; 6원 카보시클릭 그룹을 포함한 C_1-C_{60} 헤테로축합다환 그룹; 및 6원 헤테로시클릭 그룹을 포함한 C_1-C_{60} 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0051] 또 하나의 구현예를 따르면, 상기 6배위 리간드는 5원(5-membered) 헤테로시클릭 그룹; 및 5원 헤테로시클릭 그룹을 포함한 C_1-C_{60} 헤테로축합다환 그룹; 중에서 선택된 적어도 하나, 및 6원(6-membered) 카보시클릭 그룹; 6원 헤테로시클릭 그룹; 6원 카보시클릭 그룹을 포함한 C_6-C_{60} 축합다환 그룹; 6원 카보시클릭 그룹을 포함한 C_1-C_{60} 헤테로축합다환 그룹; 및 6원 헤테로시클릭 그룹을 포함한 C_1-C_{60} 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된 적어도 하나가 클리핑 링커(clipping linker)를 통해 서로 연결될 수 있다.

[0052] 예를 들어, 상기 6배위 리간드는 헤미케이지(hemicage) 구조를 가질 수 있다.

[0053] 일 구현예를 따르면, 상기 M_1 은 M_1 은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택될 수 있다.

[0054] 예를 들어, 상기 M_1 은 M_1 은 Pt, Pd, Cu, Ag 및 Au 중에서 선택될 수 있다.

[0055] 일 구현예를 따르면, 상기 M_1 이 이리듐(Ir)인 경우에, 상기 유기금속 화합물이 $E_3 \geq 8$ kcal/mol을 만족할 수 있다.

[0056] 다른 구현예를 따르면, 상기 M_1 이 백금(Pt)인 경우에, 상기 유기금속 화합물이 $E_3 \geq 6$ kcal/mol을 만족할 수 있다.

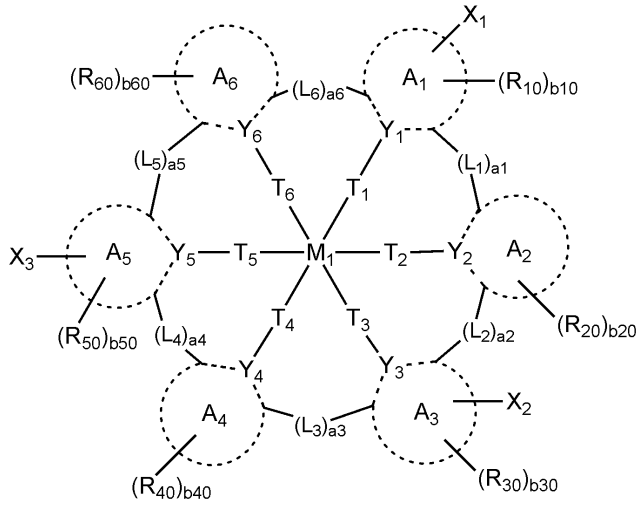
[0057] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 5 kcal/mol $\leq E_3 \leq 50$ kcal/mol, 예를 들어 8 kcal/mol $\leq E_3 \leq 30$ kcal/mol을 만족할 수 있다.

[0058] 상기 유기금속 화합물이 상기 E_3 의 범위를 만족할 때, 상기 유기금속 화합물의 3MLCT 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.

[0059] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물이 제공된다:

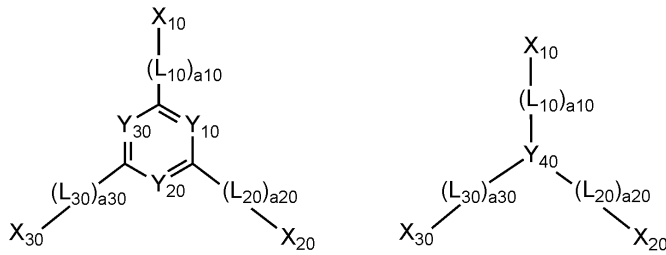
[0060] <화학식 1>



[0061]

[0062] <화학식 2A>

<화학식 2B>



[0063]

[0064] 상기 화학식 1 중, M₁은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 구리(Cu), 은(Ag), 금(Au), 로듐(Rh), 이리듐(Ir), 루테튬(Ru), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb) 및 툴륨(Tm) 중에서 선택된다.

[0065] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, M₁은 Pt, Pd, Ir, Cu, Ag 및 Au 중에서 선택될 수 있다.

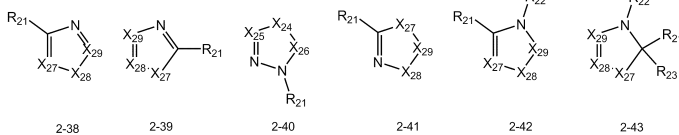
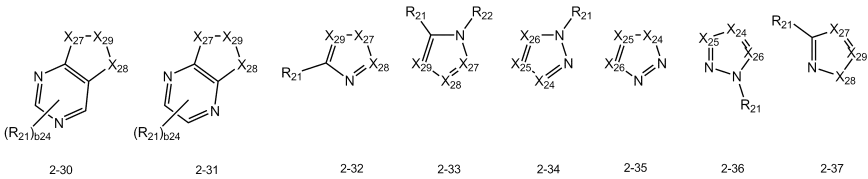
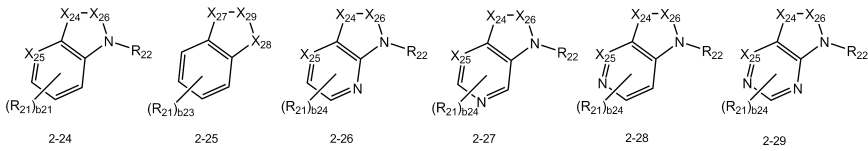
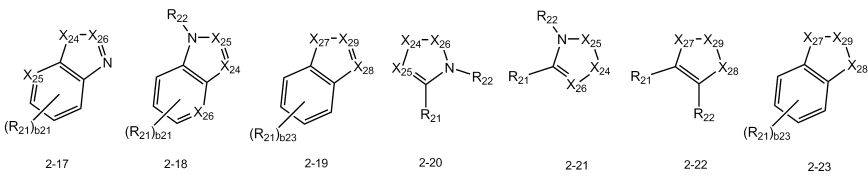
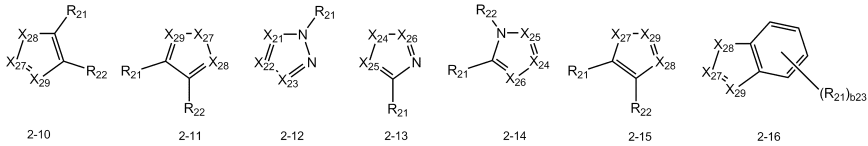
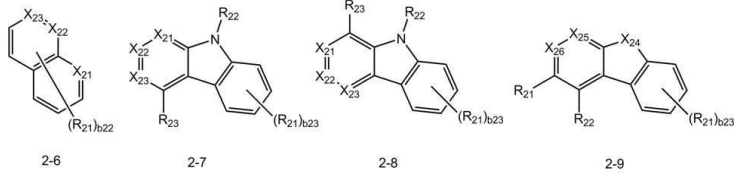
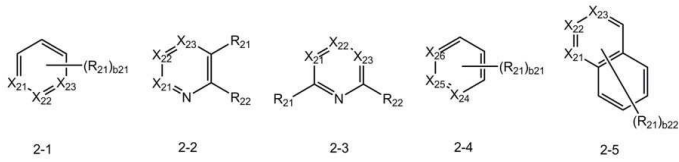
[0066] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 M₁은 Pt 또는 Ir일 수 있고, 다만 이에 한정되지 않는다.

[0067] 상기 화학식 1 중, A₁ 내지 A₆은 서로 독립적으로, C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택된다.

[0068] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, A₁, A₃ 및 A₅는 5원(5-membered) 헤테로시클릭 그룹; 또는 5원 헤테로시클릭 그룹을 포함한 C₁-C₆₀헤테로축합다환 그룹;이고,

[0069] A₂, A₄ 및 A₆은 6원(6-membered) 카보시클릭 그룹; 6원 헤테로시클릭 그룹; 6원 카보시클릭 그룹을 포함한 C₆-C₆₀축합다환 그룹; 6원 카보시클릭 그룹을 포함한 C₆-C₆₀헤테로축합다환 그룹; 또는 6원 헤테로시클릭 그룹을 포함한 C₁-C₆₀헤테로축합다환 그룹;일 수 있다.

[0070] 다른 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, A₂, A₄ 및 A₆은 하기 화학식 2-1 내지 2-9 중에서 선택되고, A₁, A₃ 및 A₅는 하기 화학식 2-10 내지 2-43 중에서 선택될 수 있다:



[0071]

[0072]

[0073]

[0074] 상기 화학식 2-1 내지 2-43 중,

[0075] X_{21} 내지 X_{23} 은 서로 독립적으로 $C(R_{24})$ 및 C^* 중에서 선택되며, X_{21} 내지 X_{23} 중 적어도 둘 이상은 C^* 이고,

[0076] X_{24} 는 N^* 이고, X_{25} 및 X_{26} 은 서로 독립적으로, $C(R_{24})$ 및 C^* 중에서 선택되며, X_{25} 및 X_{26} 중 적어도 하나 이상은 C^* 이고,

[0077] X_{27} 및 X_{28} 은 서로 독립적으로 N , $N(R_{25})$ 및 N^* 중에서 선택되고, X_{29} 는 $C(R_{24})$ 및 C^* 중에서 선택되며, i) X_{27} 및 X_{28} 중 하나 이상은 N^* 이고, X_{29} 는 C^* 이거나, ii) X_{27} 및 X_{28} 는 N^* 이고 X_{29} 는 $C(R_{24})$ 이고,

[0078] R_{21} 내지 R_{25} 는 서로 독립적으로, 제1항 중 R_{10} 에 대한 설명을 참조하고,

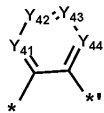
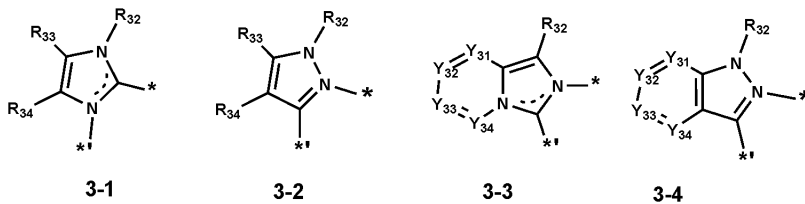
[0079] b_{21} 은 1, 2 및 3 중에서 선택되고,

[0080] b_{22} 은 1, 2, 3, 4 및 5 중에서 선택되고,

[0081] b_{23} 은 1, 2, 3 및 4 중에서 선택되고,

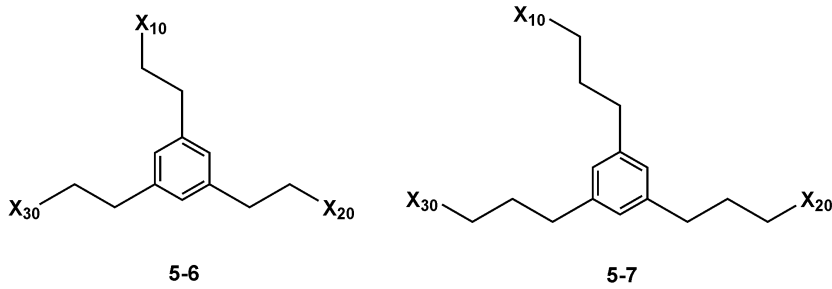
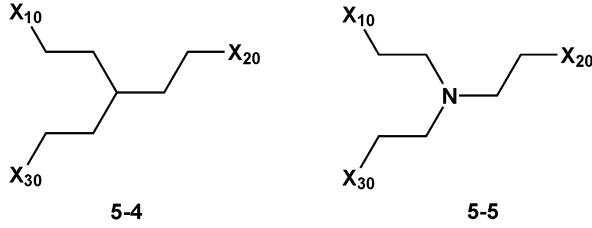
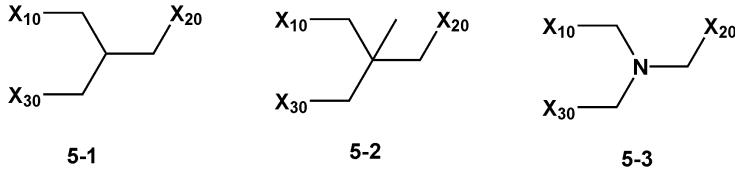
[0082] b_{24} 은 1 및 2 중에서 선택되고,

- [0083] *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0084] 상기 화학식 1 중, L₁ 내지 L₆은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O*', *-S*', *-C(R₁)(R₂)*', *-C(R₁)=*', *=C(R₁)*', *-C(R₁)=C(R₂)*', *-C(=O)*', *-C(=S)*', *-C≡C*', *-B(R₁)*', *-N(R₁)*', *-P(R₁)*', *-Si(R₁)(R₂)*', *-P(R₁)(R₂)*' 및 *-Ge(R₁)(R₂)*' 중에서 선택되고,
- [0085] a₁, a₃ 및 a₅는 서로 독립적으로 1, 2 및 3 중에서 선택되고,
- [0086] a₂, a₄ 및 a₆은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고,
- [0087] a₂가 0이면, A₂ 및 A₃은 서로 연결되어 있지 않고,
- [0088] a₄가 0이면, A₄ 및 A₅는 서로 연결되어 있지 않고,
- [0089] a₆이 0이면, A₆ 및 A₁은 서로 연결되어 있지 않다.
- [0090] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, L₁ 내지 L₆은 각각 단일결합, *-O*', *-S*', *-C(R₁)(R₂)*', *-C(R₁)=*', *=C(R₁)*', *-C(R₁)=C(R₂)*', *-C(=O)*', *-C(=S)*' 및 *-N(R₁)*' 중에서 선택될 수 있다.
- [0091] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, a₁, a₃ 및 a₅는 각각 1이고, a₂, a₄ 및 a₆은 0 또는 1일 수 있다.
- [0092] 다른 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, a₂, a₄ 및 a₆이 각각 0일 수 있다.
- [0093] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, a₂, a₄ 및 a₆이 각각 0이고,
- [0094] A₁, A₃ 및 A₅는 하기 화학식 3-1 내지 3-4 중 어느 하나로 표시되고,
- [0095] A₂, A₄ 및 A₆는 하기 화학식 4-1로 표시된 그룹인, 유기금속 화합물:



- [0096]
- [0097] 상기 화학식 3-1 내지 3-4 중,
- [0098] Y₃₁은 N 또는 C(R₃₁)이고,
- [0099] Y₄₁은 N 또는 C(R₄₁)이고,
- [0100] R₃₁ 내지 R₃₄에 대한 설명은 본 명세서 중 R₁₀에 대한 설명을 참조하고,
- [0101] R₄₁에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀에 대한 설명을 참조하고,
- [0102] * 및 *'는 각각 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.
- [0103] 상기 화학식 1 중, Y₁ 내지 Y₆은 서로 독립적으로, N 또는 C이다.
- [0104] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, Y₁, Y₃ 및 Y₅는 C 또는 N이고, Y₂, Y₄ 및 Y₆은 C일 수 있다.
- [0105] 상기 화학식 1 중, T₁ 내지 T₆은 서로 독립적으로, 단일 결합, O 및 S 중에서 선택된다.

- [0106] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, T₁ 내지 T₆이 모두 단일 결합이거나;
- [0107] T₁은 0 및 S 중에서 선택되고, T₂, T₃, T₄, T₅ 및 T₆은 단일 결합이거나;
- [0108] T₂는 0 및 S 중에서 선택되고, T₁, T₃, T₄, T₅ 및 T₆은 단일 결합이거나;
- [0109] T₃은 0 및 S 중에서 선택되고, T₁, T₂, T₄, T₅ 및 T₆은 단일 결합이거나;
- [0110] T₄는 0 및 S 중에서 선택되고, T₁, T₂, T₃, T₅ 및 T₆은 단일 결합이거나;
- [0111] T₅는 0 및 S 중에서 선택되고, T₁, T₂, T₃, T₄ 및 T₆은 단일 결합이거나; 또는
- [0112] T₆은 0 및 S 중에서 선택되고, T₁, T₂, T₃, T₄ 및 T₅는 단일 결합일 수 있다.
- [0113] 다른 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, T₁, T₃ 및 T₅는 단일 결합이고, T₂, T₄ 및 T₆은 0 및 S 중에서 선택될 수 있다.
- [0114] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, T₁ 내지 T₆이 모두 단일 결합일 수 있다.
- [0115] 상기 화학식 1 중, A₁, A₃ 및 A₅는 화학식 2A 또는 2B로 표시된 클리핑 링커를 통해 서로 연결되고,
- [0116] X₁은 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₁₀과 결합되고,
- [0117] X₂는 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₂₀과 결합되고,
- [0118] X₃은 상기 화학식 2A 또는 2B 중 X₃₀과 결합된다.
- [0119] 예를 들어, X₁ 및 X₁₀; X₂ 및 X₂₀; 및 X₃ 및 X₃₀이 단일 결합을 형성한다.
- [0120] 상기 화학식 2A 및 2B 중, Y₁₀, Y₂₀, Y₃₀ 및 Y₄₀은 서로 독립적으로, N 또는 C(R₃)이다.
- [0121] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중, Y₁₀, Y₂₀ 및 Y₃₀은 서로 독립적으로 C(R₃)일 수 있다.
- [0122] 상기 화학식 2A 및 2B 중, L₁₀, L₂₀ 및 L₃₀은 서로 독립적으로, 단일 결합, *-O-*, *-S-*, *-C(R₄)(R₅)-*', *-C(R₄)=*', *=C(R₄)-*', *-C(R₄)=C(R₅)-*', *-C(=O)-*', *-C(=S)-*', *-C≡C-*', *-B(R₄)-*', *-N(R₄)-*', *-P(R₄)-*', *-Si(R₄)(R₅)-*', *-P(R₄)(R₅)-*' 및 *-Ge(R₄)(R₅)-*' 중에서 선택된다.
- [0123] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중, L₁₀, L₂₀ 및 L₃₀은 서로 독립적으로, *-C(R₄)(R₅)-*', *-C(R₄)=*', *=C(R₄)-*' 또는 *-C(R₄)=C(R₅)-*'일 수 있다.
- [0124] 상기 화학식 2A 및 2B 중, a₁₀, a₂₀ 및 a₃₀은 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5 중에서 선택된다.
- [0125] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중, a₁₀, a₂₀ 및 a₃₀은 서로 독립적으로 1 또는 2일 수 있다.
- [0126] 예를 들어, 상기 화학식 2A 및 2B 중, L₁₀, L₂₀ 및 L₃₀은 서로 독립적으로, *-C(R₄)(R₅)-*', *-C(R₄)=*', *=C(R₄)-*' 또는 *-C(R₄)=C(R₅)-*'이고, a₁₀, a₂₀ 및 a₃₀은 서로 독립적으로 1 또는 2일 수 있다.
- [0127] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 2A 또는 2B로 표시된 클리핑 링커는 하기 화학식 5-1 내지 5-7 중에서 선택된 어느 하나의 구조일 수 있다:



[0128]

[0129]

[0130]

[0131]

[0132]

상기 화학식 5-1 내지 5-7 중,

X_{10} , X_{20} 및 X_{30} 에 대한 설명은 각각 화학식 2A 및 2B에 기재된 바를 참조할 수 있다.

상기 화학식 1, 2A 및 2B 중, R_1 내지 R_5 , R_{10} , R_{20} , R_{30} , R_{40} , R_{50} 및 R_{60} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 헤테로시클로알킬기, 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_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q_1)(Q_2)(Q_3), -B(Q_1)(Q_2), -N(Q_1)(Q_2), -P(Q_1)(Q_2), -C(=O)(Q_1), -S(=O)(Q_1), -S(=O)₂(Q_1), -P(=O)(Q_1)(Q_2) 및 -P(=S)(Q_1)(Q_2) 중에서 선택되고,

[0133]

R_1 과 R_{10} ; R_1 과 R_{20} ; R_1 과 R_{30} ; R_1 과 R_{40} ; R_1 과 R_{50} ; 또는 R_1 과 R_{60} 은 선택적으로, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

[0134]

b_{10} , b_{20} , b_{30} , b_{40} , b_{50} 및 b_{60} 은 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 중에서 선택되고;

[0135]

* 및 *'은 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

[0136]

상기 치환된 C_4 - C_{60} 카보시클릭 그룹, 치환된 C_2 - C_{60} 헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 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} 아릴기, 치환된 C_6 - C_{60} 아릴옥시기, 치환된 C_6 - C_{60} 아릴티오기, 치환된 C_1 - C_{60} 헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는,

- [0137] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0138] 중수소, -F, -Cl, -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(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0139] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0140] 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(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0141] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0142] 중에서 선택되고,
- [0143] 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-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴옥시기, C₁-C₆₀헤테로아릴티오기, 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 선택된다.
- [0144] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1, 2A 및 2B 중, R₁ 내지 R₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0145] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0146] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스피이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바줄일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바줄일기 및 디벤조카바줄일기; 및
- [0147] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 페닐기 및 비페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스피이로-바이플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 카바줄일기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바줄일기 및 디벤조카바줄일기;

[0148] 중에서 선택될 수 있다.

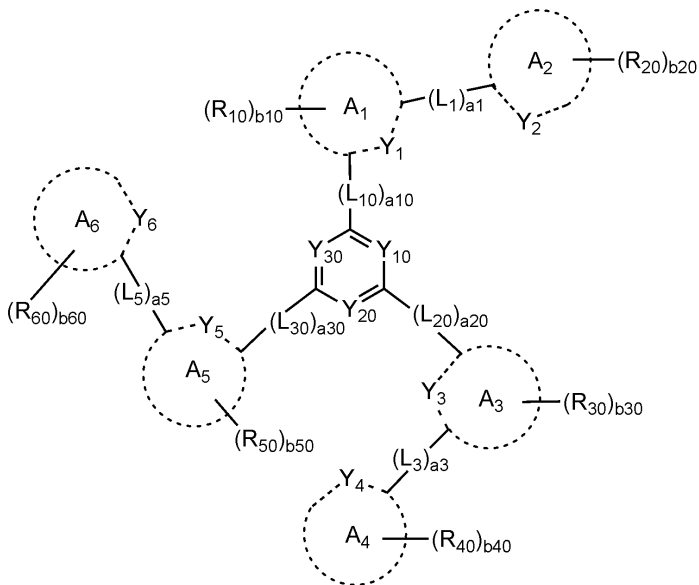
[0149] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중, R_{10} , R_{20} , R_{30} 및 R_{40} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기;

[0150] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, sec-부틸기 및 tert-부틸기; 및

[0151] 페닐기, 나프틸기 및 피리디닐기; 중에서 선택될 수 있다.

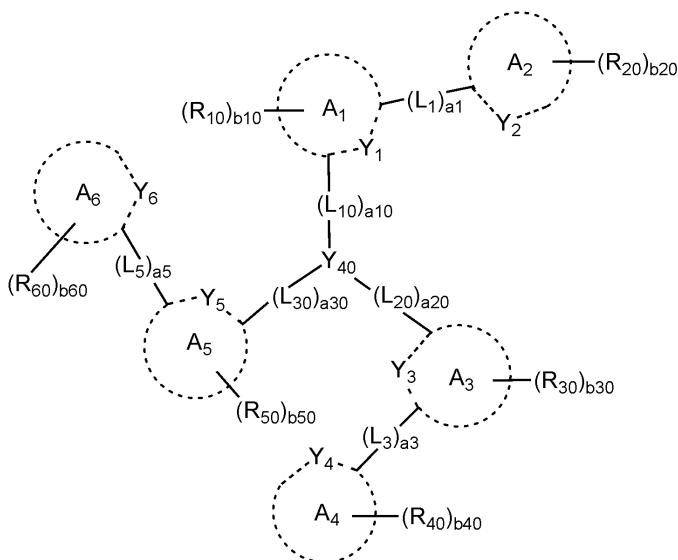
[0152] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중 M_1 을 제외한 리간드 부분은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표시될 수 있다:

[0153] <화학식 1-1>



[0154]

[0155] <화학식 1-2>



[0156]

[0157] 상기 화학식 1-1 및 1-2 중,

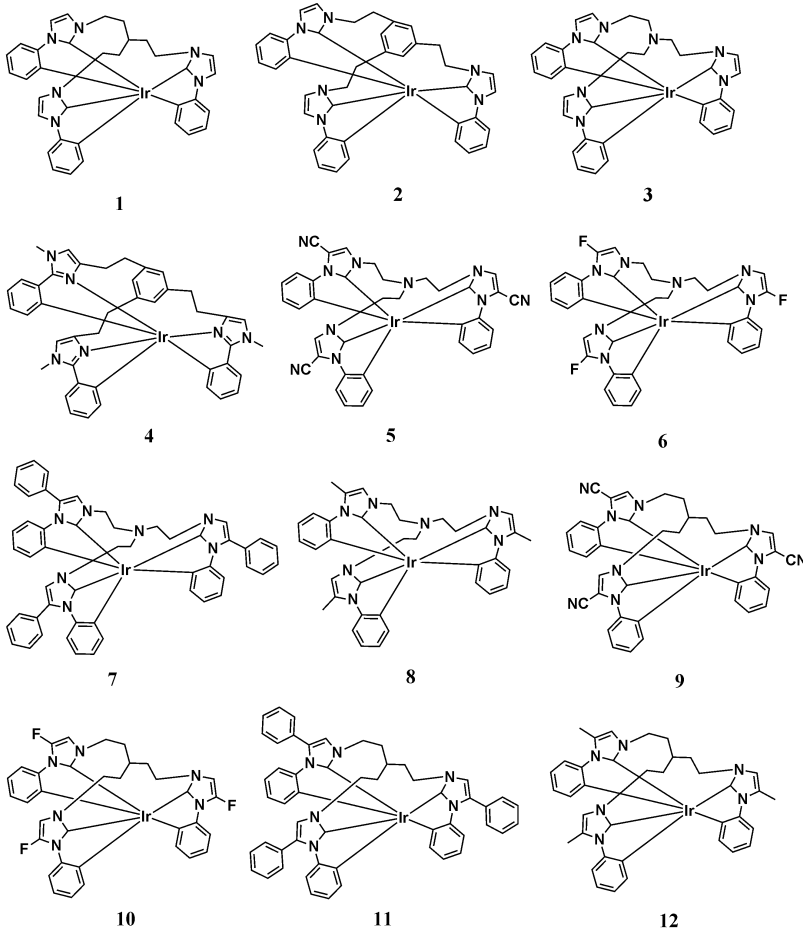
[0158] A_1 내지 A_6 , L_1 , L_3 , L_5 , a_1 , a_3 , a_5 , Y_{10} , Y_{20} , Y_{30} , Y_{40} , L_{10} , L_{20} , L_{30} , R_1 내지 R_5 , R_{10} , R_{20} , R_{30} , R_{40} , R_{50} , R_{60} , b_{10} , b_{20} , b_{30} , b_{40} , b_{50} 및 b_{60} 에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 설명을 참조하고,

[0159] Y_1 내지 Y_6 은 서로 독립적으로, N 또는 C이고,

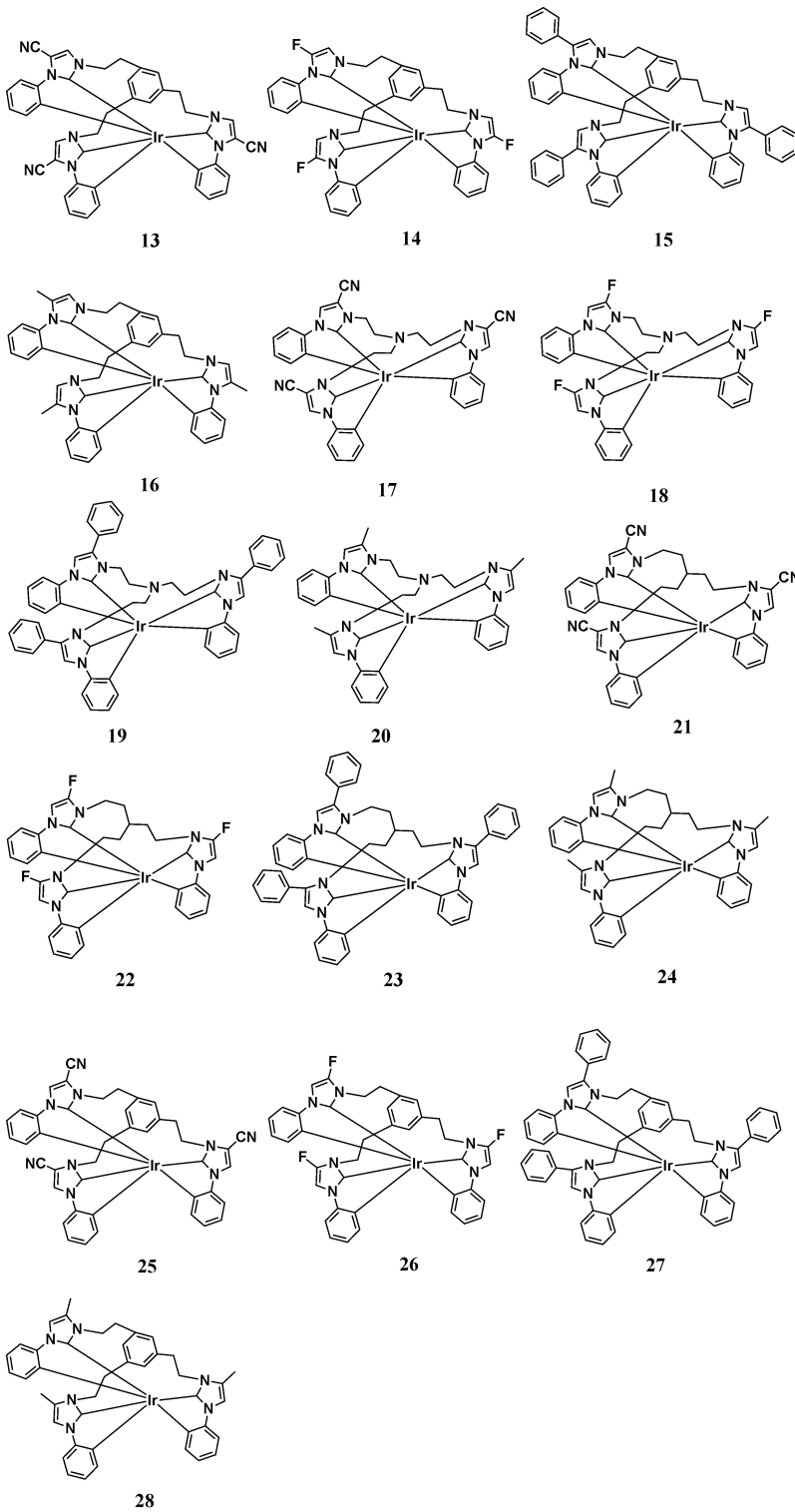
[0160] Y_1 내지 Y_6 은 상기 화학식 1 중 M_1 에 결합된다.

[0161] 예를 들어, Y_1 내지 Y_6 은 상기 화학식 1 중 M_1 에 배위결합되거나 공유결합될 수 있다.

[0162] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 28 중에서 선택될 수 있고, 다만 이에 한정되지 않는다:



[0163]



[0164]

[0165]

[0166]

상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 상기 화학식 1 중 A₁, A₃ 및 A₅가 상기 화학식 2A 또는 2B로 표시되는 클리핑 링커에 의해 서로 연결되는 구조를 가짐으로써, 3차원의 입체적인 헤미케이지 구조의 6배위 리간드를 가지며, 들뜬 상태에서도 화합물의 안정성 및 내구성이 우수하다.

[0167]

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 들뜬 상태에서의 안정성이 우수하며 유기 발광 소자의 수명 및 효율이 우수하다.

[0168]

또한, 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물이 전술한 E₃의 범위를 만족할 수 있고, 이

때 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물의 $^3\text{MCLC}$ 상태에서 비발광 상태인 ^3MC 상태로의 전이 확률이 감소하여 들뜬 상태에서의 안정성이 우수하며, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자의 효율 및 수명이 증가될 수 있다.

- [0169] 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 $\text{CIE}_{x,y}$ 색좌표 0.05, 0.3 ~ 0.18, 0.08)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.
- [0170] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0171] 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.
- [0172] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 유기금속 화합물을 포함하고,
- [0173] 상기 유기금속 화합물은 6배위 리간드 및 금속 원자(M_1)를 포함하고, 상기 유기금속 화합물의 ^3MC 상태(triplet metal centered state)의 에너지 준위($E_{3\text{MC}}$)가 상기 유기금속 화합물의 $^3\text{MLCT}$ 상태(triplet metal-to-ligand charge transfer state)의 에너지 준위($E_{3\text{MLCT}}$)보다 높은, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0174] 상기 유기 발광 소자에 포함된 상기 유기금속 화합물에 대해, 전술한 상기 유기금속 화합물에 대한 설명을 참조할 수 있다.
- [0175] 예를 들어, 상기 유기금속 화합물이 $E_3 \geq 5 \text{ kcal/mol}$ 을 만족하고, 상기 E_3 는 하기 식 1에 의하여 정의될 수 있다:
- [0176] <식 1>
- [0177]
$$E_3 = ||E_{3\text{MLCT}}| - |E_{3\text{MC}}||$$
- [0178] 또한, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0179] 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.
- [0180] 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.
- [0181] 일 구현예에 따르면,
- [0182] 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 애노드이고,
- [0183] 상기 유기 발광 소자의 제2전극은 캐소드이고,
- [0184] 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고,
- [0185] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,

- [0186] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0187] 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.
- [0188] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층에 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물이 포함될 수 있다.
- [0189] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함하고, 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층 중 호스트의 함량이 상기 발광층 중 상기 유기금속 화합물의 함량보다 클 수 있다.
- [0190] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 호스트는 실릴-함유 화합물, 포스핀옥사이드-함유 화합물 또는 이들의 조합을 포함할 수 있다.
- [0191] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층이 최대 발광 파장이 440nm 내지 490nm인 청색 인광을 방출할 수 있다.
- [0192] 일 구현예에 따르면, 상기 상기 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함하고, 상기 전자 저지층에 상기 유기금속 화합물이 포함되어 있거나;
- [0193] 또는 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함하고, 상기 정공 저지층에 상기 유기금속 화합물이 포함될 수 있다.
- [0194] 일 구현예에 따르면, 상기 정공 수송 영역이 LUMO 에너지 준위가 -3.5eV 보다 낮은 p-도펀트를 포함할 수 있다.
- [0195] 또 하나의 구현예에 따르면, 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함하고, 상기 정공 저지층은 상기 발광층에 직접(directly) 접촉되어 있고, 상기 정공 저지층에 포스핀옥사이드-함유 화합물 또는 실릴-함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0196] [도 1에 대한 설명]
- [0197] 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.
- [0198] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0199] [제1전극(110)]
- [0200] 도 1의 제1전극(110)의 하부 또는 제2전극(190)의 상부에는 기관이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기관으로는, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기관 또는 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.
- [0201] 상기 제1전극(110)은, 예를 들면, 기관 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 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.
- [0202] 상기 제1전극(110)은 반투과형 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.
- [0203] 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.
- [0204] [유기층(150)]
- [0205] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.
- [0206] 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.

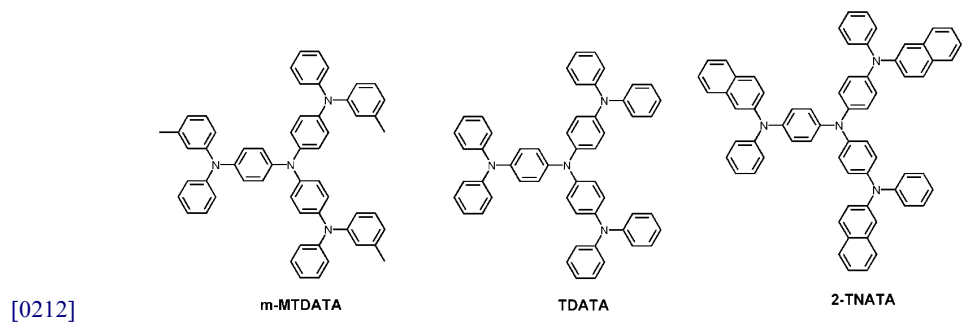
[0207] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]

[0208] 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.

[0209] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.

[0210] 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.

[0211] 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 (폴리아닐린/도데실벤젠술포산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트))), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페르술포산)), 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:



닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 및 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈렌렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈렌렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날렌렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오펜닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조푸라닐렌기, 벤조티오펜닐렌기, 디벤조푸라닐렌기, 디벤조티오펜닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;

- [0229] 중에서 선택되고,
- [0230] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.
- [0231] 다른 구현예에 따르면, xa_1 내지 xa_4 는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.
- [0232] 또 다른 구현예에 따르면, xa_5 는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.
- [0233] 또 다른 구현예에 따르면, R_{201} 내지 R_{204} 및 Q_{201} 은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈렌렌기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈렌렌기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날렌렌기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조푸라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;
- [0234] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1-C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈렌렌기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈렌렌기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날렌렌기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조푸라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 및 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈렌렌기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈렌렌기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날렌렌기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조푸라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;
- [0235] 중에서 선택될 수 있고,
- [0236] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0237] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R_{201} 내지 R_{203} 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0238] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기 및 디벤조티오펜닐기; 및
- [0239] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C_1-C_{10} 알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기 및 디벤조티오펜닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플

루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기;

[0240]

중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0241]

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.

[0242]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 중 적어도 하나는,

[0243]

카바졸일기; 및

[0244]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오펜닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;

[0245]

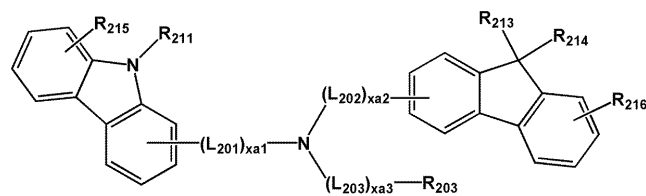
중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0246]

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

[0247]

<화학식 201A>



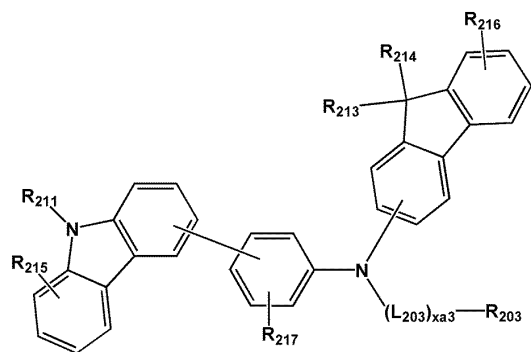
[0248]

[0249]

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

[0250]

<화학식 201A(1)>

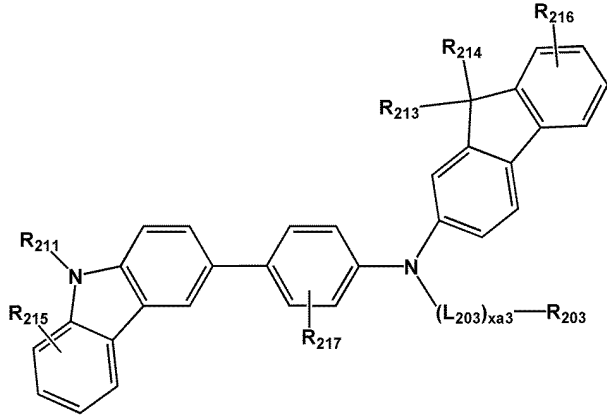


[0251]

[0252]

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

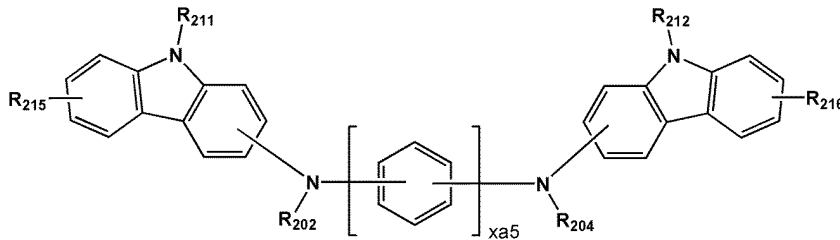
[0253] <화학식 201A-1>



[0254]

[0255] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

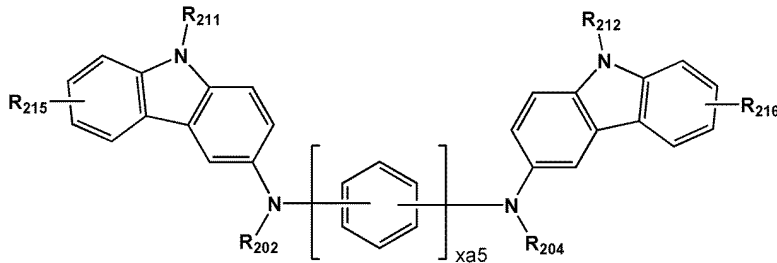
[0256] <화학식 202A>



[0257]

[0258] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0259] <화학식 202A-1>



[0260]

[0261] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

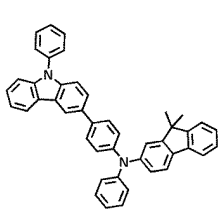
[0262] L₂₀₁ 내지 L₂₀₃, xa₁ 내지 xa₃, xa₅ 및 R₂₀₂ 내지 R₂₀₄에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0263] R₂₁₁ 및 R₂₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀₃에 대한 설명을 참조하고,

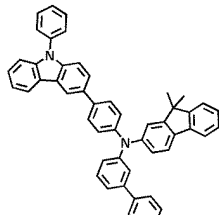
[0264] R₂₁₃ 내지 R₂₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로오펜틸기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스페이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실릴일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0265] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나,

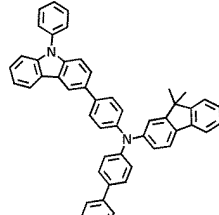
이에 한정되는 것은 아니다:



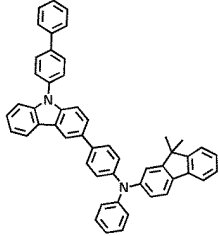
HT1



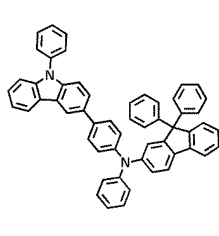
HT2



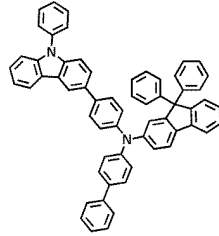
HT3



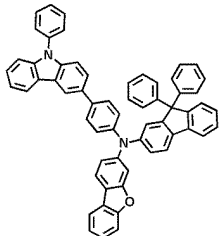
HT4



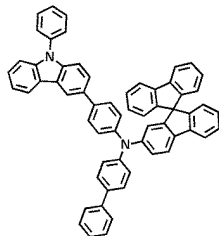
HT5



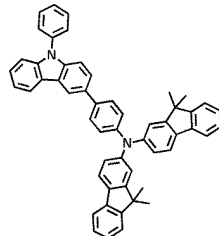
HT6



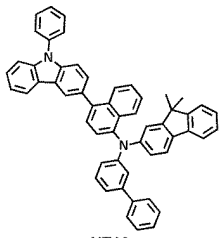
HT7



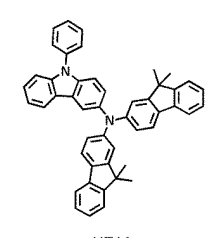
HT8



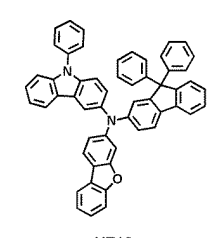
HT9



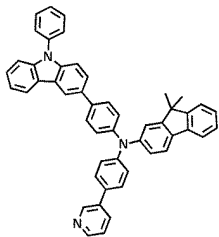
HT10



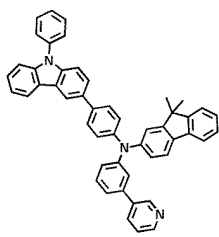
HT11



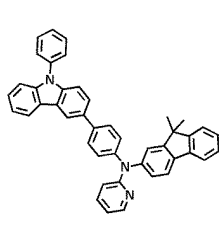
HT12



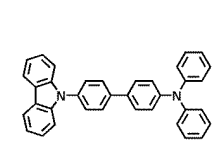
HT13



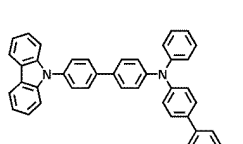
HT14



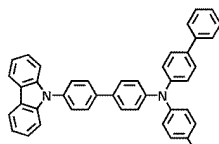
HT15



HT16



HT17

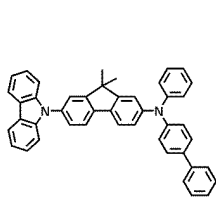


HT18

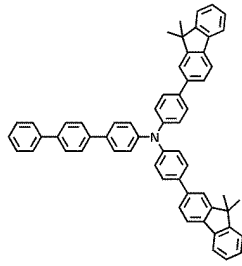
[0266]

[0267]

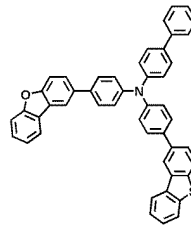
[0268]



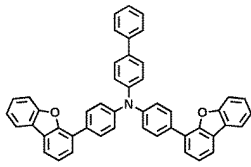
HT19



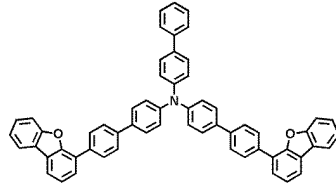
HT20



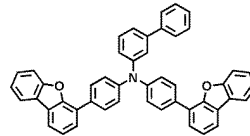
HT21



HT22

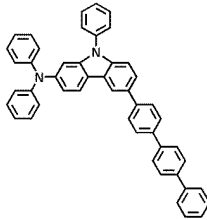


HT23

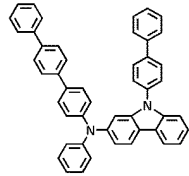


HT24

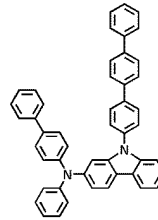
[0269]



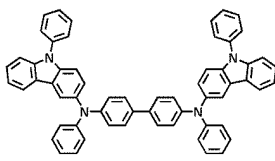
HT25



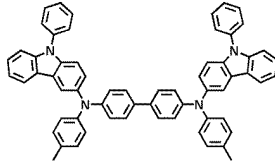
HT26



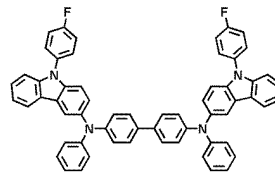
HT27



HT28

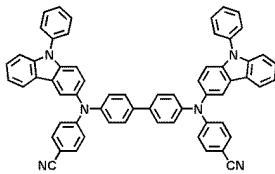


HT29

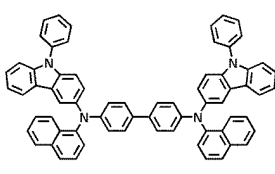


HT30

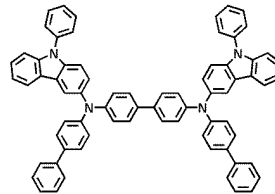
[0270]



HT31

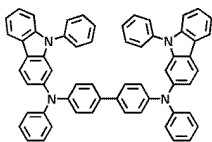


HT32

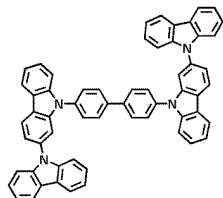


HT33

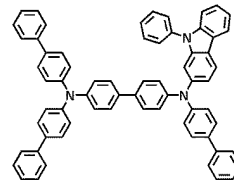
[0271]



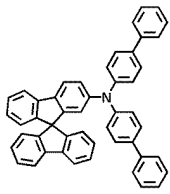
HT34



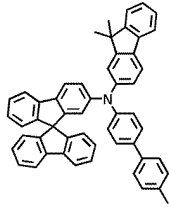
HT35



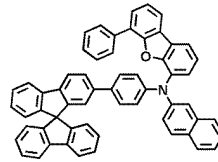
HT36



HT37



HT38



HT39

[0272]

[0273]

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.

[0274]

상기 발광 보조층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시키는 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.

[0275]

[p-도펀트]

[0276]

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.

[0277]

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0278]

일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 보다 낮을 수 있다.

[0279]

상기 p-도펀트는, 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0280]

예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0281]

TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체;

[0282]

텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

[0283]

HAT-CN (1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및

[0284]

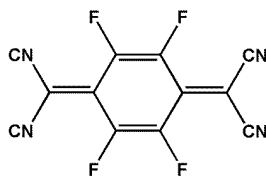
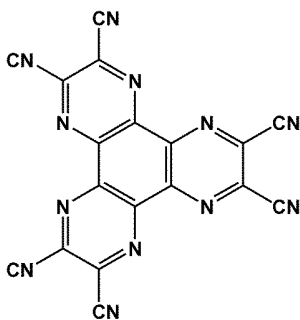
하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

[0285]

중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

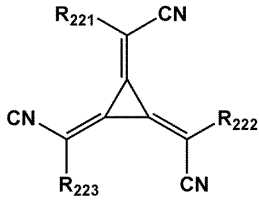
[0286]

<HAT-CN> <F4-TCNQ>



[0287]

[0288] <화학식 221>



[0289] 상기 화학식 221 중,
 [0290] 상기 화학식 221 중,

[0291] R₂₂₁ 내지 R₂₂₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R₂₂₁ 내지 R₂₂₃ 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -R로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Cl로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Br로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 및 -I로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0292] [유기층(150) 중 발광층]

[0293] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 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.

[0294] 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.

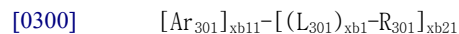
[0295] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0296] 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.

[0297] [발광층 중 호스트]

[0298] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0299] <화학식 301>



[0301] 상기 화학식 301 중,

[0302] Ar₃₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0303] xb11은 1, 2 또는 3이고,

[0304] 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-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0305] xb1는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0306] 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-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 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(=O)(Q₃₀₁), -S(=O)₂(Q₃₀₁) 및 -P(=O)(Q₃₀₁)(Q₃₀₂) 중에서 선택되고,

[0307] xb21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0308] Q₃₀₁ 내지 Q₃₀₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0309] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar₃₀₁은,

[0310] 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

[0311] 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(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 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;

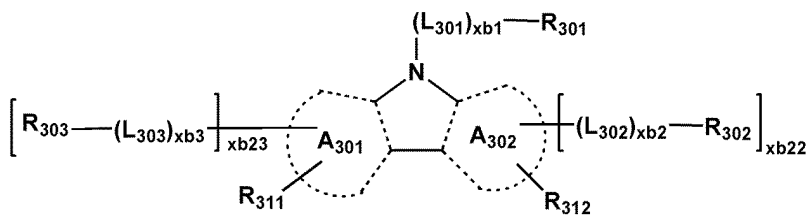
[0312] 중에서 선택되고,

[0313] Q₃₁ 내지 Q₃₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0314] 상기 화학식 301 중 xb11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₃₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

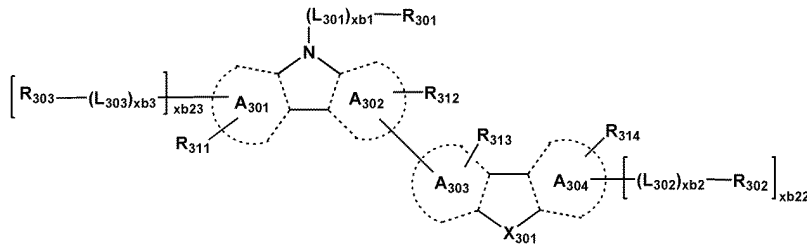
[0315] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0316] <화학식 301-1>



[0317]

[0318] <화학식 301-2>



[0319]

[0320] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0321] A₃₀₁ 내지 A₃₀₄는 서로 독립적으로, 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오란텐, 트리페닐렌, 파이렌, 크라이센, 피리딘, 피리미딘, 인덴, 플루오렌, 스파이로-비플루오렌, 벤조플루오렌, 디벤조플루오렌, 인돌, 카바졸, 벤조카바졸, 디벤조카바졸, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 나프토피란, 벤조나프토피란, 디나프토피란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 나프토티오펜, 벤조나프토티오펜 및 디나프토티오펜 중에서 선택되고,

[0322] X₃₀₁은 O, S 또는 N-[(L₃₀₄)_{xb4}-R₃₀₄]이고,

[0323] R₃₁₁ 내지 R₃₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 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(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택되고,

[0324] xb₂₂ 및 xb₂₃은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0325] L₃₀₁, xb₁, R₃₀₁ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0326] L₃₀₂ 내지 L₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L₃₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0327] xb₂ 내지 xb₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb₁에 대한 설명을 참조하고,

[0328] R₃₀₂ 내지 R₃₀₄에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R₃₀₁에 대한 설명을 참조한다.

[0329] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L₃₀₁ 내지 L₃₀₄는 서로 독립적으로,

[0330] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 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

[0331] 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, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시

놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀘아로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;

[0332] 중에서 선택되고,

[0333] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0334] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R_{301} 내지 R_{304} 는 서로 독립적으로,

[0335] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0336] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀘아로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥

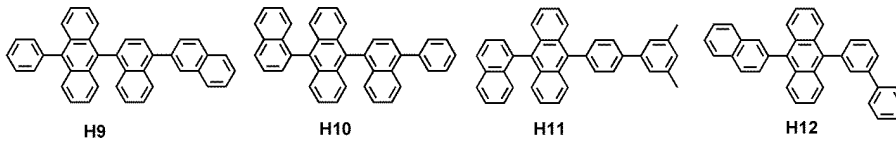
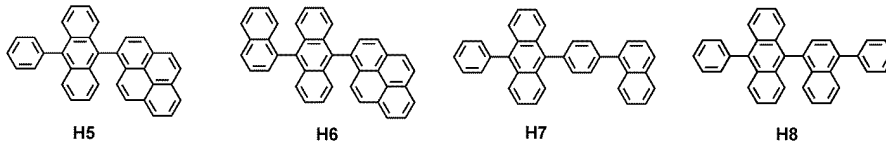
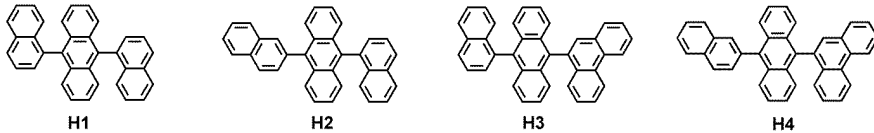
사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

[0337] 중에서 선택되고,

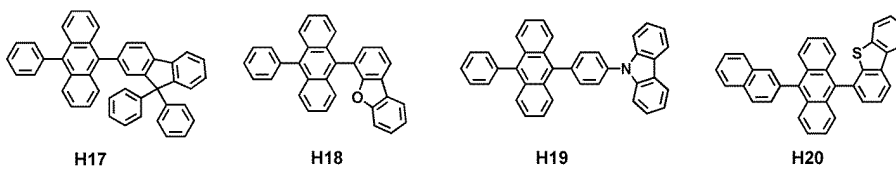
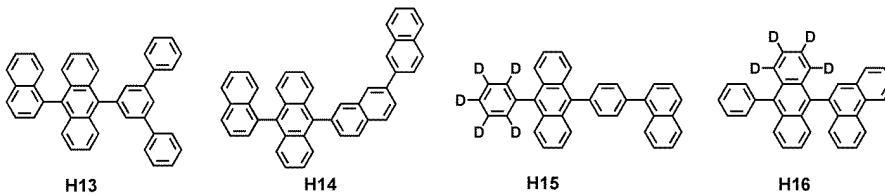
[0338] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0339] 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.

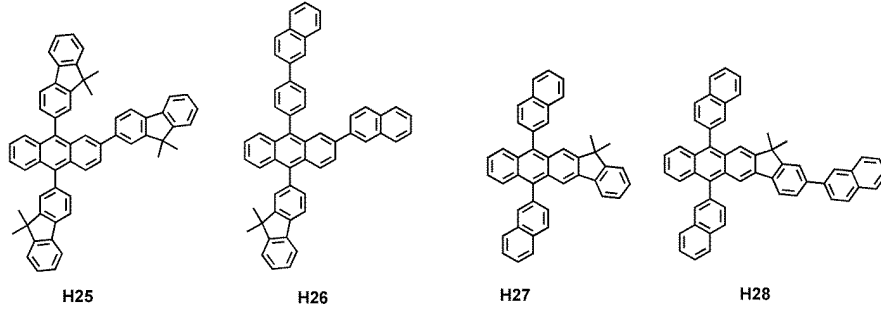
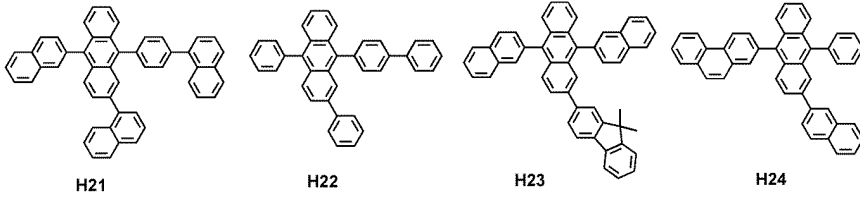
[0340] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4' -bis(N-carbazolyl)-1,1' -biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



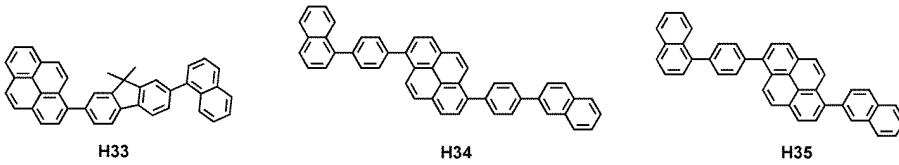
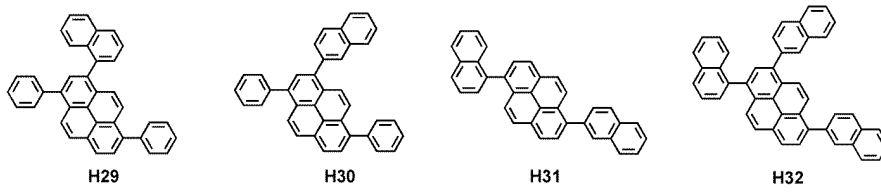
[0341]



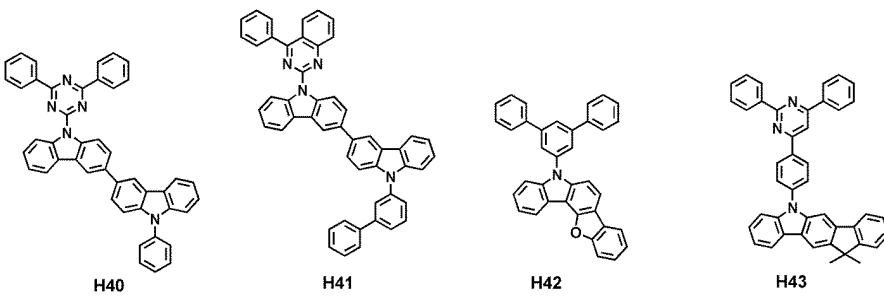
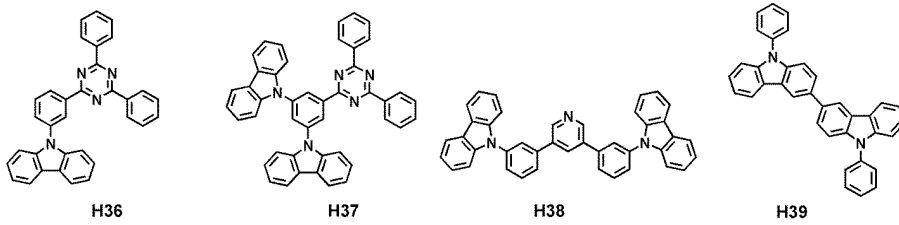
[0342]



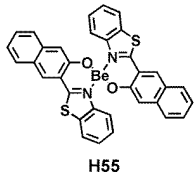
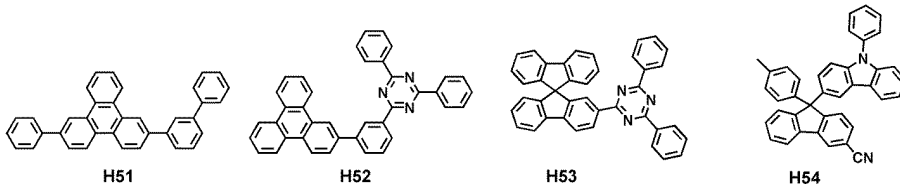
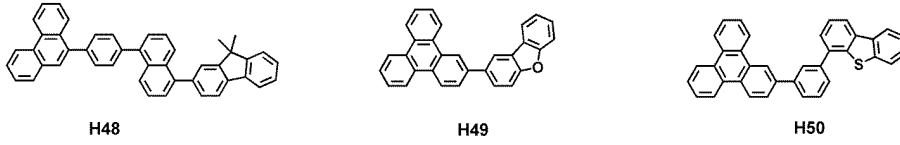
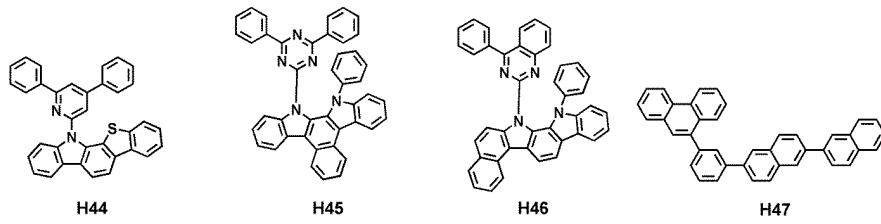
[0343]



[0344]



[0345]



[0346]

[0347]

[0348]

[0349]

[0350]

[0351]

[0352]

[0353]

[0354]

[0355]

[0356]

[0357]

[0358]

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

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.

[유기층(150) 중 전자 수송 영역]

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.

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.

예를 들어, 상기 전자 수송 영역은, 발광층으로부터 차례로 적층된 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.

상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은, π 전자 결핍성 합질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.

상기 " π 전자 결핍성 합질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 의미한다.

예를 들어, 상기 " π 전자 결핍성 합질소 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 축합되

어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.

- [0359] 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, 이미다조피리딘, 이미다조피리미딘, 아자카바졸 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0360] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0361] <화학식 601>
- [0362] $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$
- [0363] 상기 화학식 601 중,
- [0364] Ar_{601} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0365] $xe11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0366] L_{601} 은, 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} 헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0367] $xe1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0368] R_{601} 은, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, 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_6-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{601})(Q_{602})(Q_{603})$, $-C(=O)(Q_{601})$, $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$ 중에서 선택되고,
- [0369] 상기 Q_{601} 내지 Q_{603} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0370] $xe21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0371] 일 구현예에 따르면, 상기 $xe11$ 개의 Ar_{601} 및 $xe21$ 개의 R_{601} 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 함질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0372] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar_{601} 은,
- [0373] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페달렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타펜 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조푸란 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, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹; 및
- [0374] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비

플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 콰이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페틸렌 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, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹;

[0375] 중에서 선택될 수 있고,

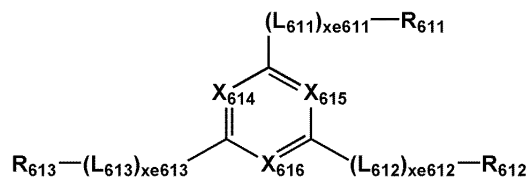
[0376] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0377] 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0378] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0379] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

[0380] <화학식 601-1>



[0381]

[0382] 상기 화학식 601-1 중,

[0383] X₆₁₄는 N 또는 C(R₆₁₄)이고, X₆₁₅는 N 또는 C(R₆₁₅)이고, X₆₁₆는 N 또는 C(R₆₁₆)이고, X₆₁₄ 내지 X₆₁₆ 중 적어도 하나는 N이고,

[0384] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0385] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0386] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0387] 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.

[0388] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L₆₀₁ 및 L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로,

[0389] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 콰이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리다닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 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

[0390] 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, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;

[0391] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0392] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0393] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R₆₀₁ 및 R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로,

[0394] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

[0395] 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, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 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

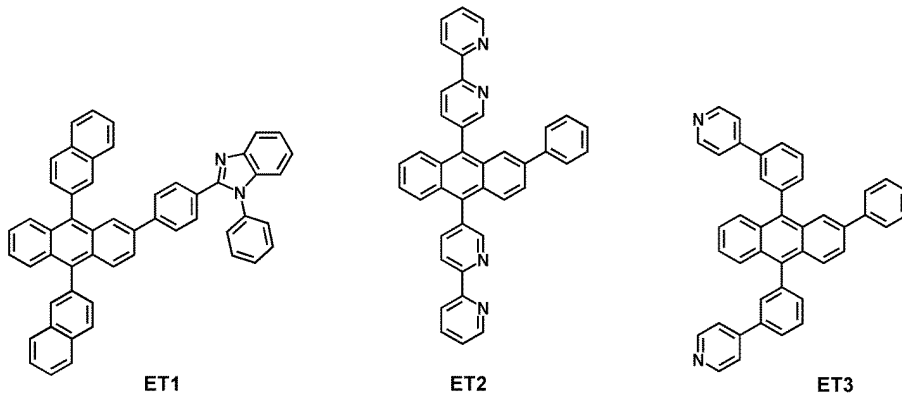
트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0396] $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$;

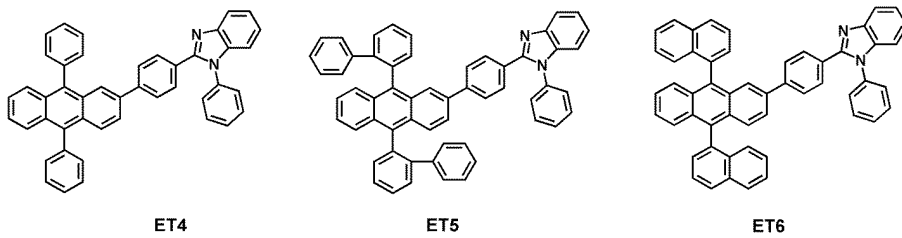
[0397] 중에서 선택되고,

[0398] 상기 Q_{601} 및 Q_{602} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

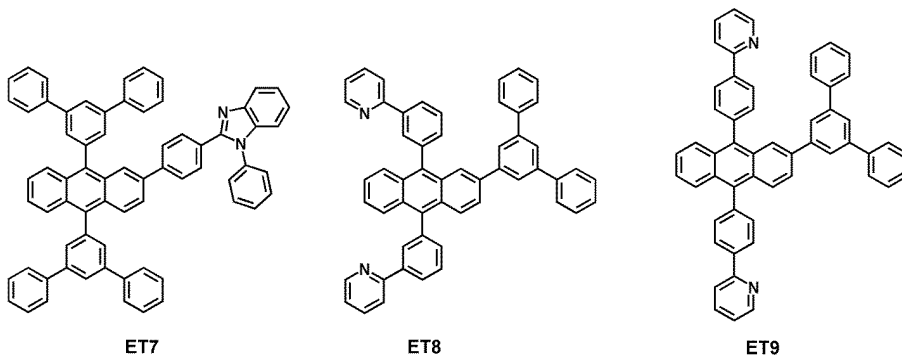
[0399] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



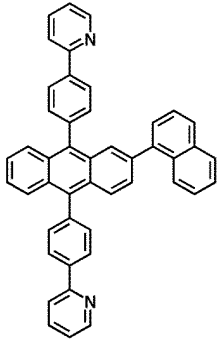
[0400]



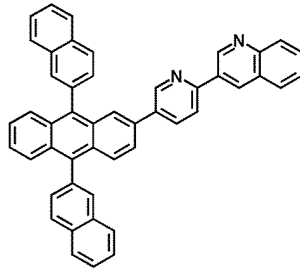
[0401]



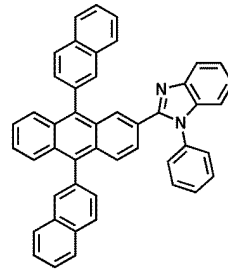
[0402]



ET10

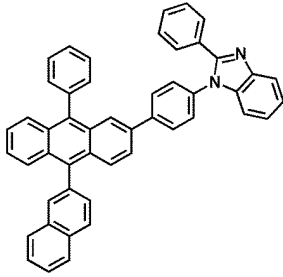


ET11

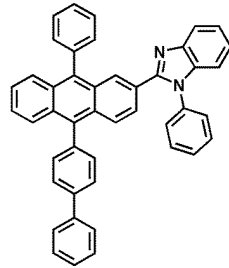


ET12

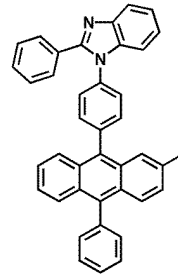
[0403]



ET13

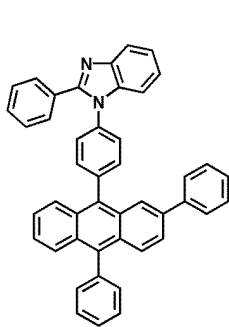


ET14

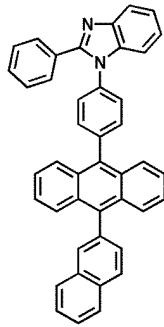


ET15

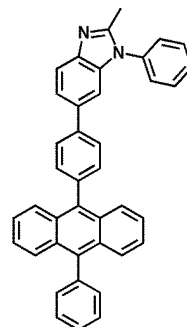
[0404]



ET16

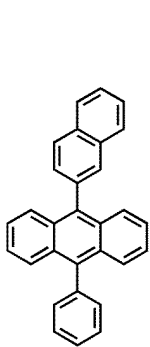


ET17

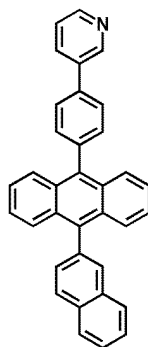


ET18

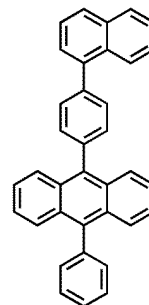
[0405]



ET19

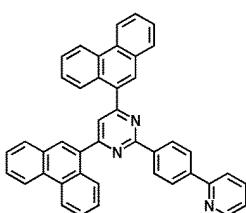


ET20

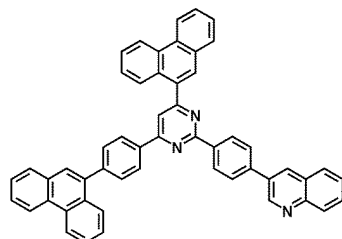


ET21

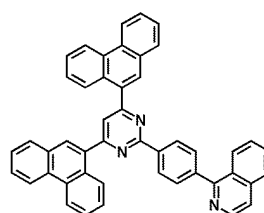
[0406]



ET22

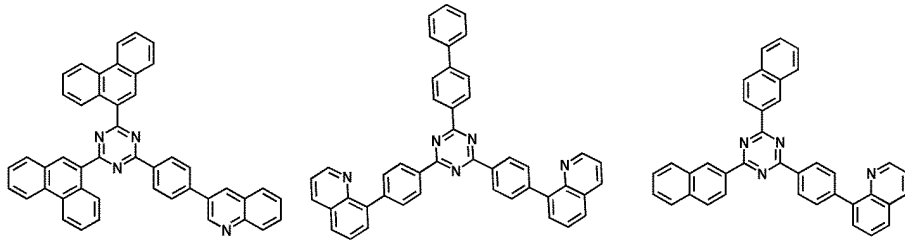


ET23

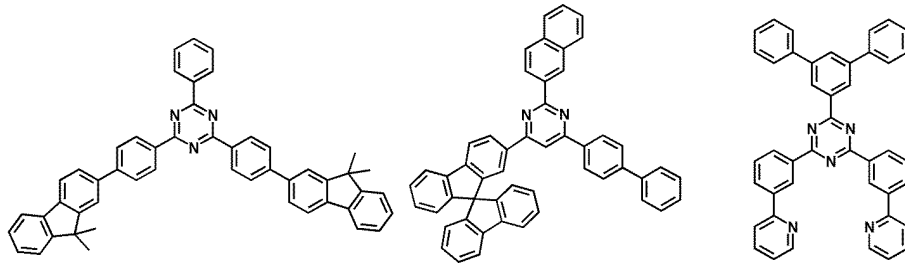


ET24

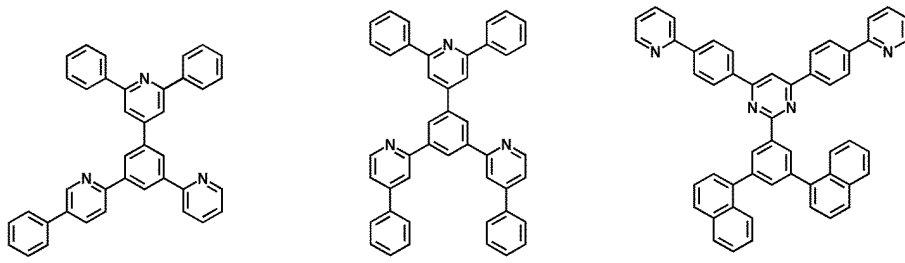
[0407]



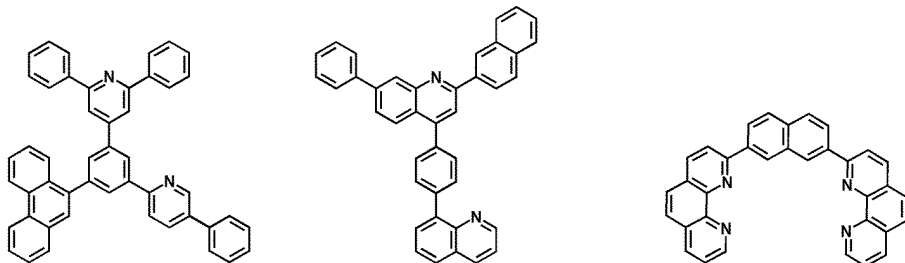
[0408]



[0409]

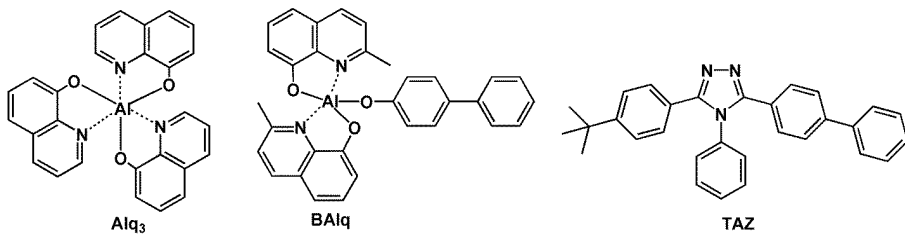


[0410]

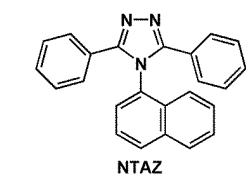


[0411]

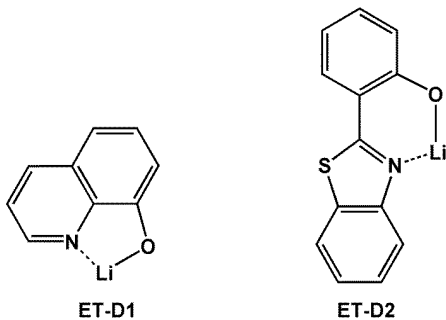
[0412] 또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, BAlq, TAZ(3-(Biphenyl-4-yl)-5-(4-*tert*-butylphenyl)-4-phenyl-4*H*-1,2,4-triazole) 및 NTAZ 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다.



[0413]



- [0414] 또 다른 예로서, 상기 전자 수송 영역은 포스핀 옥사이드-함유 화합물(예를 들면, 하기 실시예에서 사용된 TSP01 등) 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.
- [0415] 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.
- [0416] 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.
- [0417] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0418] 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, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0419] 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-D2를 포함할 수 있다.



- [0420]
- [0421] 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.
- [0422] 상기 전자 주입층은 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.
- [0423] 상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0424] 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.
- [0425] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.
- [0426] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.
- [0427] 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) 중에

서 선택될 수 있다.

- [0428] 상기 알칼리 금속 화합물은, Li_2O , Cs_2O , K_2O 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 , Li_2O , NaF , LiI , NaI , CsI , KI 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0429] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO , SrO , CaO , $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}(0 < x < 1)$, $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}(0 < x < 1)$ 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.
- [0430] 상기 희토류 금속 화합물은, YbF_3 , ScF_3 , ScO_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , 및 TbF_3 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 희토류 금속 화합물은 YbF_3 , ScF_3 , TbF_3 , YbI_3 , ScI_3 , TbI_3 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0431] 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 배워진 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로헥사다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0432] 상기 전자 주입층은 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 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, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합은 상기 유기물로 이루어진 매트릭스에 균일 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.
- [0433] 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.
- [0434] [제2전극(190)]
- [0435] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극인 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.
- [0436] 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 한정되는 것은 아니다. 상기 제2전극(190)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다.
- [0437] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0438] 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.
- [0439] 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°C의 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.
- [0440] 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°C 내지 200°C의 열처리 온도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수

있다.

- [0441] [치환기의 일반적인 정의]
- [0442] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는, 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 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0443] 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.
- [0444] 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-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0445] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는, -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0446] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0447] 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-옥사트리아졸리딘yl, 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜yl기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0448] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 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 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0449] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 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 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸일기, 2,3-디히드로퓨라닐기, 2,3-디히드로티오펜yl기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0450] 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.
- [0451] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, 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, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, 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 C₁-C₆₀헤테로아릴기의 구체예에

는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함된다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

- [0452] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.
- [0453] 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 포함된다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0454] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, 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 의미한다. 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.
- [0455] 본 명세서 중 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 4 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.
- [0456] 본 명세서 중 C₂-C₆₀헤테로시클릭 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.
- [0457] 본 명세서 중, 상기 치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 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 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0458] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0459] 중수소, -F, -Cl, -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(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0460] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로

축합다환 그룹;

[0461] 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(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0462] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0463] 중에서 선택되고,

[0464] 상기 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-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 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.

[0465] 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.

[0466] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0467] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0468] 본 명세서 중 *, *' 및 *"은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0469] 이하에서, 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.

[0470] [실시예]

[0471] 평가예 1: 양자 시뮬레이션 분석

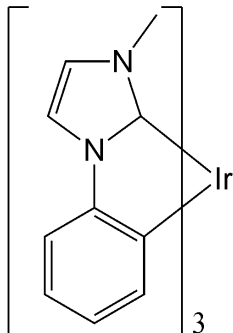
[0472] 상기 화합물 1 내지 7 및 비교 화합물로서 하기 화합물 A의 ³MLCT state의 에너지 레벨, 을 B3LYP functional을 사용하였고, Ir의 경우 LANL2DZ basis set을 그외의 C, H, N, F의 원자는 6-311G(d,p) basis set 수준에서 구조 최적화한 Gaussian 프로그램을 채용한 DFT 방법을 이용하여 평가한, 기저상태의 에너지, 삼중항 에너지, ³MC state 에너지 레벨값에 기초하여 계산하고, 이로부터 E₃는 전술한 바와 같이 상기 식 1에 따라 계산하여 표 1에 나타내었다.

표 1

화합물	³ MLCT (eV)	E ₃ (kcal/mol)
화합물 A	3.28	1.18
화합물 1	3.29	8.10
화합물 2	3.26	11.12
화합물 3	3.28	8.00

화합물 4	2.67	5.75
화합물 5	2.80	19.5
화합물 6	2.80	18.7
화합물 7	2.79	19.7

[0474] <화합물 A>



[0475]

[0476] 상기 표 1로부터, 상기 화합물 1 내지 7의 E₃ 값은 화합물 A의 E₃ 값에 비해 현저히 높게 나타났다. 따라서, 상기 화합물 1 내지 7은 ³MLCT 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.

부호의 설명

- [0477] 10: 유기 발광 소자
- 110: 제1전극
- 150: 유기층
- 190: 제2전극

도면

도면1

10

190
150
110

专利名称(译)	有机金属化合物和包括其的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020190122922A	公开(公告)日	2019-10-31
申请号	KR1020180046291	申请日	2018-04-20
[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	KANG SUN WOO 강선우 KO SOO BYUNG 고수병 KIM TAE KYUNG 김태경 JEON SANG HO 전상호 CHO YOUNG MI 조영미		
发明人	강선우 고수병 김태경 전상호 조영미		
IPC分类号	H01L51/00 C07F15/00 H01L51/50		
CPC分类号	C07F15/0033 H01L51/0086 H01L51/0087 H01L51/0085 H01L51/5012 H01L51/0091 H01L51/0088 H01L2251/30 C09K11/06 C09K2211/1044 C09K2211/185 H01L51/5016 H01L51/5096		
外部链接	Espacenet		

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。

10

190
150
110