



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년05월02일

(11) 등록번호 10-2527229

(24) 등록일자 2023년04월25일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07F 15/00 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
H10K 50/00 (2023.01) H10K 99/00 (2023.01)

(52) CPC특허분류  
C07F 15/0086 (2013.01)  
C09K 11/06 (2022.01)

(21) 출원번호 10-2017-0058095

(22) 출원일자 2017년05월10일

심사청구일자 2020년04월27일

(65) 공개번호 10-2018-0124195

(43) 공개일자 2018년11월21일

(56) 선행기술조사문헌

JP2012207231 A\*

US20150194616 A1\*

US20060094875 A1\*

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

김성범

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

고수병

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 17 항

심사관 : 정상우

(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

*H10K 50/12* (2023.02)

*H10K 50/18* (2023.02)

*H10K 85/342* (2023.02)

*H10K 85/346* (2023.02)

*H10K 85/348* (2023.02)

*C09K 2211/185* (2013.01)

(72) 발명자

**김영국**

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

**전미나**

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

**전미은**

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

**황석환**

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

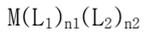
명세서

청구범위

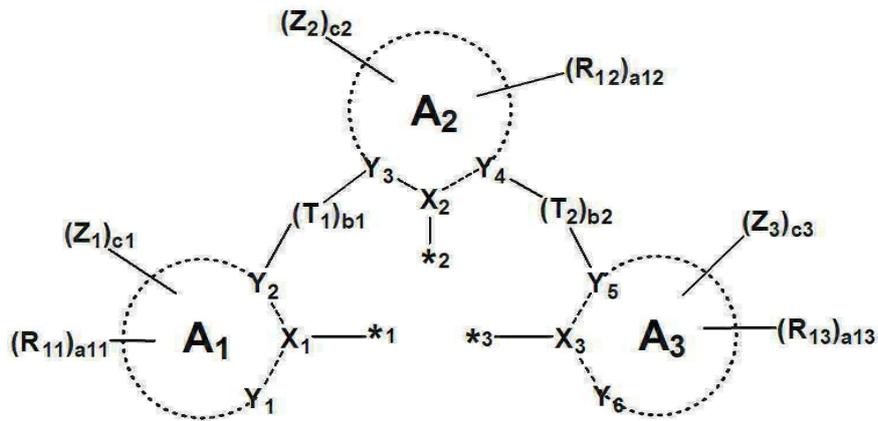
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물:

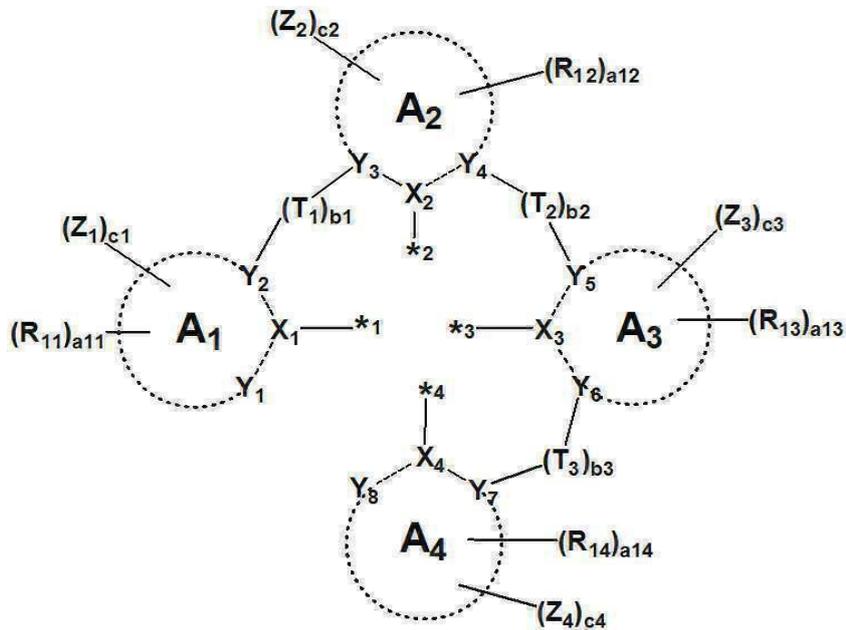
<화학식 1>



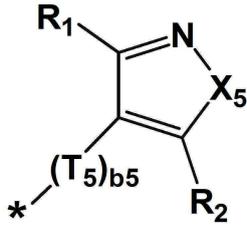
<화학식 2A>



<화학식 2B>



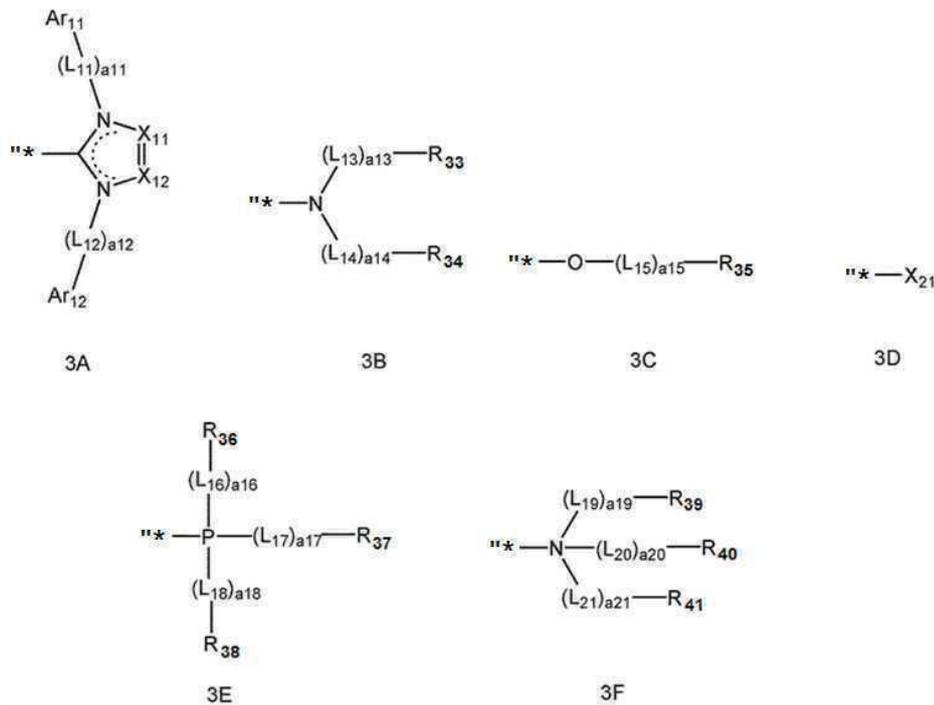
<화학식 3>



상기 화학식 1 중, M은 Pt 또는 Pd이고,

상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>은 상기 화학식 2A 또는 화학식 2B로 표시된 리간드이고, n<sub>1</sub>은 1이고,

상기 화학식 1 중 L<sub>2</sub>는 하기 화학식 3A 내지 3F로 표시되는 리간드 중에서 선택되고,



상기 화학식 3A 내지 3F 중,

X<sub>11</sub>은 N 및 C(R<sub>31</sub>) 중에서 선택되고, X<sub>12</sub>는 N 및 C(R<sub>32</sub>) 중에서 선택되고,

L<sub>11</sub> 내지 L<sub>21</sub>은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group) 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group) 중에서 선택되고;

a<sub>11</sub> 내지 a<sub>21</sub>은 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

Ar<sub>11</sub> 및 Ar<sub>12</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고;

R<sub>31</sub> 내지 R<sub>41</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노

기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 에서 선택되고;

R<sub>31</sub>과 R<sub>32</sub>는 선택적으로 서로 연결되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고, R<sub>33</sub>과 R<sub>34</sub>는 선택적으로 서로 연결되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,

X<sub>21</sub>는 -F, -Cl, -Br 및 -I 중에서 선택되고,

"\*는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고;

n<sub>2</sub>는 0 또는 1이고,

상기 화학식 1 중 n<sub>1</sub> + n<sub>2</sub>은 1 또는 2이고,

상기 화학식 2A 및 2B 중 \*<sup>1</sup>, \*<sup>2</sup>, \*<sup>3</sup> 및 \*<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

X<sub>1</sub>은 N 또는 C이고, X<sub>2</sub>는 N 또는 C이고, X<sub>3</sub>은 N 또는 C이고, X<sub>4</sub>는 N 또는 C이고,

Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>8</sub>은 서로 독립적으로 N 또는 C이고,

X<sub>1</sub>과 Y<sub>1</sub> 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

X<sub>1</sub>과 Y<sub>2</sub> 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

X<sub>2</sub>와 Y<sub>3</sub> 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

X<sub>2</sub>와 Y<sub>4</sub> 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

X<sub>3</sub>과 Y<sub>5</sub> 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

X<sub>3</sub>과 Y<sub>6</sub> 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

X<sub>4</sub>와 Y<sub>7</sub> 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

X<sub>4</sub>와 Y<sub>8</sub> 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

고리 A<sub>1</sub> 내지 고리 A<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 방향족 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹 또는 방향족 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹이고,

T<sub>1</sub> 내지 T<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, \*-N(R<sub>15</sub>)-\*', \*-S-\*' 또는 \*-O-\*'이고,

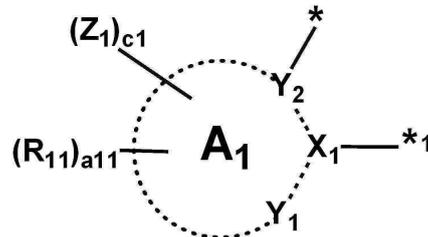
R<sub>15</sub> 및 R<sub>16</sub>은 선택적으로(optionally), R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 중 인접한 치환기에 결합하여, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

b<sub>1</sub> 내지 b<sub>3</sub>은 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고, b<sub>1</sub>이 0일 경우 \*(T<sub>1</sub>)<sub>b1</sub>-\*'은 단일 결합이 되고, b<sub>2</sub>가 0일 경우 \*(T<sub>2</sub>)<sub>b2</sub>-\*'는 단일 결합이 되고, b<sub>3</sub>가 0일 경우 \*(T<sub>3</sub>)<sub>b3</sub>-\*'는 단일 결합이 되고,

\* 및 \*'는 서로 독립적으로 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 상기 화학식 3으로 표시되고,

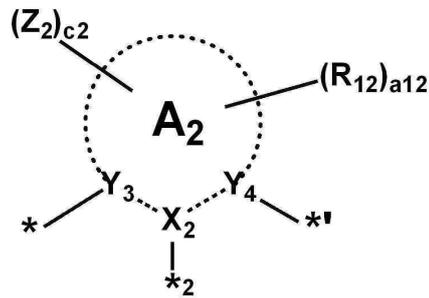
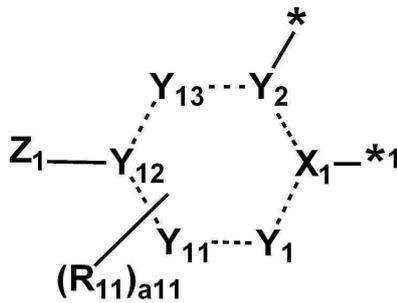
c1 내지 c4는 각각 0, 1, 2 또는 3이고,  
 상기 화학식 2A 중 c1+c2+c3는 1 이상이고,  
 상기 화학식 2B 중 c1+c2+c3+c4는 1 이상이고,



(i) 상기 c1이 1이고, 화학식 2A 또는 2B 중 1-1로 표시되거나,

모이어티가 하기 화학식 4A-

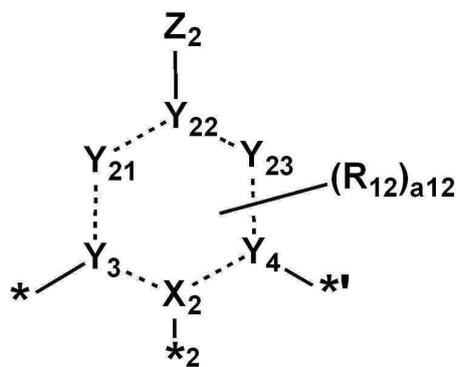
<화학식 4A-1-1>



(ii) 상기 c2가 1이고, 화학식 2A 또는 2B 중 4B-1-1로 표시되고,

모이어티가 하기 화학식

<화학식 4B-1-1>



상기 화학식 4A-1-1 및 4B-1-1 중,

Y11, Y12, Y13, Y21, Y22 및 Y23은 서로 독립적으로 N 또는 C이고,

\* 및 \*<sup>1</sup>는 서로 독립적으로 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

\*<sup>1</sup> 및 \*<sup>2</sup>는 서로 독립적으로 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

상기 화학식 3 중, T<sub>5</sub>는 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹이고,

b<sub>5</sub>는 0 내지 5의 정수이고,

X<sub>5</sub>는 N(R<sub>3</sub>)이고,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되고,

a<sub>11</sub> 내지 a<sub>14</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹 및 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹의 치환기는,

중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

-Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>);

중에서 선택되고,

상기  $Q_1$  내지  $Q_3$ ,  $Q_{11}$  내지  $Q_{13}$ ,  $Q_{21}$  내지  $Q_{23}$  및  $Q_{31}$  내지  $Q_{33}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{60}$ 알키닐기,  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알킬기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기,  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

**청구항 2**

제1항에 있어서,  
상기 화학식 1 중 M은 백금이고, n2가 0인, 유기금속 화합물.

**청구항 3**

제1항에 있어서,  
상기 고리  $A_1$  내지  $A_4$ 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 파이렌 그룹, 플루오란텐 그룹, 테트라센 그룹, 크라이센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 페틸렌 그룹, 인텐 그룹, 아세나프텐 그룹, 비페닐 그룹, 터페닐 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피라지닐 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹 및 벤조티아디아졸 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

**청구항 4**

제1항에 있어서,  
상기 고리  $A_1$  내지  $A_4$ 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹 및 이미다조피라지닐 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

**청구항 5**

제1항에 있어서,  
상기  $R_1$  및  $R_2$ 는 서로 독립적으로, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기, 및 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

**청구항 6**

제1항에 있어서, b5는 0인, 유기금속 화합물

**청구항 7**

제1항에 있어서,  
상기  $R_3$  및  $R_{11}$  내지  $R_{16}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 페닐기, 나프틸기, 비페닐기 및 터페닐기; 및  
중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 벤조나프토피라닐기, 디벤

조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 비페닐기 및 터페닐기;

중에서 선택된, 유기금속 화합물.

**청구항 8**

삭제

**청구항 9**

삭제

**청구항 10**

제1항에 있어서, 상기 화학식 4A-1-1 및 4B-1-1 중,

$Y_{12}$  및  $Y_{22}$ 는 각각 C인, 유기금속 화합물.

**청구항 11**

제1항에 있어서,

상기  $T_1$  내지  $T_3$  중 적어도 하나가  $^*N(R_{15})-^*$ 인 경우에,

상기  $R_{15}$ 는 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아릴기이거나, 선택적으로  $R_{11}$  내지  $R_{14}$  중 인접한 치환기에 결합하여, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 헤테로시클릭 그룹을 형성하는, 유기금속 화합물.

**청구항 12**

제11항에 있어서,

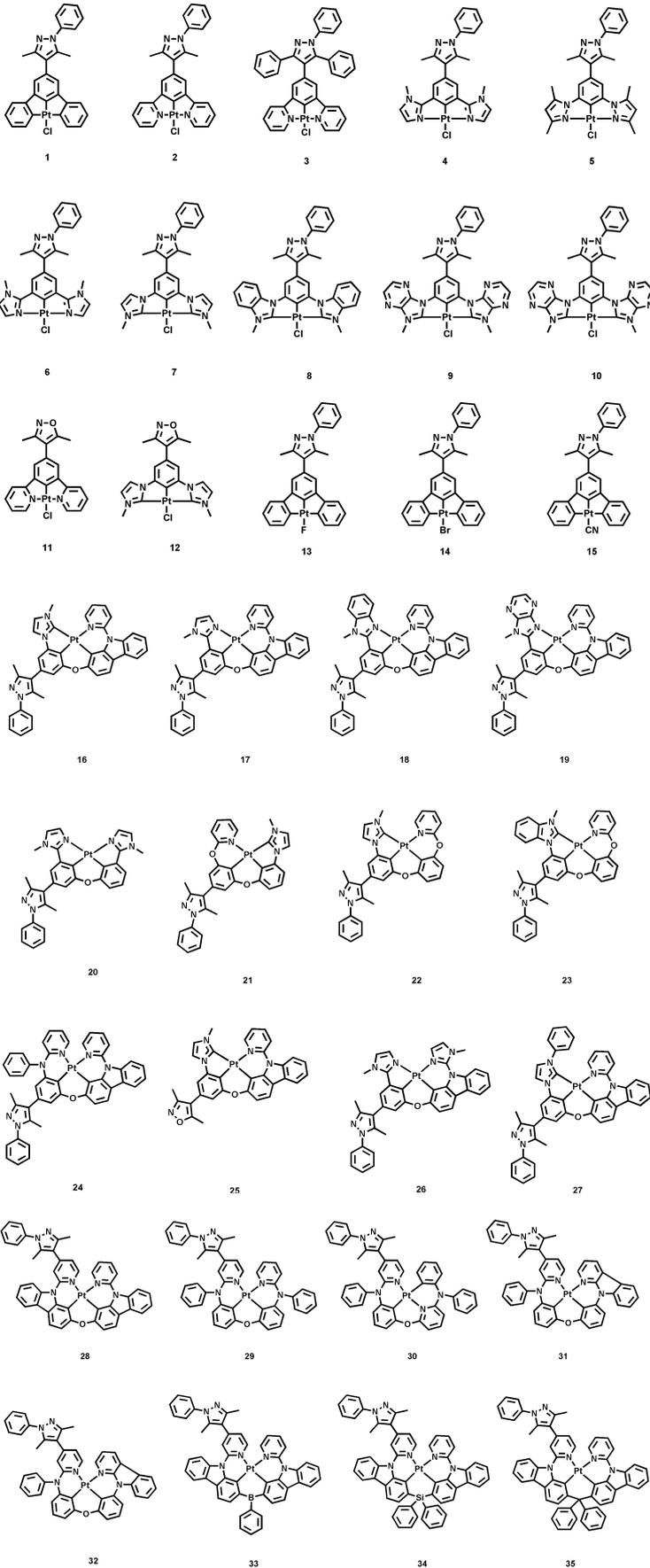
상기  $R_{15}$ 는 치환 또는 비치환된 페닐기이거나, 선택적으로  $R_{11}$  내지  $R_{14}$  중 어느 하나와 카바졸 고리 또는 아자카바졸 고리를 형성하는, 유기금속 화합물.

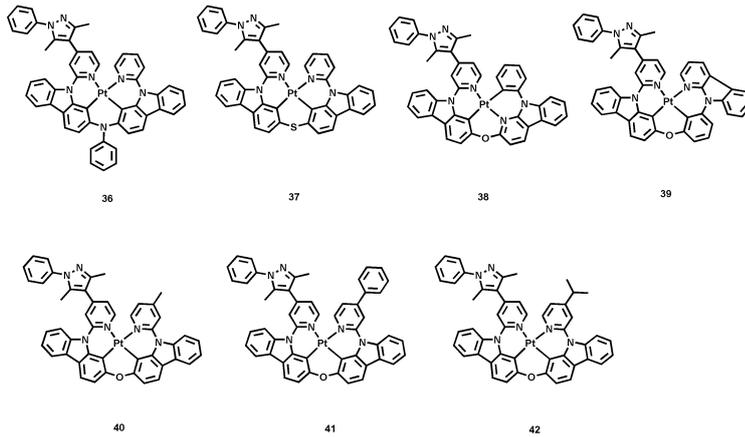
**청구항 13**

삭제

청구항 14

하기 화합물 1 내지 42 중에서 선택된, 유기금속 화합물:





**청구항 15**

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

상기 유기층은 상기 제1항 내지 제7항, 제10항 내지 제12항 및 제14항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한다, 유기 발광 소자.

**청구항 16**

제15항에 있어서,

상기 제1전극이 애노드이고,

상기 제2전극이 캐소드이고,

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

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

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

**청구항 17**

제16항에 있어서,

상기 발광층에 상기 유기금속 화합물이 포함되어 있고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함하고, 중량을 기준으로, 상기 발광층 중 호스트의 함량이 상기 발광층 중 상기 유기금속 화합물의 함량보다 큰, 유기 발광 소자.

**청구항 18**

제16항에 있어서,

상기 전자 저지층 또는 정공 저지층이 상기 유기금속 화합물을 포함한다, 유기 발광 소자.

**청구항 19**

제17항에 있어서,

상기 호스트가 실리콘-함유 화합물 및 포스핀 옥사이드-함유 화합물 중 적어도 하나를 포함한다, 유기 발광 소자.

**청구항 20**

제16항에 있어서,  
 상기 제1전극 또는 제2전극 상에 캡핑층을 더 포함하고,  
 상기 캡핑층이 상기 유기금속 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

**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.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

(특허문헌 0001) WO 2000-070655 A2

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

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

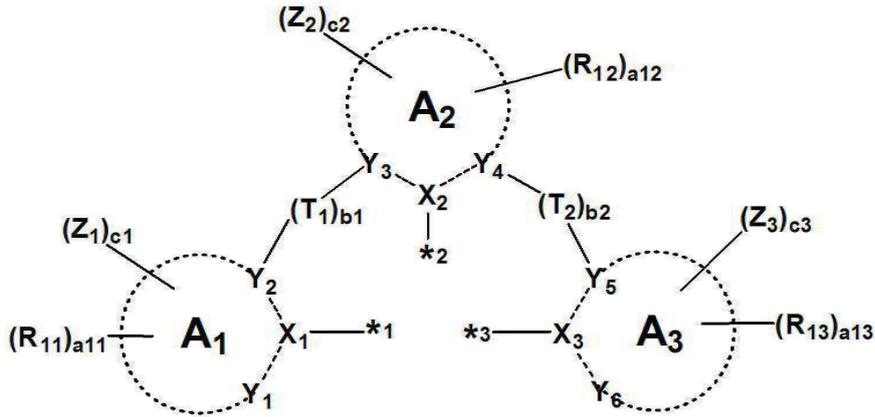
**과제의 해결 수단**

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

[0006] <화학식 1>

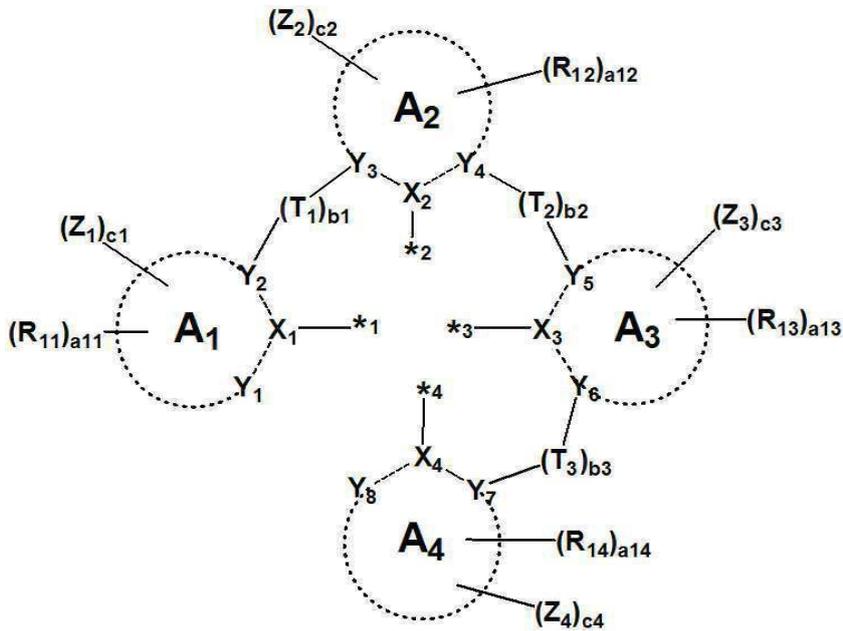
[0007]  $M(L_1)_{n1}(L_2)_{n2}$

[0008] <화학식 2A>



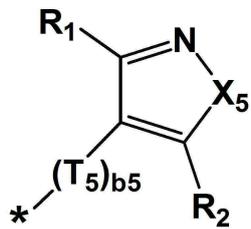
[0009]

[0010] <화학식 2B>



[0011]

[0012] <화학식 3>



[0013]

[0014] 상기 화학식 1 중, M은 Pt, Pd, Ir 또는 Os이고,

[0015] 상기 화학식 1 중 L<sub>1</sub>은 상기 화학식 2A 또는 화학식 2B로 표시된 리간드이고, n<sub>1</sub>은 1 또는 2이고, n<sub>1</sub>이 2일 경우, 2 이상의 L<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이하고,

[0016] 상기 화학식 1 중 L<sub>2</sub>는 1가 유기 리간드 또는 2가 유기 리간드이고, n<sub>2</sub>는 1 또는 2이고,

[0017] 상기 화학식 1 중 n<sub>1</sub> + n<sub>2</sub>은 1, 2 또는 3이고,

[0018] 상기 화학식 2A 및 2B 중 \*<sup>1</sup>, \*<sup>2</sup>, \*<sup>3</sup> 및 \*<sup>4</sup>는 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

- [0019]  $X_1$ 은 N 또는 C이고,  $X_2$ 는 N 또는 C이고,  $X_3$ 은 N 또는 C이고,  $X_4$ 는 N 또는 C이고,
- [0020]  $Y_1$  내지  $Y_8$ 은 서로 독립적으로 N 또는 C이고,
- [0021]  $X_1$ 과  $Y_1$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0022]  $X_1$ 과  $Y_2$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0023]  $X_2$ 와  $Y_3$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0024]  $X_2$ 와  $Y_4$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0025]  $X_3$ 과  $Y_5$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0026]  $X_3$ 과  $Y_6$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0027] 고리  $A_1$  내지 고리  $A_4$ 는 서로 독립적으로  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는  $C_2$ - $C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0028]  $T_1$  내지  $T_3$ 는 서로 독립적으로,  $*-N[(L_5)_{a5}-(R_{15})]-*$ ,  $*-B(R_{15})-*$ ,  $*-P(R_{15})-*$ ,  $*-C(R_{15})(R_{15})-*$ ,  $*-Si(R_{15})(R_{15})-*$ ,  $*-Ge(R_{15})(R_{16})-*$ ,  $*-S-*$ ,  $*-Se-*$ ,  $*-O-*$ ,  $*-C(=O)-*$ ,  $*-S(=O)-*$ ,  $*-S(=O)_2-*$ ,  $*-C(R_{15})=*$ ,  $*=C(R_{15})-*$ ,  $*-C(R_{15})=C(R_{16})-*$ ,  $*-C(=S)-*$  및  $*-C\equiv C-*$  중에서 선택되고,
- [0029]  $a_5$ 는 1 내지 3 중에서 선택되고,  $a_5$ 는 2 이상일 경우 2 이상의  $L_5$ 는 서로 동일하거나 상이하고,
- [0030]  $R_{15}$  및  $R_{16}$ 은 선택적으로(optionally),  $R_{11}$  내지  $R_{14}$  중 인접한 치환기에 결합하여, 치환 또는 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0031]  $b_1$  내지  $b_4$ 는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고,  $b_1$ 이 0일 경우  $*(T_1)_{b1}-*$ 은 단일 결합이 되고,  $b_2$ 가 0일 경우  $*(T_2)_{b2}-*$ 는 단일 결합이 되고,  $b_3$ 가 0일 경우  $*(T_3)_{b3}-*$ 는 단일 결합이 되고,  $b_4$ 가 0일 경우  $*(T_4)_{b4}-*$ 는 단일 결합이 되고,
- [0032] \* 및 \*'는 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,
- [0033]  $Z_1$  내지  $Z_4$ 는 상기 화학식 3으로 표시되고,
- [0034]  $c_1$  내지  $c_4$ 는 각각 0, 1, 2 또는 3이고,
- [0035] 상기 화학식 2A 중  $c_1+c_2+c_3$ 는 1 이상이고,
- [0036] 상기 화학식 2B 중  $c_1+c_2+c_3+c_4$ 는 1 이상이고,
- [0037] 상기 화학식 3 중,  $T_5$ 는 치환 또는 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0038]  $b_5$ 는 0 내지 5의 정수이고,
- [0039]  $X_5$ 는 O, S 또는  $N(R_3)$ 이고,
- [0040]  $R_1$  내지  $R_3$  및  $R_{11}$  내지  $R_{16}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 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 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,  $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ ,  $-N(Q_1)(Q_2)$ ,

-B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되고,

[0041] 상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹 및 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는,

[0042] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

[0043] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

[0044] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0045] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0046] -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>);

[0047] 중에서 선택되고,

[0048] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>13</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>23</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

[0049] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상술한 바와 같은 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

**발명의 효과**

[0050] 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0051] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0052] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0053] <화학식 1>

[0054]  $M(L_1)_{n1}(L_2)_{n2}$

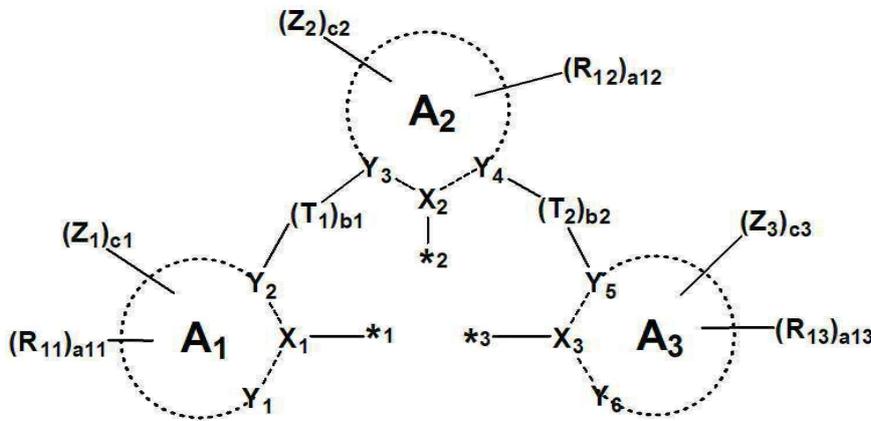
[0055] 상기 화학식 1 중, M은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 이리듐(Ir) 또는 오스뮴(Os)일 수 있다.

[0056] 일 구현예에 따르면, M은 백금일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

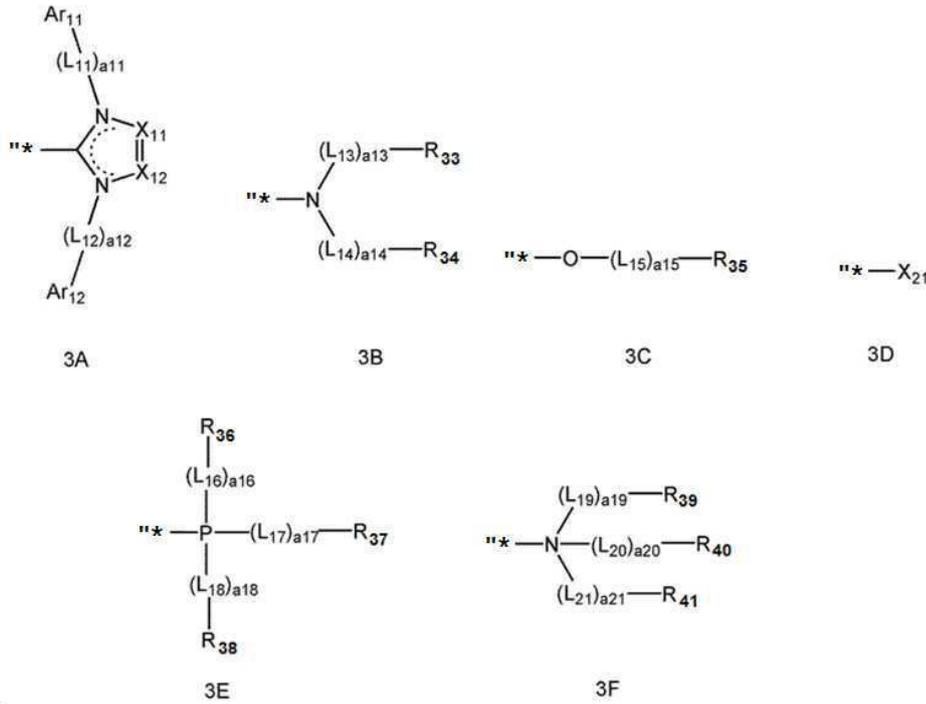
[0057] 상기 화학식 1 중  $L_1$ 은 상기 화학식 2A 또는 화학식 2B로 표시된 리간드이고,  $n_1$ 은 1 또는 2이고,  $n_1$ 이 2일 경우, 2 이상의  $L_1$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0058] 일 구현예에 따르면  $n_1$ 은 1이고, 다만 이에 한정되는 것은 아니다.

[0059] <화학식 2A>



에 한정되는 것은 아니다.



[0066]

[0067]

[0068]

[0069]

[0070]

[0071]

[0072]

[0073]

상기 화학식 3A 내지 3F 중,

X<sub>11</sub>은 N 및 C(R<sub>31</sub>) 중에서 선택되고, X<sub>12</sub>는 N 및 C(R<sub>32</sub>) 중에서 선택되고,

L<sub>11</sub> 내지 L<sub>21</sub>은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic condensed polycyclic group) 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(substituted or unsubstituted divalent non-aromatic hetero-condensed polycyclic group) 중에서 선택되고;

a<sub>11</sub> 내지 a<sub>21</sub>은 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고;

Ar<sub>11</sub> 및 Ar<sub>12</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고;

R<sub>31</sub> 내지 R<sub>32</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 및 -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택되고;

R<sub>31</sub>과 R<sub>32</sub>는 선택적으로 서로 연결되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고, R<sub>33</sub>과 R<sub>34</sub>는 선택적으로 서로 연

결되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,

- [0074] X<sub>21</sub>는 -F, -Cl, -Br 및 -I 중에서 선택되고,
- [0075] "\*"는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고;
- [0076] 상기 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0077] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0078] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0079] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0080] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0081] -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>); 중에서 선택되고,
- [0082] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>13</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>23</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.
- [0083] 또 하나의 구현예에 따르면, 상기 L<sub>2</sub>는 -F, -Cl, -Br 및 시아노기 중에서 선택될 수 있다.
- [0084] 일 구현예에 따르면, 상기 n<sub>2</sub>는 0이나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0085] 상기 화학식 1 중 n<sub>1</sub> + n<sub>2</sub>은 1, 2 또는 3일 수 있다.

- [0086] 일 구현예에 따르면,  $n_1 + n_2$ 은 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0087] 상기 화학식 2A 및 2B 중  $*^1$ ,  $*^2$ ,  $*^3$  및  $*^4$ 는 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.
- [0088] 상기 화학식 2A 및 2B 중, 상기  $X_1$ 은 N 또는 C이고,  $X_2$ 는 N 또는 C이고,  $X_3$ 은 N 또는 C이고,  $X_4$ 는 N 또는 C일 수 있다.
- [0089] 상기 화학식 2A 및 2B 중, 상기  $Y_1$  내지  $Y_8$ 은 서로 독립적으로 N 또는 C일 수 있다.
- [0090] 상기 화학식 2A 및 2B 중,
- [0091] 상기  $X_1$ 과  $Y_1$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0092]  $X_1$ 과  $Y_2$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0093]  $X_2$ 와  $Y_3$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0094]  $X_2$ 와  $Y_4$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0095]  $X_3$ 과  $Y_5$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0096]  $X_3$ 과  $Y_6$  사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합일 수 있다.
- [0097] 상기 화학식 2A 및 2B 중, 상기 고리  $A_1$  내지 고리  $A_4$ 는 서로 독립적으로  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는  $C_2$ - $C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹일 수 있다.
- [0098] 일 구현예에 따르면, 상기 고리  $A_1$  내지  $A_4$ 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 파이렌 그룹, 플루오란텐 그룹, 테트라센 그룹, 크라이센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 페릴렌 그룹, 인덴 그룹, 아세나프텐 그룹, 비페닐 그룹, 터페닐 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피라지닐 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹 및 벤조티아디아졸 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0099] 다른 구현예에 따르면, 상기 고리  $A_1$  내지  $A_4$ 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피라지닐 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹 및 벤조티아디아졸 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0100] 또 하나의 구현예에 따르면, 상기 고리  $A_1$  내지  $A_4$ 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 트리아진 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹 및 이미다조피라지닐 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0101] 상기 화학식 2A 및 2B 중,  $T_1$  내지  $T_3$ 는 서로 독립적으로,  $*-N[(L_5)_{a_5}-(R_{15})]-*$ ,  $*-B(R_{15})-*$ ,  $*-P(R_{15})-*$ ,  $*-C(R_{15})(R_{15})-*$ ,  $*-Si(R_{15})(R_{15})-*$ ,  $*-Ge(R_{15})(R_{16})-*$ ,  $*-S-*$ ,  $*-Se-*$ ,  $*-O-*$ ,  $*-C(=O)-*$ ,  $*-S(=O)-*$ ,  $*-S(=O)_2-*$ ,  $*-C(R_{15})=*$ ,  $*=C(R_{15})-*$ ,  $*-C(R_{15})=C(R_{16})-*$ ,  $*-C(=S)-*$  및  $*-C\equiv C-*$  중에서 선택될 수 있고,
- [0102]  $a_5$ 는 1 내지 3 중에서 선택되고,  $a_5$ 는 2 이상일 경우 2 이상의  $L_5$ 는 서로 동일하거나 상이하고,
- [0103]  $R_{15}$  및  $R_{16}$ 은 선택적으로(optionally),  $R_{11}$  내지  $R_{14}$  중 인접한 치환기에 결합하여, 치환 또는 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.
- [0104] 일 구현예에 따르면, 상기  $T_1$  내지  $T_3$  중 적어도 하나가  $*-N[(L_5)_{a_5}-(R_{15})]-*$  인 경우에, 상기  $R_{15}$ 는 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 아릴기이거나, 선택적으로  $R_{11}$  내지  $R_{14}$  중 인접한 치환기에 결합하여, 치환 또는 비치환된  $C_1$ -

C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.

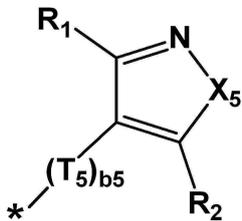
[0105] 다른 구현예에 따르면, 상기 R<sub>15</sub>는 치환 또는 비치환된 페닐기이거나, 선택적으로 L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub> 중 어느 하나와 치환 또는 비치환된 카바졸 고리 또는 치환 또는 비치환된 아자카바졸 고리를 형성할 수 있고, 다만 이에 한정되는 것은 아니다.

[0106] 상기 화학식 2A 및 2B 중, b<sub>1</sub> 내지 b<sub>4</sub>는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3일 수 있다. 상기 b<sub>1</sub>이 0일 경우 \*(T<sub>1</sub>)<sub>b1</sub>-\*'은 단일 결합이 되고, b<sub>2</sub>가 0일 경우 \*(T<sub>2</sub>)<sub>b2</sub>-\*'은 단일 결합이 되고, b<sub>3</sub>가 0일 경우 \*(T<sub>3</sub>)<sub>b3</sub>-\*'은 단일 결합이 되고, b<sub>4</sub>가 0일 경우 \*(T<sub>4</sub>)<sub>b4</sub>-\*'은 단일 결합이 되고, \* 및 \*'는 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0107] 상기 화학식 2A 및 2B 중, Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 하기 화학식 3으로 표시될 수 있고, c<sub>1</sub> 내지 c<sub>4</sub>는 각각 0, 1, 2 또는 3일 수 있다.

[0108] 상기 화학식 2A 및 2B 중, 상기 화학식 2A 중 c<sub>1</sub>+c<sub>2</sub>+c<sub>3</sub>는 1 이상이고, 상기 화학식 2B 중 c<sub>1</sub>+c<sub>2</sub>+c<sub>3</sub>+c<sub>4</sub>는 1 이상이다.

[0109] <화학식 3>



[0110] 상기 화학식 3 중, T<sub>5</sub>는 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

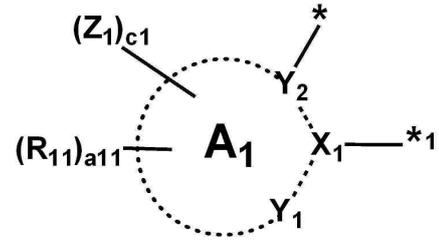
[0112] 일 구현예에 따르면, 상기 T<sub>5</sub>는 상기 고리 A<sub>1</sub> 내지 A<sub>4</sub>는 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 파이렌 그룹, 플루오란텐 그룹, 테트라센 그룹, 크라이센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 페릴렌 그룹, 인덴 그룹, 아세나프텐 그룹, 비페닐 그룹, 터페닐 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피라지닐 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹 및 벤조티아디아졸 그룹; 및

[0113] 중수소, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -F, -Cl, -Br, 시아노기, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 페날레닐기, 파이레닐기, 플루오란테닐기, 테트라세닐기, 크라이세닐기, 트리페릴레닐기, 벤조플루오레닐기, 페릴레닐기, 인데닐기, 아세나프틸렌기, 비페닐기, 터페닐기, 피리딜기, 피리미딜기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 페난트롤리닐기, 피라졸일기, 이미다졸일기, 트리아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사디아졸일기, 티아디아졸일기, 벤조피라졸일기, 벤조이미다졸일기, 이미다조피라지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤조티아졸기, 벤조옥사디아졸기 및 벤조티아디아졸일기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 파이렌 그룹, 플루오란텐 그룹, 테트라센 그룹, 크라이센 그룹, 트리페닐렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 페릴렌 그룹, 인덴 그룹, 아세나프텐 그룹, 비페닐 그룹, 터페닐 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이미다조피라지닐 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥

사디아졸 그룹 및 벤조티아디아졸 그룹;

- [0114] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0115] 상기 화학식 3 중, b5는 0 내지 5의 정수이다.
- [0116] 일 구현예에 따르면, 상기 b5는 0, 1 또는 2이다.
- [0117] 다른 구현예에 따르면, 상기 b5는 0이다.
- [0118] 상기 화학식 3 중, X<sub>5</sub>는 O, S 또는 N(R<sub>5</sub>)일 수 있다.
- [0119] 상기 화학식 3 중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)(Q<sub>3</sub>), -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -B(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -C(=O)(Q<sub>1</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>1</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>) 중에서 선택되고,
- [0120] 상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹 및 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는,
- [0121] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0122] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0123] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0124] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0125] -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>);

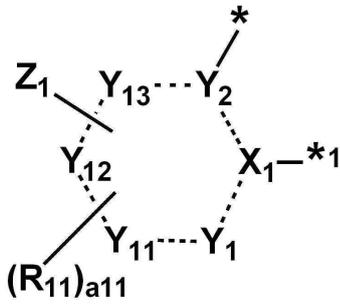
- [0126] 중에서 선택되고,
- [0127] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>13</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>23</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0128] 일 구현예에 따르면, 상기 R<sub>3</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기 중에서 선택될 수 있다.
- [0129] 다른 구현예에 따르면, 상기 R<sub>3</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 페닐기, 나프틸기, 비페닐기, 터페닐기, 피리딜기, 피리미딜기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 페난트롤리닐기, 피라졸일기, 이미다졸일기, 트리아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사디아졸일기, 티아디아졸일기, 벤조피라졸일기, 벤즈이미다졸일기, 벤즈옥사졸일기, 벤조티아졸기, 벤즈옥사디아졸기, 벤조티아디아졸일기, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀리닐기, 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및
- [0130] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 벤조나프토포라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 치환된 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 페닐기, 나프틸기, 비페닐기, 터페닐기, 피리딜기, 피리미딜기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 페난트롤리닐기, 피라졸일기, 이미다졸일기, 트리아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사디아졸일기, 티아디아졸일기, 벤조피라졸일기, 벤즈이미다졸일기, 벤즈옥사졸일기, 벤조티아졸기, 벤즈옥사디아졸기, 벤조티아디아졸일기, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀리닐기, 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;
- [0131] 중에서 선택될 수 있고, 다만 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0132] 또 하나의 구현예에 따르면, 상기 R<sub>3</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 페닐기, 나프틸기, 비페닐기 및 터페닐기; 및
- [0133] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 벤조나프토포라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 비페닐기 및 터페닐기;
- [0134] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



모이어

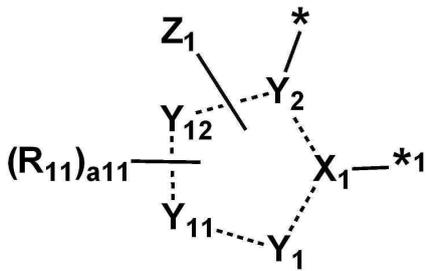
[0135] 일 구현예에 따르면, (i) 상기 c1이 1이고, 화학식 2A 또는 2B 중 하나가 하기 화학식 4A-1 또는 4A-2로 표시될 수 있다.

[0136] <화학식 4A-1>

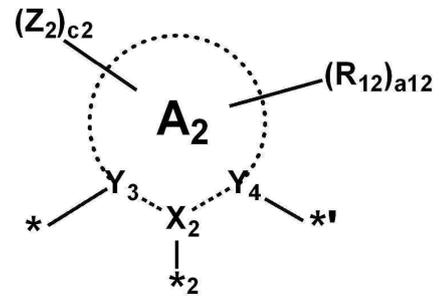


[0137]

[0138] <화학식 4A-2>



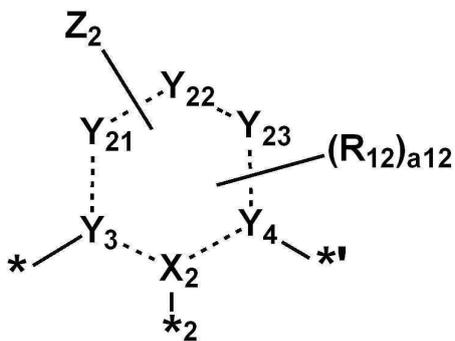
[0139]



모이어

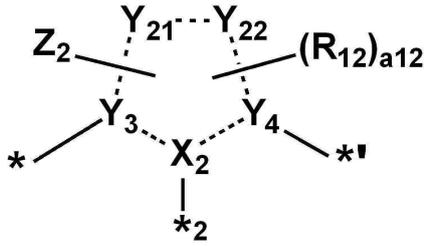
[0140] 다른 구현예에 따르면, 상기 c2가 1이고, 화학식 2A 또는 2B 중 하나가 하기 화학식 4B-1 또는 4B-2로 표시될 수 있다.

[0141] <화학식 4B-1>



[0142]

[0143] <화학식 4B-2>



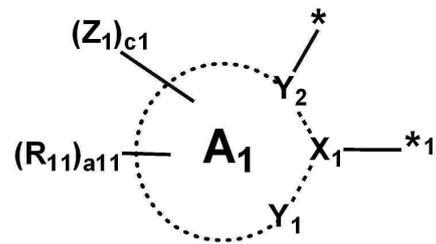
[0144]

[0145] 상기 화학식 4A-1, 4A-2, 4B-1 및 4B-2 중,

[0146]  $Y_{11}$ ,  $Y_{12}$ ,  $Y_{13}$ ,  $Y_{21}$ ,  $Y_{22}$  및  $Y_{23}$ 은 서로 독립적으로 N 또는 C이고,

[0147] \* 및 \*'는 서로 독립적으로 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

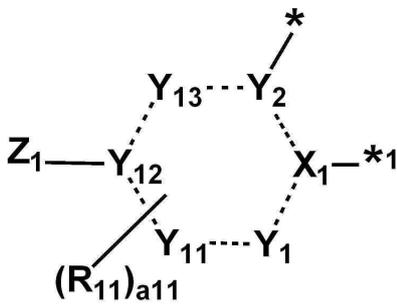
[0148] \*<sup>1</sup> 및 \*<sup>2</sup>는 서로 독립적으로 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.



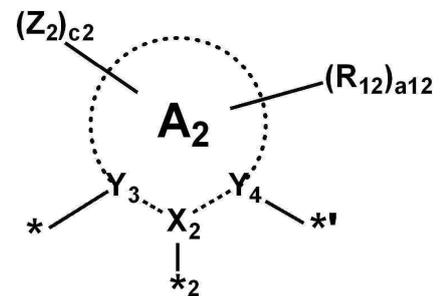
[0149] 일 구현예에 따르면, 상기 c1이 1이고, 화학식 2A 또는 2B 중 하기 화학식 4A-1-1로 표시될 수 있다.

모이어티가

[0150] <화학식 4A-1-1>



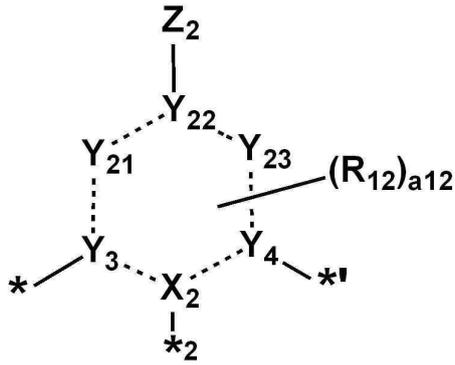
[0151]



[0152] 다른 구현예에 따르면, (ii) 상기 c2가 1이고, 화학식 2A 또는 2B 중 이어티가 하기 화학식 4B-1-1로 표시로 표시될 수 있다.

모

[0153] <화학식 4B-1-1>



[0154]

[0155] 상기 화학식 4A-1-1 및 4B-1-1 중,

[0156]  $Y_{11}$ ,  $Y_{12}$ ,  $Y_{13}$ ,  $Y_{21}$ ,  $Y_{22}$  및  $Y_{23}$ 은 서로 독립적으로 N 또는 C이고,

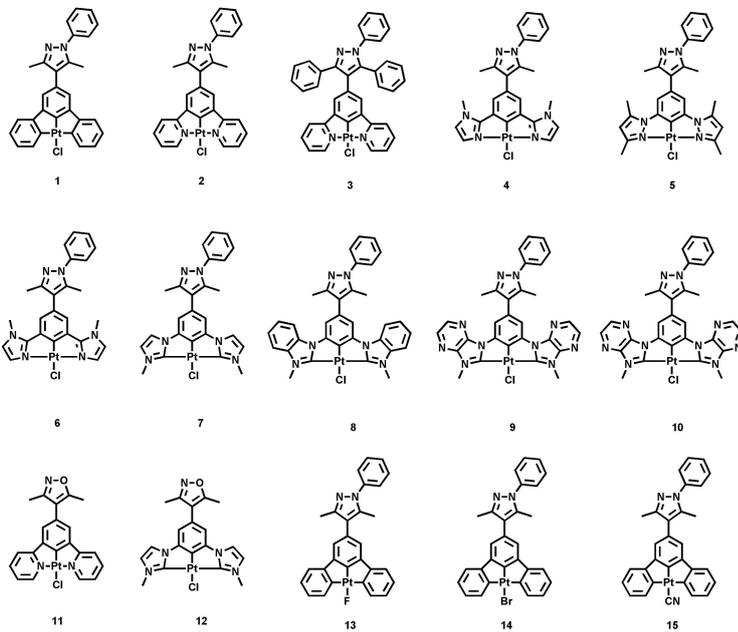
[0157] \* 및 \*'는 서로 독립적으로 이웃한 원자와의 결합 사이트이고,

[0158] \*<sup>1</sup> 및 \*<sup>2</sup>는 서로 독립적으로 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

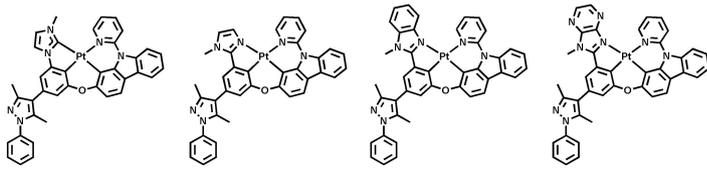
[0159] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 4A-1-1 및 4B-1-1 중,  $Y_{12}$  및  $Y_{22}$ 는 각각 C일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0160] 상기 화학식 4A-1, 4A-2, 4B-1, 4B-2, 4A-1-1 및 4B-1-1 중,  $Y_1$ ,  $Y_2$ ,  $Y_3$ ,  $Y_4$ ,  $Y_{11}$ ,  $Y_{12}$ ,  $Y_{13}$ ,  $Y_{21}$ ,  $Y_{22}$  및  $Y_{23}$  중 서로 인접한 2개는 단일 결합 또는 이중 결합될 수 있다.

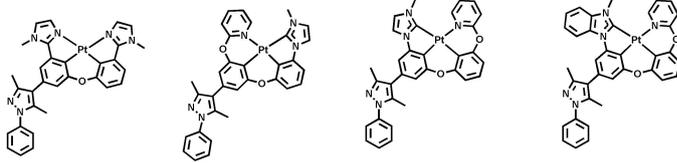
[0161] 일 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 상기 화합물 1 내지 42 중에서 n 개 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



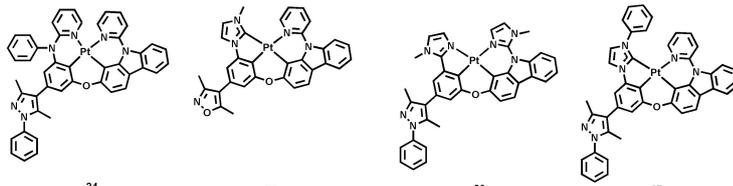
[0162]



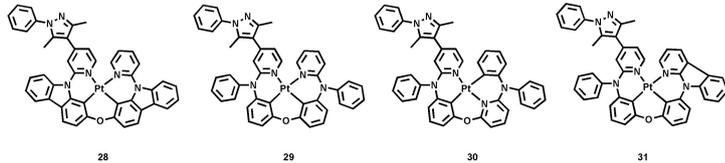
16 17 18 19



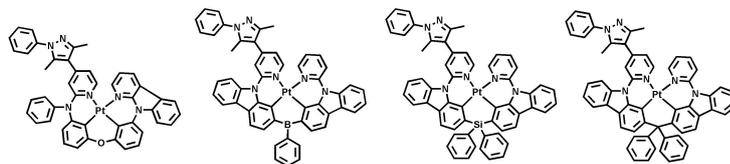
20 21 22 23



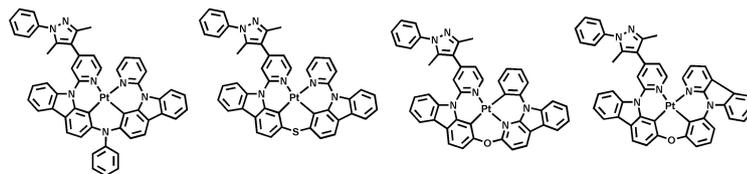
24 25 26 27



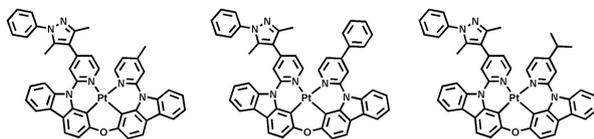
28 29 30 31



32 33 34 35



36 37 38 39



40 41 42

[0163]

[0164]

[0165]

[0166]

일반적으로 고체의 금속 착물, 특히 Pt(II)와 같은  $d^8$  평면 금속착물은 리간드-리간드, 금속-금속 또는 리간드-금속 상호작용과 같은 분자간의 강력한 상호작용으로 인하여 분자간 응집이 일어나기 쉽다. 이와 같은 현상에 의하여, 도핑의 정도가 당 기술분야에서 일반적으로 사용되는 정도인 약 0.1%를 초과할 경우, 발광층 내에서 착물 단위의 응집을 야기할 가능성이 높다. 이러한 응집물은 광학적 또는 전기적 여기시 소위 여기체(exciplex, 여기 복합체라고도 함)의 형성을 야기하고, 상기 여기체는 일정한 체계가 없는 광범위한 방출 밴드를 가져 순수한 기초색(RGB)의 구현을 상당히 어렵게 한다.

[0167]

상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 리간드는 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기로 반드시 치환되어

이속사줄 혹은 피라줄 치환체와 리간드가 직교하여 배향되게 된다. 따라서 치환체가 없는 구조보다 입체적 장애가 생기게 되며, 분자간 스택킹(stacking)으로 인한 엑시머(excimer) 형성을 저해하여 진한 청색광(deep blue)의 색 영역에서 고효율, 고수명을 갖는 발광 소자를 구현할 수 있다. 특히, 리간드와 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기가 C-C결합으로 연결될 때에, 뒤틀림 구조의 효과가 증대되어 엑시머 형성 억제 효과가 극대화된다.

- [0168] 상기 유기금속 화합물은 청색광을 방출할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은, 440nm 이상 및 495nm 이하의 최대 발광 파장, 예를 들면, 450nm 이상 및 465nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 청색광[배면 발광시 CIE<sub>x,y</sub> 색좌표 (0.14, 0.06) 내지 (0.14, 0.08)]을 방출할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은, 진한 청색광(deep blue)을 방출하는 유기 발광 소자 제작에 유용하게 사용될 수 있다.
- [0169] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0170] 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 할 수 있다.
- [0171] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함하는, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0172] 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.
- [0173] 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.
- [0174] 일 구현예에 따르면,
- [0175] 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 애노드이고,
- [0176] 상기 유기 발광 소자의 제2전극은 캐소드이고,
- [0177] 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고,
- [0178] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,
- [0179] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.  
일 구현예를 따르면, 상기 전자 저지층 또는 정공 저지층이 상기 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.  
일 구현예를 따르면, 상기 유기 발광 소자가 상기 제1전극 또는 제2전극 상에 캡핑층을 더 포함하고, 상기 캡핑층이 상기 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.
- [0180] 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.
- [0181] [도 1에 대한 설명]
- [0182] 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.
- [0183] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다

음과 같다.

[0184] [도 1에 대한 설명]

[0185] 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.

[0186] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.

[0187] [제1전극(110)]

[0188] 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.

[0189] 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.

[0190] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 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.

[0191] 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.

[0192] [유기층(150)]

[0193] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.

[0194] 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.

[0195] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]

[0196] 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.

[0197] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.

[0198] 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.

[0199] 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/도데실벤젠설포산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트))), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페솔산)), PANI/PSS (Polyaniline/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트))), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다:



치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0209] xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0210] xa5는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0211] R<sub>201</sub> 내지 R<sub>204</sub> 및 Q<sub>201</sub>은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0212] 예를 들어, 상기 화학식 202 중 R<sub>201</sub>과 R<sub>202</sub>는, 선택적으로(optionally), 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있고, R<sub>203</sub>과 R<sub>204</sub>는, 선택적으로, 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0213] \*일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,

[0214] L<sub>201</sub> 내지 L<sub>205</sub>는 서로 독립적으로,

[0215] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴어로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페달레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기; 및

[0216] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴어로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페달레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>) 및 -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴어로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페달레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 오발레닐렌기, 티오페닐렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오페닐렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오페닐렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기 및 피리디닐렌기;

[0217] 중에서 선택되고,

[0218] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0219] 다른 구현예에 따르면, xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

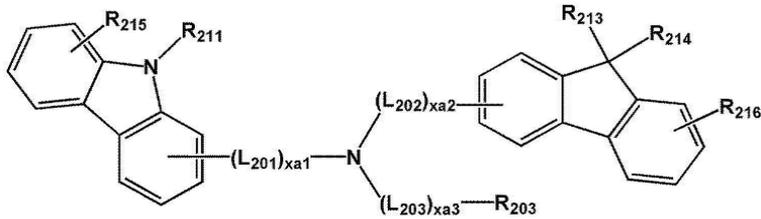
[0220] 또 다른 구현예에 따르면, xa5는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.

- [0221] 또 다른 구현예에 따르면, R<sub>201</sub> 내지 R<sub>204</sub> 및 Q<sub>201</sub>은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기; 및
- [0222] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>) 및 -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기;
- [0223] 중에서 선택될 수 있고,
- [0224] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0225] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R<sub>201</sub> 내지 R<sub>203</sub> 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,
- [0226] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및
- [0227] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;
- [0228] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0229] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R<sub>201</sub>과 R<sub>202</sub>은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R<sub>203</sub>과 R<sub>204</sub>은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.
- [0230] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R<sub>201</sub> 내지 R<sub>204</sub> 중 적어도 하나는,
- [0231] 카바졸일기; 및
- [0232] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;

[0233] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0234] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:

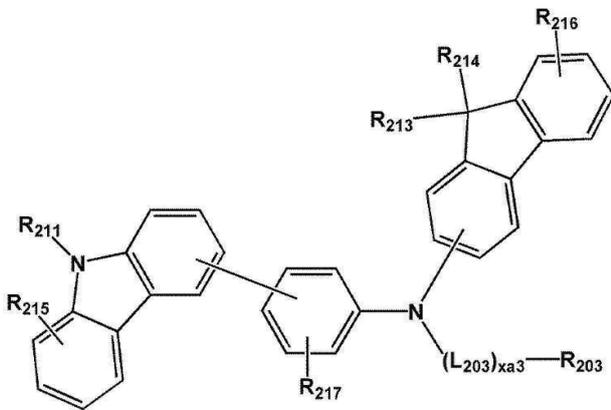
[0235] <화학식 201A>



[0236]

[0237] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

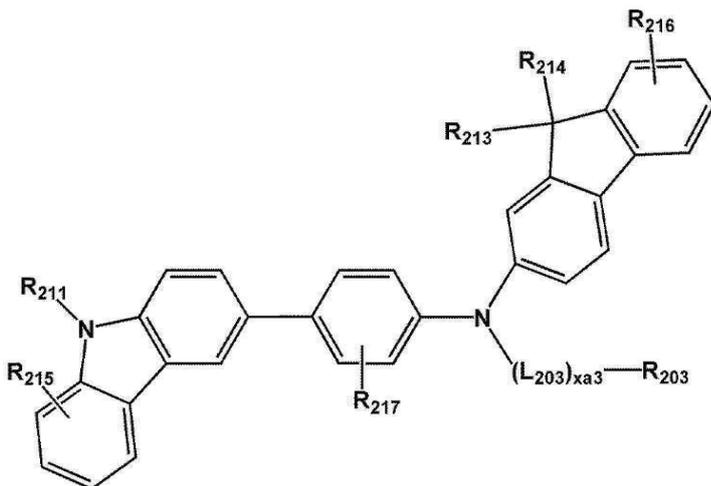
[0238] <화학식 201A(1)>



[0239]

[0240] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

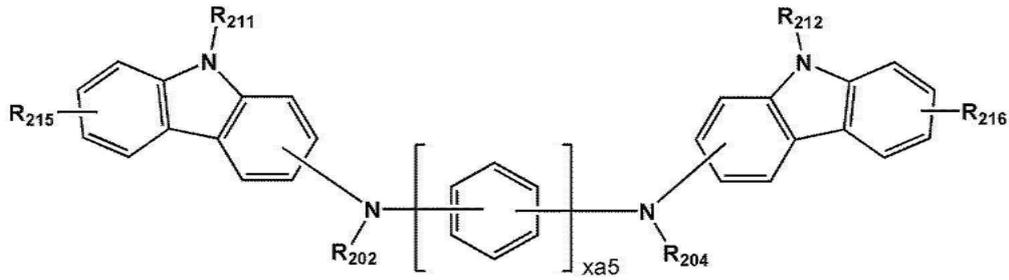
[0241] <화학식 201A-1>



[0242]

[0243] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

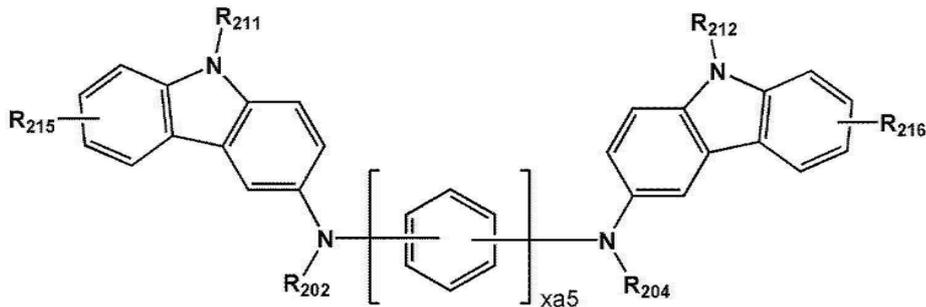
[0244] <화학식 202A>



[0245]

[0246] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0247] <화학식 202A-1>



[0248]

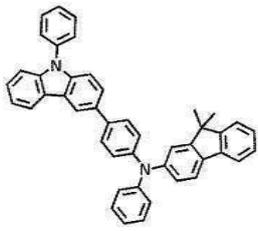
[0249] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

[0250] L<sub>201</sub> 내지 L<sub>203</sub>, xa<sub>1</sub> 내지 xa<sub>3</sub>, xa<sub>5</sub> 및 R<sub>202</sub> 내지 R<sub>204</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

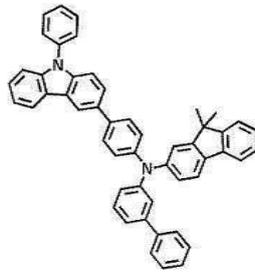
[0251] R<sub>211</sub> 및 R<sub>212</sub>에 대한 설명은 본 명세서 중 R<sub>203</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0252] R<sub>213</sub> 내지 R<sub>217</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헵테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 오발레닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기 및 피리디닐기 중에서 선택될 수 있다.

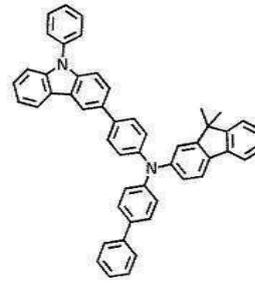
[0253] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



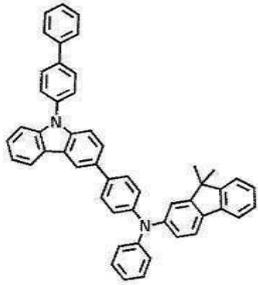
HT1



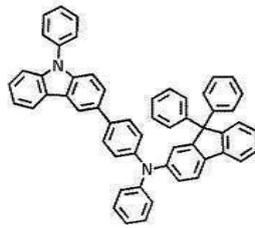
HT2



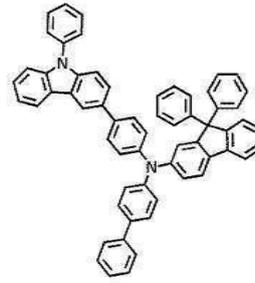
HT3



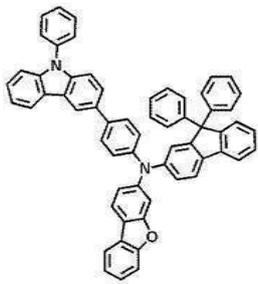
HT4



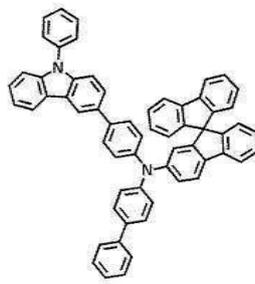
HT5



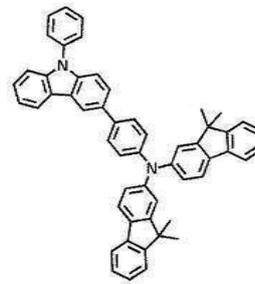
HT6



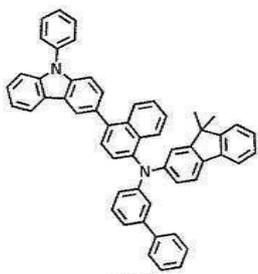
HT7



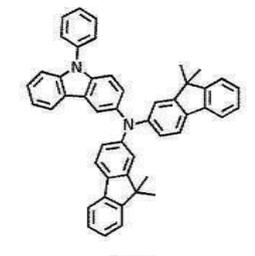
HT8



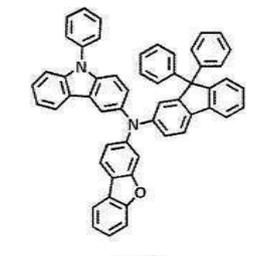
HT9



HT10



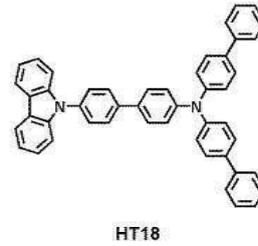
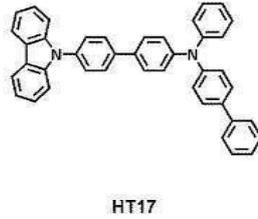
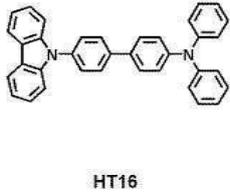
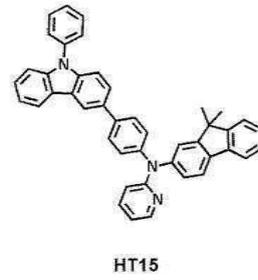
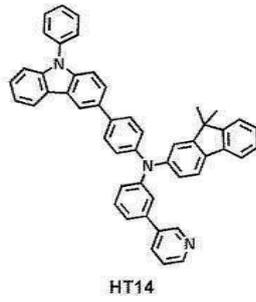
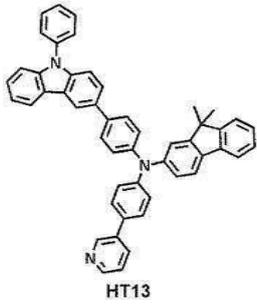
HT11



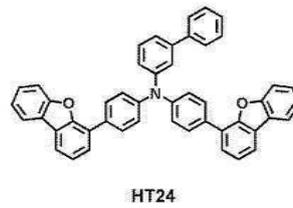
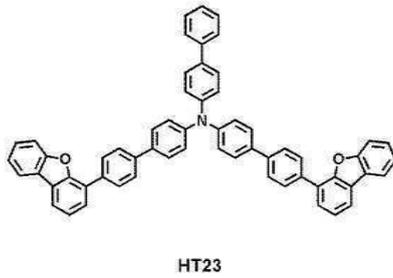
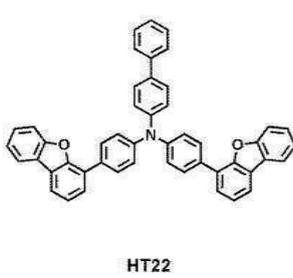
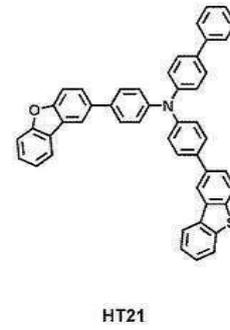
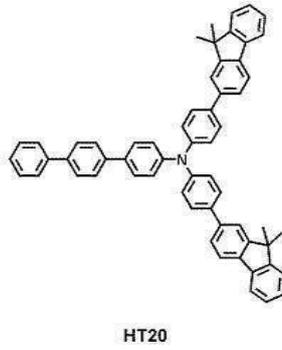
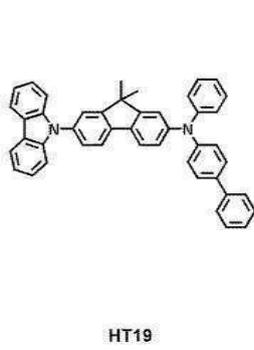
HT12

[0254]

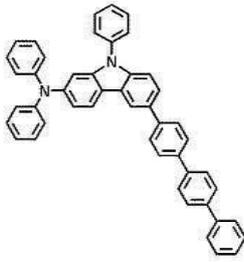
[0255]



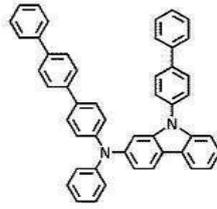
[0256]



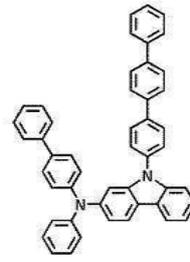
[0257]



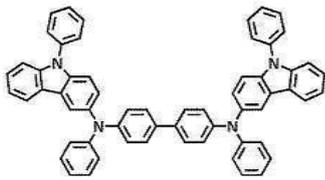
HT25



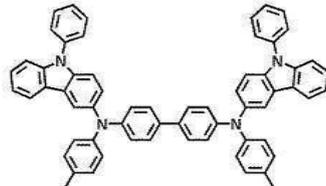
HT26



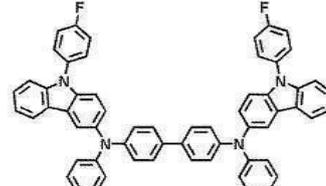
HT27



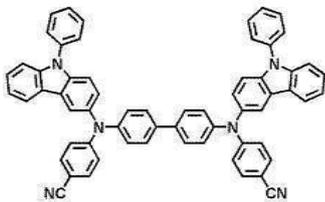
HT28



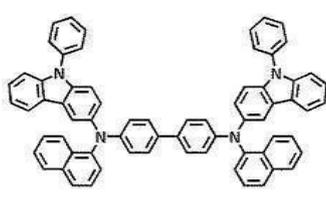
HT29



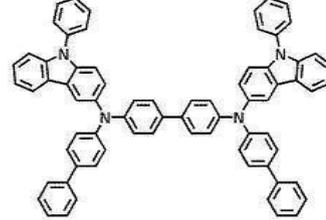
HT30



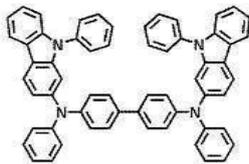
HT31



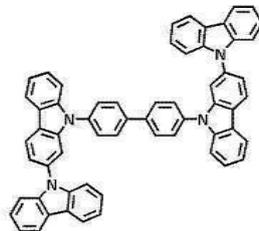
HT32



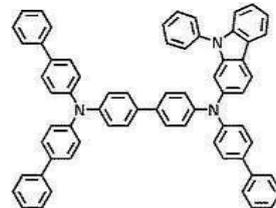
HT33



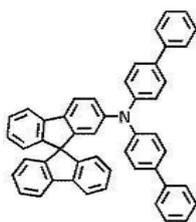
HT34



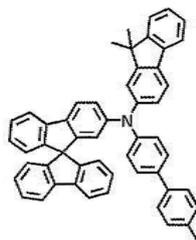
HT35



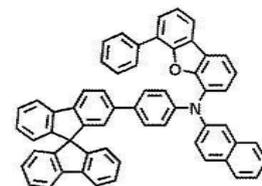
HT36



HT37



HT38



HT39

[0258]

[0259]

[0260]

[0261]

[0262]

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.

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.

[0263] [p-도펀트]

[0264] 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.

[0265] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0266] 일 구현예에 따르면, 상기 p-도펀트의 LUMO는 -3.5eV 보다 낮을 수 있다.

[0267] 상기 p-도펀트는, 퀸온 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0268] 예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0269] TCNQ (Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ (2,3,5,6-Tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀸온 유도체;

[0270] 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

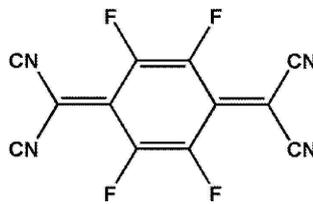
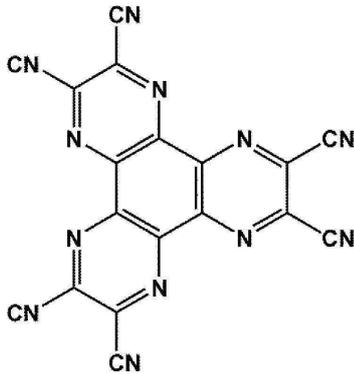
[0271] HAT-CN (1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile); 및

[0272] 하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

[0273] 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

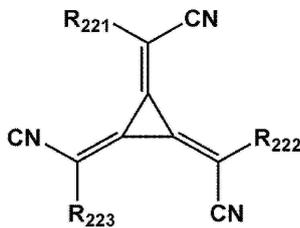
[0274] <HAT-CN>

<F4-TCNQ>



[0275]

[0276] <화학식 221>



[0277]

[0278] 상기 화학식 221 중,

[0279] R<sub>221</sub> 내지 R<sub>223</sub>은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R<sub>221</sub> 내지 R<sub>223</sub> 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, -Cl로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, -Br로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 및 -I로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

- [0280] [유기층(150) 중 발광층]
- [0281] 상기 유기 발광 소자(10)가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은, 개별 부화소별로, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은, 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중에서 선택된 2 이상의 층이 접촉 또는 이격되어 적층된 구조를 갖거나, 적색광 방출 물질, 녹색광 방출 물질 및 청색광 방출 물질 중에서 선택된 2 이상의 물질이 층구분없이 혼합된 구조를 가져, 백색광을 방출할 수 있다.
- [0282] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0283] 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.
- [0284] 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.
- [0285] [발광층 중 호스트]
- [0286] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0287] <화학식 301>
- [0288]  $[Ar_{301}]_{xb11}-[(L_{301})_{xb1}-R_{301}]_{xb21}$
- [0289] 상기 화학식 301 중,
- [0290]  $Ar_{301}$ 은 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{60}$ 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0291]  $xb11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0292]  $L_{301}$ 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  $C_6-C_{60}$ 아틸렌기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로아틸렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,
- [0293]  $xb1$ 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0294]  $R_{301}$ 은, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 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  $C_6-C_{60}$ 아틸기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{60}$ 아틸티오기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로아틸기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,  $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$ ,  $-N(Q_{301})(Q_{302})$ ,  $-B(Q_{301})(Q_{302})$ ,  $-C(=O)(Q_{301})$ ,  $-S(=O)_2(Q_{301})$  및  $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$  중에서 선택되고,
- [0295]  $xb21$ 는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0296]  $Q_{301}$  내지  $Q_{303}$ 는 서로 독립적으로,  $C_1-C_{10}$ 알킬기,  $C_1-C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0297] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중  $Ar_{301}$ 은,
- [0298] 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스피이로-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

[0299] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 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;

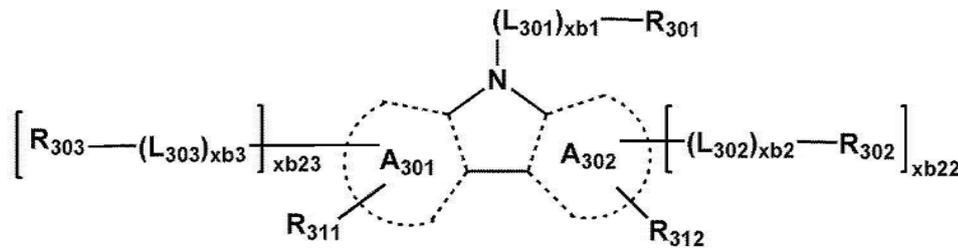
[0300] 중에서 선택되고,

[0301] Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0302] 상기 화학식 301 중 xb1이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar<sub>301</sub>은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

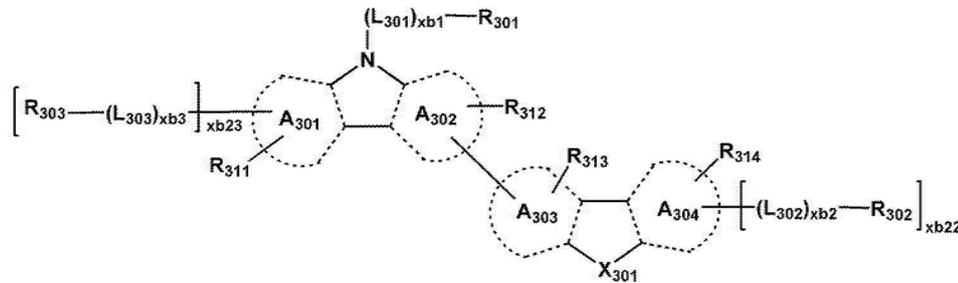
[0303] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0304] <화학식 301-1>



[0305]

[0306] <화학식 301-2>



[0307]

[0308] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0309] A<sub>301</sub> 내지 A<sub>304</sub>는 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,

[0310] X<sub>301</sub>은 0, S 또는 N-[(L<sub>304</sub>)<sub>xb4</sub>-R<sub>304</sub>]이고,

[0311] R<sub>311</sub> 내지 R<sub>314</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택되고,

[0312] xb22 및 xb23은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

- [0313] L<sub>301</sub>, xb1, R<sub>301</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,
- [0314] L<sub>302</sub> 내지 L<sub>304</sub>에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 L<sub>301</sub>에 대한 설명을 참조하고,
- [0315] xb2 내지 xb4에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 xb1에 대한 설명을 참조하고,
- [0316] R<sub>302</sub> 내지 R<sub>304</sub>에 대한 설명은 서로 독립적으로, 상기 R<sub>301</sub>에 대한 설명을 참조한다.
- [0317] 예를 들어, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 L<sub>301</sub> 내지 L<sub>304</sub>는 서로 독립적으로,
- [0318] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 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; 및
- [0319] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 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<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 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;
- [0320] 중에서 선택되고,
- [0321] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.
- [0322] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R<sub>301</sub> 내지 R<sub>304</sub>는 서로 독립적으로,
- [0323] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 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;

퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

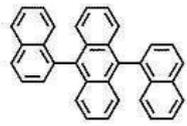
[0324] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 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, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 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, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

[0325] 중에서 선택되고,

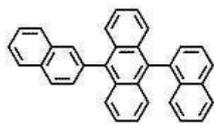
[0326] 상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0327] 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.

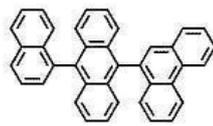
[0328] 상기 호스트는 ADN (9,10-Di(2-naphthyl)anthracene), MADN (2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), TBADN (9,10-di-(2-naphthyl)-2-t-butyl-anthracene), CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), mCP (1,3-di-9-carbazolylbenzene), TCP (1,3,5-tri(carbazol-9-yl)benzene) 및 하기 화합물 H1 내지 H55 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



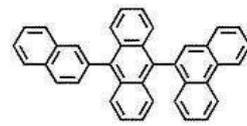
H1



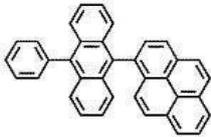
H2



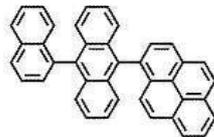
H3



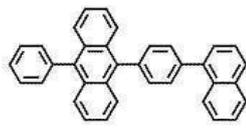
H4



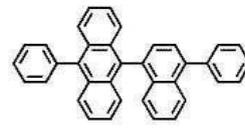
H5



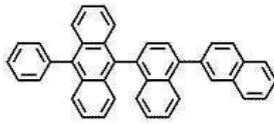
H6



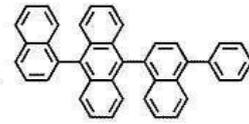
H7



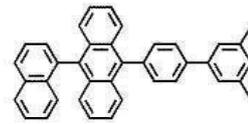
H8



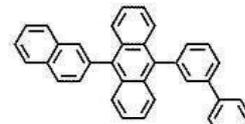
H9



H10

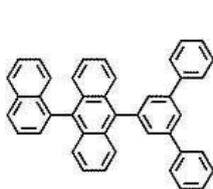


H11

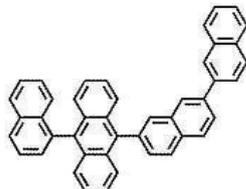


H12

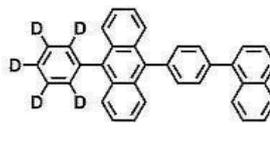
[0329]



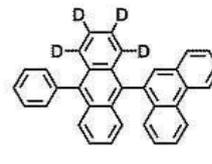
H13



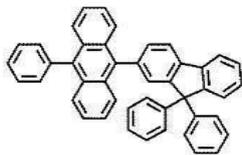
H14



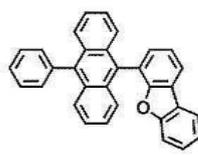
H15



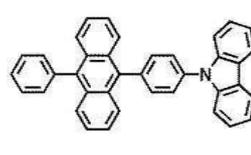
H16



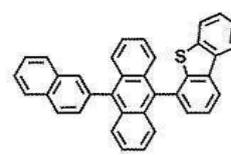
H17



H18

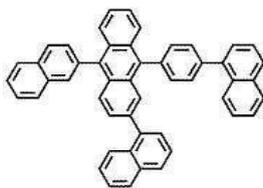


H19

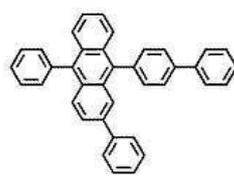


H20

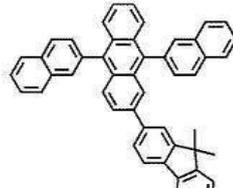
[0330]



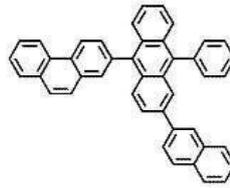
H21



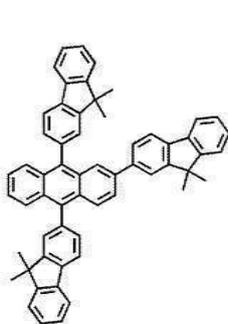
H22



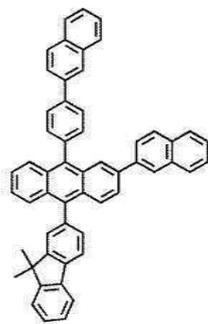
H23



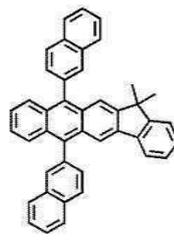
H24



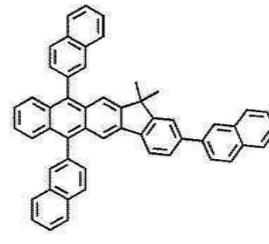
H25



H26



H27

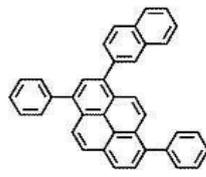


H28

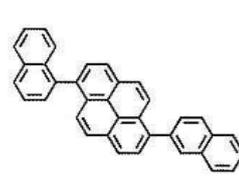
[0331]



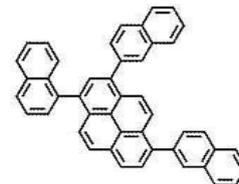
H29



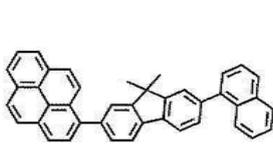
H30



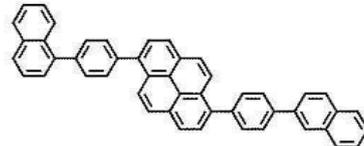
H31



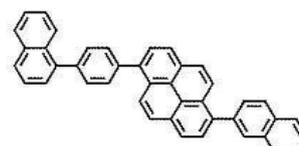
H32



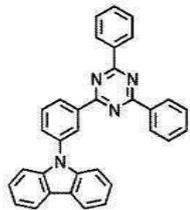
H33



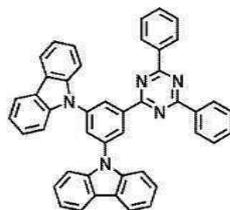
H34



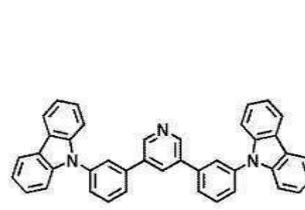
H35



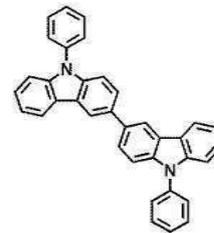
H36



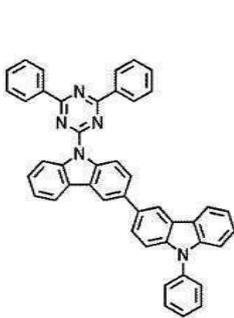
H37



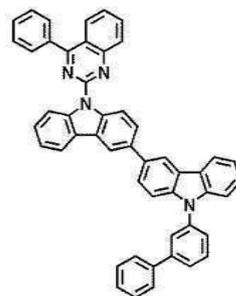
H38



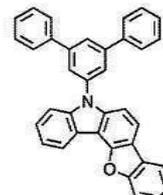
H39



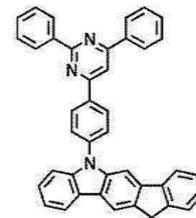
H40



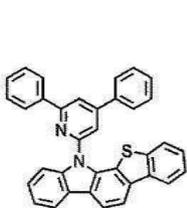
H41



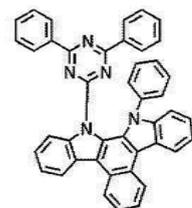
H42



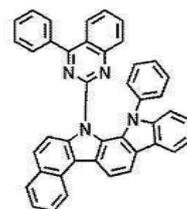
H43



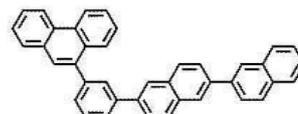
H44



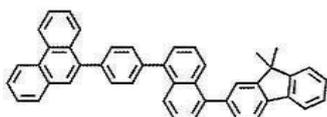
H45



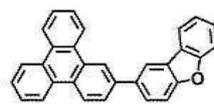
H46



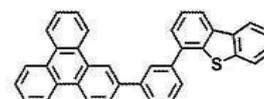
H47



H48



H49

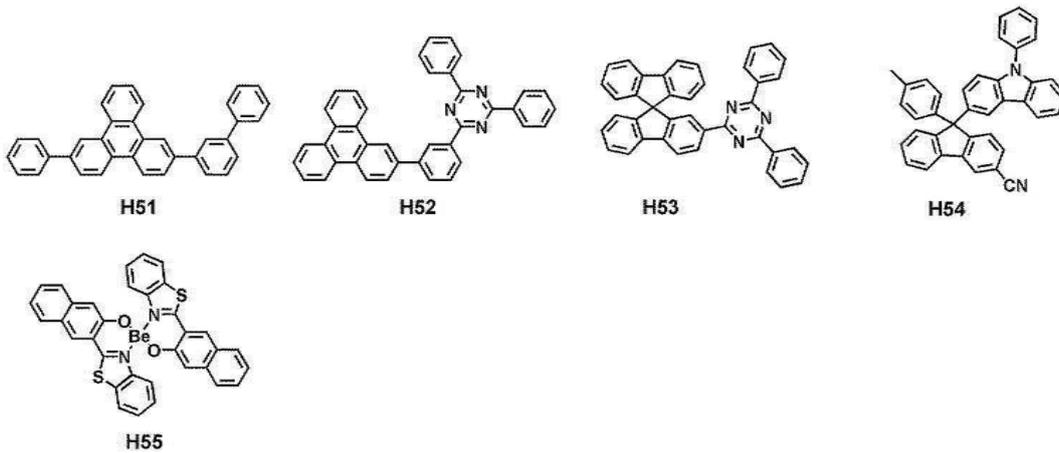


H50

[0332]

[0333]

[0334]



- [0335]
- [0336] 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.
- [0337] 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.
- [0338] [유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]
- [0339] 상기 인광 도펀트는 본 명세서 중 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.
- [0340] [유기층(150) 중 전자 수송 영역]
- [0341] 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.
- [0342] 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.
- [0343] 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.
- [0344] 상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 버퍼층, 정공 저지층, 전자 조절층 또는 전자 수송층)은,  $\pi$  전자 결핍성 합질소 고리를 적어도 하나 포함한 금속-비함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0345] 상기 " $\pi$  전자 결핍성 합질소 고리"는, 고리-형성 모이어티로서, 적어도 하나의 \*-N=\* 모이어티를 갖는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로시클릭 그룹을 의미한다.
- [0346] 예를 들어, 상기 " $\pi$  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 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>카보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0347] 상기  $\pi$  전자 결핍성 합질소 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.
- [0348] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0349] <화학식 601>

- [0350]  $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$
- [0351] 상기 화학식 601 중,
- [0352]  $Ar_{601}$ 은 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{60}$ 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0353]  $xe11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0354]  $L_{601}$ 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,
- [0355]  $xe1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0356]  $R_{601}$ 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,
- [0357] 상기  $Q_{601}$  내지  $Q_{603}$ 은 서로 독립적으로,  $C_1-C_{10}$ 알킬기,  $C_1-C_{10}$ 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0358]  $xe21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0359] 일 구현예에 따르면, 상기  $xe11$ 개의  $Ar_{601}$  및  $xe21$ 개의  $R_{601}$  중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은  $\pi$  전자 결핍성 합질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0360] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리  $Ar_{601}$ 은,
- [0361] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스퀴이로-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, 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
- [0362] 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, 스퀴이로-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, 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 그

룹 및 아자카바졸 그룹;

[0363]

중에서 선택될 수 있고,

[0364]

상기 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0365]

상기 화학식 601 중 xe<sub>11</sub>이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar<sub>601</sub>은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0366]

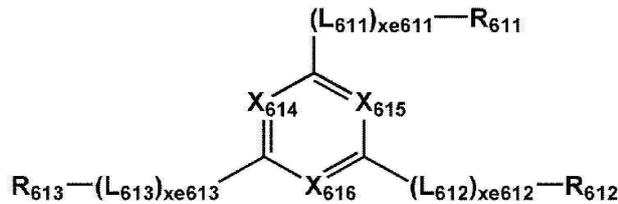
다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar<sub>601</sub>은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0367]

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

[0368]

<화학식 601-1>



[0369]

상기 화학식 601-1 중,

[0371]

X<sub>614</sub>는 N 또는 C(R<sub>614</sub>)이고, X<sub>615</sub>는 N 또는 C(R<sub>615</sub>)이고, X<sub>616</sub>은 N 또는 C(R<sub>616</sub>)이고, X<sub>614</sub> 내지 X<sub>616</sub> 중 적어도 하나는 N이고,

[0372]

L<sub>611</sub> 내지 L<sub>613</sub>은 서로 독립적으로, 상기 L<sub>601</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0373]

xe<sub>611</sub> 내지 xe<sub>613</sub>은 서로 독립적으로, 상기 xe<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0374]

R<sub>611</sub> 내지 R<sub>613</sub>은 서로 독립적으로, 상기 R<sub>601</sub>에 대한 설명을 참조하고,

[0375]

R<sub>614</sub> 내지 R<sub>616</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0376]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L<sub>601</sub> 및 L<sub>611</sub> 내지 L<sub>613</sub>은 서로 독립적으로,

[0377]

페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조퓨라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조퓨라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리디닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴놀살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0378]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-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, 옥사졸일

기, 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, 스퀴airo-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;

[0379] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0380] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0381] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R<sub>601</sub> 및 R<sub>611</sub> 내지 R<sub>613</sub>은 서로 독립적으로,

[0382] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴airo-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 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;

[0383] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴airo-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 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, 스퀴airo-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 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

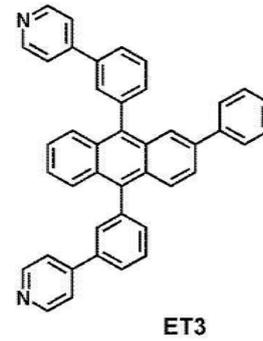
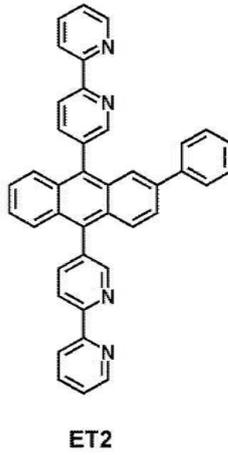
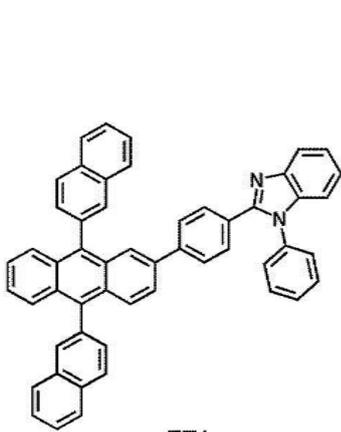
사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0384]  $-S(=O)_2(Q_{601})$  및  $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$ ;

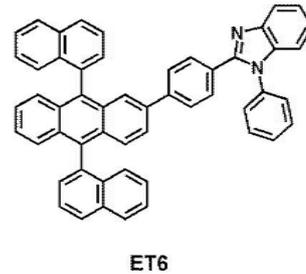
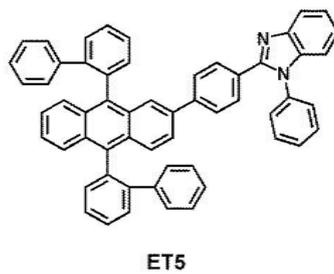
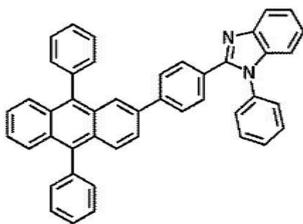
[0385] \*중에서 선택되고,

[0386] 상기  $Q_{601}$  및  $Q_{602}$ 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

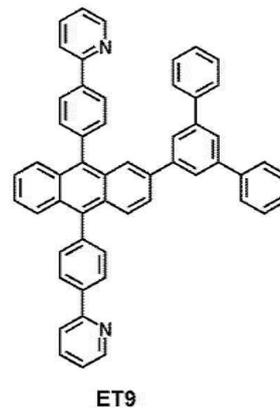
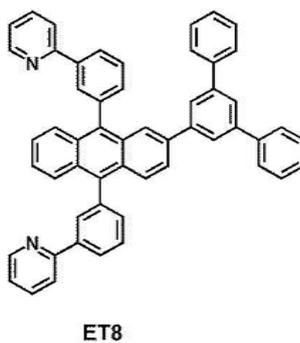
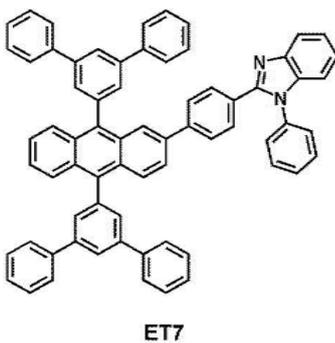
[0387] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



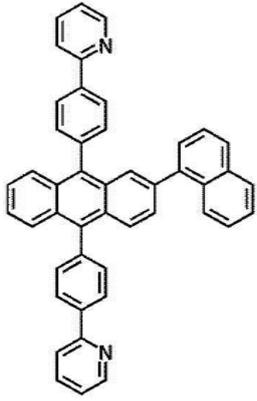
[0388]



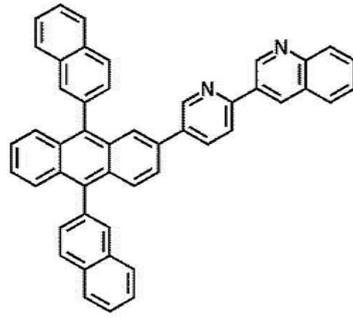
[0389]



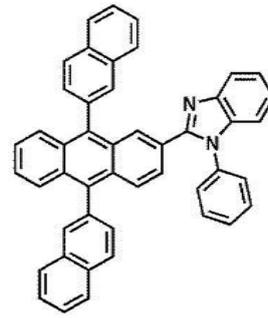
[0390]



ET10

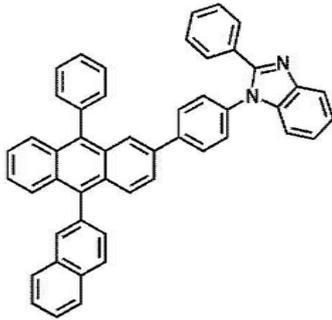


ET11

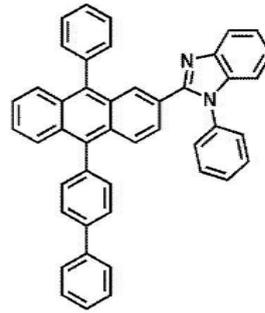


ET12

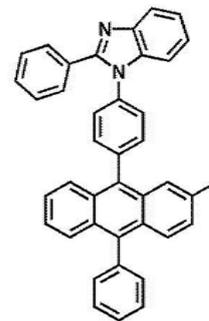
[0391]



ET13

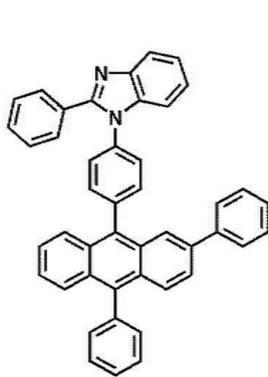


ET14

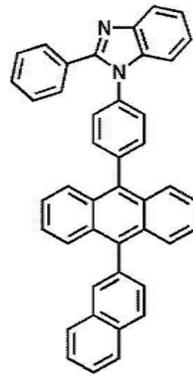


ET15

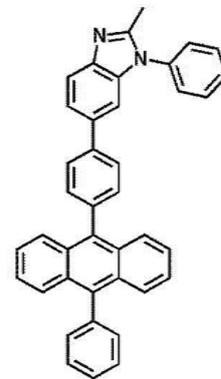
[0392]



ET16

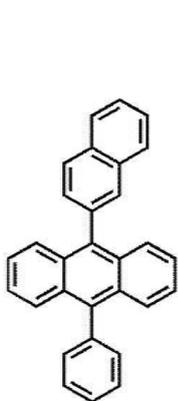


ET17

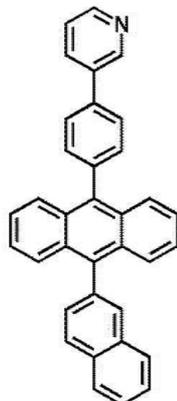


ET18

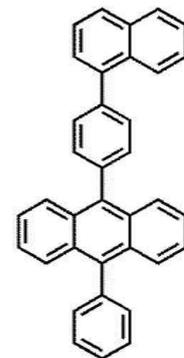
[0393]



ET19

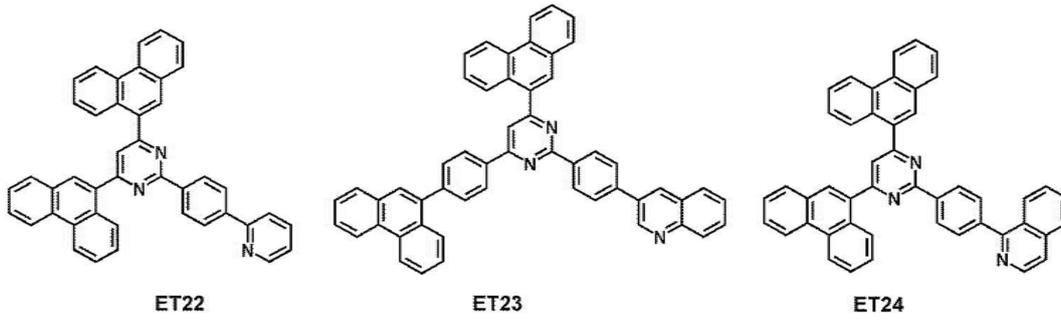


ET20

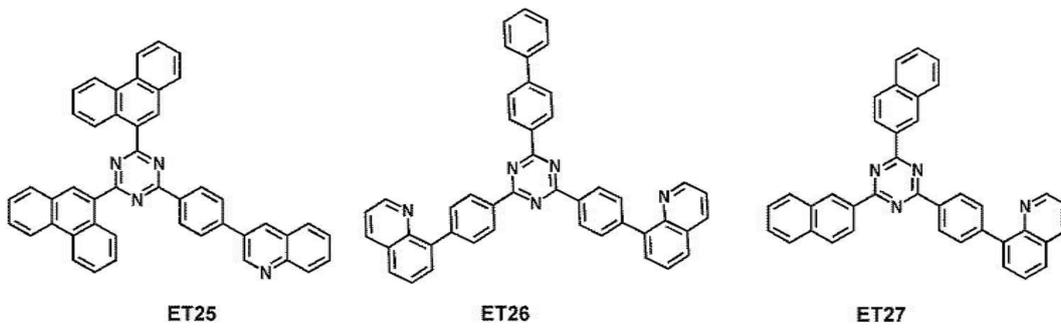


ET21

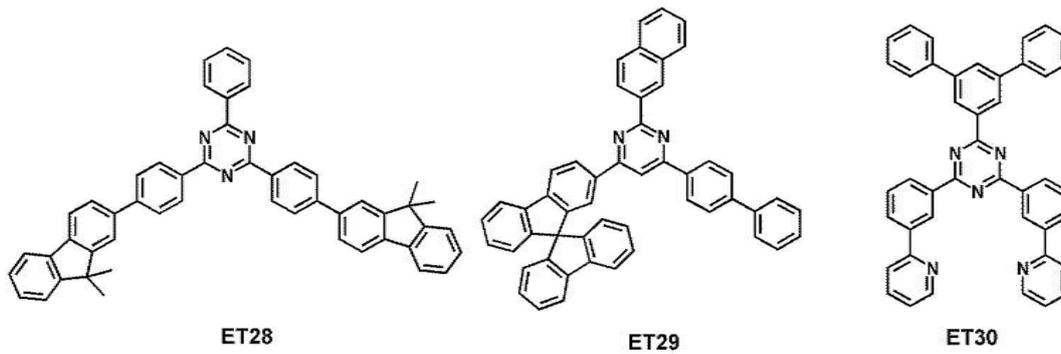
[0394]



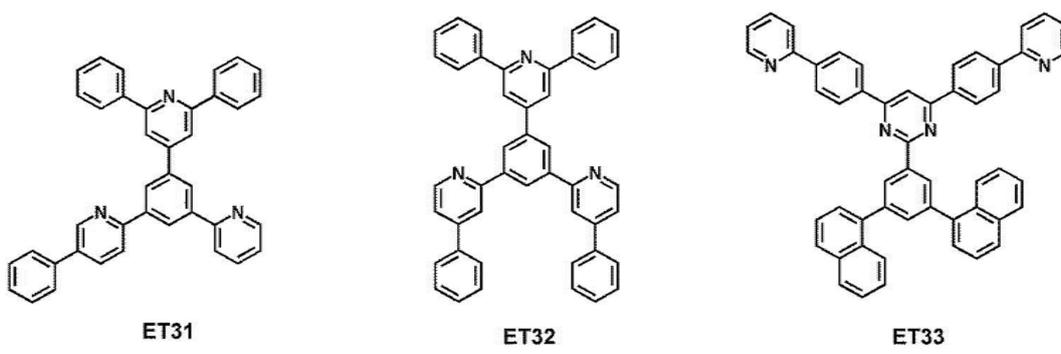
[0395]



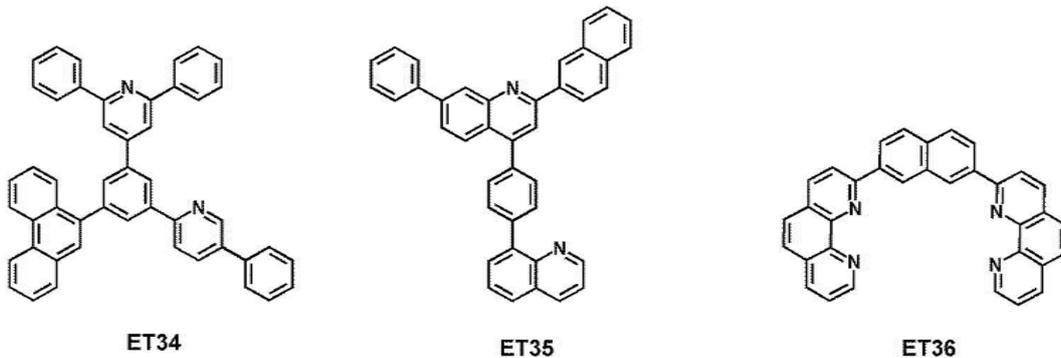
[0396]



[0397]



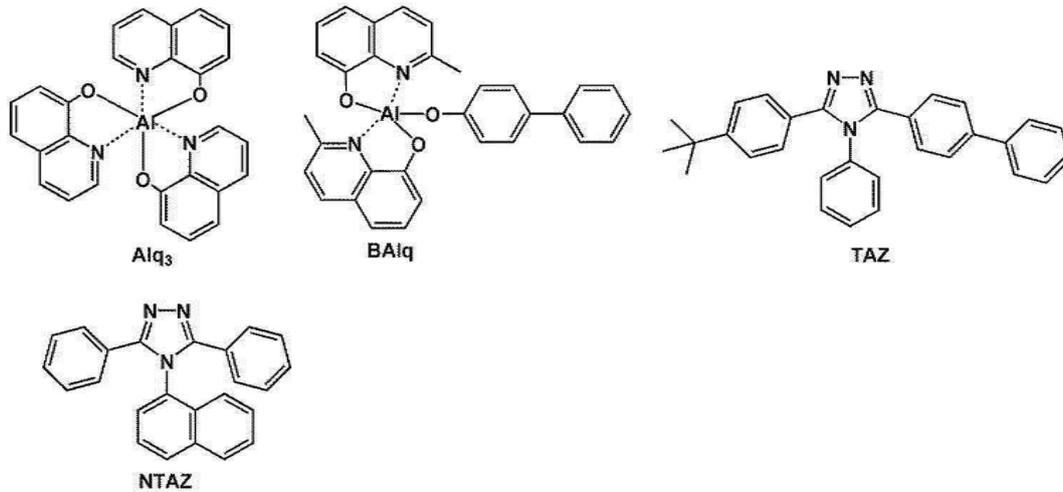
[0398]



[0399]

[0400] 또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-

1,10-phenanthroline), Alq<sub>3</sub>, 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.



[0401]

[0402] 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.

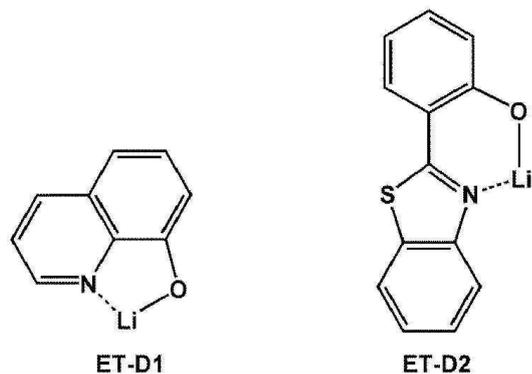
[0403] 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께는 서로 독립적으로, 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 버퍼층, 정공 저지층 또는 전자 조절층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성 또는 전자 조절 특성을 얻을 수 있다.

[0404] 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.

[0405] 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.

[0406] 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.

[0407] 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.



[0408]

- [0409] 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.
- [0410] 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.
- [0411] 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.
- [0412] 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.
- [0413] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.
- [0414] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.
- [0415] 상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로겐화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.
- [0416] 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.
- [0417] 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO, CaO,  $Ba_xSr_{1-x}O(0 < x < 1)$ ,  $Ba_xCa_{1-x}O(0 < x < 1)$  등과 같은 알칼리 토금속 화합물 중에서 선택될 수 있다. 일 구현예에 따르면, 상기 알칼리 토금속 화합물은, BaO, SrO 및 CaO 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0418] 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.
- [0419] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트린, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0420] 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.
- [0421] 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.
- [0422] [제2전극(190)]
- [0423] 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, 전

기전도성 화합물 및 이들의 조합(combination)을 사용할 수 있다.

- [0424] 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.
- [0425] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0426] 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.
- [0427] 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 100 Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0428] 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.
- [0429] [치환기의 일반적인 정의]
- [0430] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0431] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기는, 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0432] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기는, 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기, 프로피닐기, 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0433] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기는, -OA<sub>101</sub>(여기서, A<sub>101</sub>은 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0434] 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기는 상기 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0435] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기는, 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-옥사트리아졸리딘기(1,2,3,4-oxatriazolidiny), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranly), 테트라히드로티오펜틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0436] 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기는 상기 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0437] 본 명세서 중  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸일기, 2,3-디히드로푸라닐기, 2,3-디히드로티오펜일기 등이 포함된다. 본 명세서 중  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐렌기는 상기  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0438] 본 명세서 중  $C_6-C_{60}$ 아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며,  $C_6-C_{60}$ 아릴렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴기 및  $C_6-C_{60}$ 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0439] 본 명세서 중  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기는 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,  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴렌기는 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  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함된다. 상기  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴기 및  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.
- [0440] 본 명세서 중  $C_6-C_{60}$ 아릴옥시기는  $-OA_{102}$ (여기서,  $A_{102}$ 는 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴기임)를 가리키고, 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴티오기(arylthio)는  $-SA_{103}$ (여기서,  $A_{103}$ 은 상기  $C_6-C_{60}$ 아릴기임)를 가리킨다.
- [0441] 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.
- [0442] 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.
- [0443] 본 명세서 중  $C_4-C_{60}$ 카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 4 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기  $C_4-C_{60}$ 카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기  $C_4-C_{60}$ 카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기  $C_4-C_{60}$ 카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기  $C_4-C_{60}$ 카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.
- [0444] 본 명세서 중  $C_2-C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹이란, 상기  $C_4-C_{60}$ 카보시클릭 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.
- [0445] 본 명세서 중, 상기 치환된  $C_4-C_{60}$ 카보시클릭 그룹, 치환된  $C_2-C_{60}$ 헤테로시클릭 그룹, 치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알킬렌기, 치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알킬렌기, 치환된  $C_3-C_{10}$ 시클로알케닐렌기, 치환된  $C_1-C_{10}$ 헤테로시클로알케닐렌기, 치환된  $C_6-C_{60}$ 아릴렌기, 치환된  $C_1-C_{60}$ 헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향

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

[0446] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

[0447] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)(Q<sub>13</sub>), -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -B(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -C(=O)(Q<sub>11</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>11</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

[0448] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0449] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)(Q<sub>23</sub>), -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -B(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -C(=O)(Q<sub>21</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>21</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0450] -Si(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)(Q<sub>33</sub>), -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -B(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -C(=O)(Q<sub>31</sub>), -S(=O)<sub>2</sub>(Q<sub>31</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>);

[0451] 중에서 선택되고,

[0452] 상기 Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>13</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>23</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>33</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0453] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu<sup>t</sup>"은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"는 메톡시기를 의미한다.

[0454] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

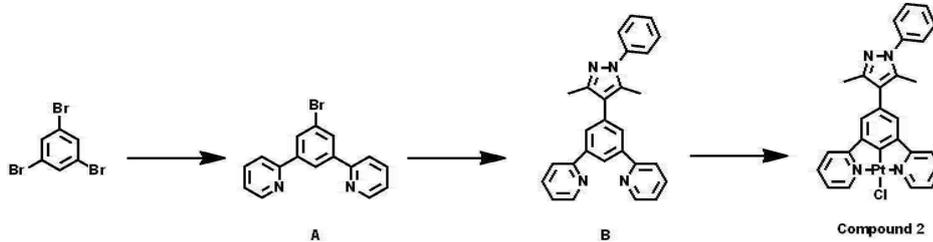
[0455] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0456] 본 명세서 중 \* 및 \*'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0457] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 하기 합성에 중 "A 대신 B를 사용하였다"란 표현 중 A의 몰당량과 B의 몰당량은 서로 동일하다.

[0458] [실시예]

[0459] **합성예 1: 화합물 2의 합성**



[0460]

[0461] a) 중간체 A의 합성

[0462] 1, 3, 5-트리브로모벤젠(5.26 g, 16.7 mmol), 2-피리딘보론산(2.16 g, 17.6 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.68 g, 0.59 mmol) 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(4.85 g, 35.1 mmol)을 THF 60 mL 와 증류수 30 mL 에 녹이고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 에틸아세테이트 50 mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 A 3.50 g 을 얻었다.

[0463] b) 중간체 B의 합성

[0464] 중간체 A(3.50 g, 11.3 mmol), 3,5-디메틸-1-페닐-1H-피라졸-4-일)보론산[3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)boronic acid](2.44 g, 11.3 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.46g(0.40 mmol) 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 3.28 g (23.8 mmol)을 THF 50 mL 와 증류수 25 mL 에 녹이고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 에틸아세테이트 50 mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 B 3.38 g을 얻었다.

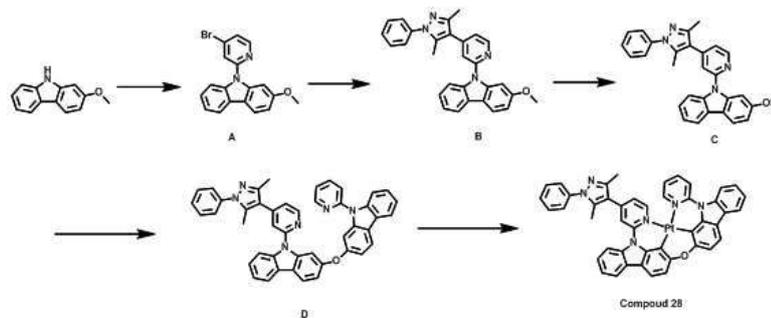
[0465] c) 화합물 2의 합성

[0466] 중간체 B(1.00 g, 2.48 mmol), K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub>(1.03 g, 2.48 mmol)을 아세트산 120 mL에 현탁시키고 110°C에서 3일 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 생성된 침전물을 필터하고, 메탄올, 증류수, 에탄올, 디에틸 에테르로 순차적으로 세척하였다. 건조 후 얻은 고체를 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 0.80 g의 화합물 2를 얻었다.

[0467] **합성예 2: 화합물 3의 합성**

[0468] 중간체 B 대신 2,2'-(5-(1,3,5-triphenyl-1H-pyrazol-4-yl)-1,3-phenylene)dipyridine을 사용하는 것을 제외하고 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 0.65 g의 화합물 3을 수득하였다.

[0469] **합성예 3: 화합물 28의 합성**



[0470]

[0471] a) 중간체 A의 합성

- [0472] 2-methoxycarbazole(2.40 g, 12.05 mmol), 3,5-dibromopyridine(4.28 g, 18.05 mmol), Cu powder(1.53 g, 24.10 mmol), Potassium carbonate(6.65 g, 48.20 mmol), 18-Crown-6(0.315 g, 1.200 mmol)을 분별증류로 정제된 디메틸포름아미드 50 ml에 현탁시킨 후 150℃에서 10시간 동안 교반하였다. 반응혼합물을 에틸아세테이트와 증류수를 이용하여 추출하였다. 추출한 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조하고 여과하였다. 컬럼크로마토그래피(1 / 3 = 디클로로메탄 / 노말헥산)로 정제하여 중간체 A 1.6 g을 수득하였다.
- [0473] b) 중간체 B의 합성
- [0474] 중간체 A(1.6 g, 4.50 mmol), (3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)boronic acid(1.46 g, 6.75 mmol), Potassium carbonate(1.24 g, 9.00 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(0.30 g, 0.27 mmol)을 톨루엔 / 증류수의 비율이 4 / 1인 혼합용매 150 ml에 현탁시킨 후 80℃에서 18시간 동안 교반하였다. 반응혼합물을 디클로로메탄과 증류수를 이용하여 추출하였다. 추출한 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조하고 여과하였다. 컬럼크로마토그래피 (1 / 30 = 메탄올 / 디클로로메탄)로 정제하여 중간체 B 1.7 g을 수득하였다.
- [0475] c) 중간체 C의 합성
- [0476] 중간체 B(1.7 g, 3.82 mmol)을 디클로로메탄 150 ml에 용해시킨 후 -78 ℃로 냉각하였다. BBr<sub>3</sub>(1.0 M in n-Hexane) (7.83 ml, 7.83 mmol)을 가하고 1시간 교반 후 0 ℃로 승온하여 2시간 동안 교반하였다. 중탄산나트륨 수용액으로 반응을 종결시키고, 디클로로메탄으로 추출하였다. 추출한 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조하고 여과하였다. 컬럼크로마토그래피 (1 / 2 = 에틸아세테이트 / 노말헥산)로 정제하여 중간체 C 1.3 g을 수득하였다.
- [0477] d) 중간체 D의 합성
- [0478] 중간체 C(1.2 g, 2.79 mmol), 2-bromo-9-(pyridin-2-yl)-carbazole(1.0 g, 3.20 mmol), picolinic acid(0.14 g, 1.06 mmol), Copper(I) iodide(0.11 g, 0.53 mmol), Potassium phosphate(1.14 g, 5.58 mmol)를 둥근바닥 플라스크에 넣고 디메틸술폭사이드 100 ml에 현탁시켰다. 반응혼합물을 120℃로 승온하여 20시간 동안 교반하였다. 반응혼합물을 에틸아세테이트와 증류수를 이용하여 추출하였다. 추출한 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조하고 여과하였다. 컬럼크로마토그래피(1 / 1 = 에틸아세테이트 / 노말헥산)로 정제하여 중간체 D 1.0 g을 수득하였다.
- [0479] e) 화합물 28의 합성
- [0480] 중간체 D(0.35 g, 0.52 mmol), Potassium tetrachloroplatinate(0.23 g, 0.54 mmol), Bu<sub>4</sub>NBr(0.017 g, 0.052 mmol)을 아세트산 30 ml에 현탁시켰다. 반응용액을 30 분동안 질소로 버블링 한후 상온에서 8시간 교반하였다. 반응혼합물을 120 ℃로 승온하여 추가로 36 시간 교반하였다. 상온으로 식히고 100 ml의 증류수를 가하였다. 생성된 침전물을 필터하고, 증류수로 3회 세척하였다. 혼풍건조한 고체를 (1 / 1 = 디클로로메탄 / 노말헥산)로 정제하여 0.24 g의 화합물 28을 수득하였다.
- [0481] **합성예 4 : 화합물 17의 합성**
- [0482] 중간체 D 대신 2-(3-(3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)-5-(1-methyl-1H-imidazol-2-yl)phenoxy)-9-(pyridin-2-yl)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고 상기 합성예 3과 동일한 방법을 이용하여 0.85 g의 화합물 17을 수득하였다.
- [0483] **합성예 5: 화합물 22의 합성**
- [0484] 중간체 D 대신 2-(3-(3-(3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)-5-(1-methyl-1H-3,4-imidazol-3-yl)phenoxy)phenoxy)pyridine을 사용하는 것을 제외하고 상기 합성예 3과 동일한 방법을 이용하여 1.00 g의 화합물 22를 수득하였다.
- [0485] **합성예 6: 화합물 24의 합성**
- [0486] 중간체 D 대신 N-(3-(3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)-5-((9-(pyridin-2-yl)-9H-carbazol-2-yl)oxy)phenyl)-N-phenylpyridin-2-amine 을 사용하는 것을 제외하고 상기 합성예 3과 동일한 방법을 이용하여 1.28 g의 화합물 24를 수득하였다.
- [0487] **합성예 7: 화합물 26의 합성**

[0488] 중간체 D 대신 2-(3-(3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)-5-(1-methyl-1H-imidazol-2-yl)phenoxy)-9-(1-methyl-1H-imidazol-2-yl)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고 상기 합성에 3과 동일한 방법을 이용하여 0.55 g의 화합물 26을 수득하였다.

[0489] **합성예 8: 화합물 40의 합성**

[0490] 중간체 D 대신 9-(4-(3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)pyridin-2-yl)-2-((9-(4-methylpyridin-2-yl)-9H-carbazol-2-yl)oxy)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고 상기 합성에 3과 동일한 방법을 이용하여 1.05 g의 화합물 40을 수득하였다.

[0491] **합성예 9: 화합물 41의 합성**

[0492] 중간체 D 대신 9-(4-(3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)pyridin-2-yl)-2-((9-(4-phenylpyridin-2-yl)-9H-carbazol-2-yl)oxy)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고 상기 합성에 3과 동일한 방법을 이용하여 0.88 g의 화합물 41을 수득하였다.

[0493] **합성예 10: 화합물 42의 합성**

[0494] 중간체 D 대신 9-(4-(3,5-dimethyl-1-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)pyridin-2-yl)-2-((9-(4-isopropylpyridin-2-yl)-9H-carbazol-2-yl)oxy)-9H-carbazole을 사용하는 것을 제외하고 상기 합성에 3과 동일한 방법을 이용하여 0.85 g의 화합물 42를 수득하였다.

[0495] 상기 합성예에서 측정된 HR-EIMS값 및 <sup>1</sup>H NMR 측정 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0496]

화합물	<sup>1</sup> H NMR (CDCl <sub>3</sub> , 500 MHz)	HR-EIMS	
		found	calc.
2	δ 8.42 ~ 8.44 (m, 2H), 8.13 ~ 8.16(m, 2H), 7.99~ 8.12(m, 2H), 7.62 ~ 7.65(m, 2H), 7.37 ~ 7.47(m, 3H), 7.10 ~ 7.13(m, 4H), 2.20(s, 3H), 2.14(s, 3H)	632.0329	632.0355
3	δ 8.45 ~ 8.47(m, 2H), 7.99 ~ 8.13(m, 4H), 7.66 ~ 7.69(m, 2H), 7.45 ~ 7.51(m, 6H), 7.35 ~ 7.38(m, 4H), 7.28~ 7.33(m, 3H), 7.17 (d, 2H), 7.12(d, 2H)	756.1723	756.1754
17	δ 7.98 ~ 8.10(m, 2H), 7.85(d, 1H), 7.80(d, 1H), 7.61 ~ 7.64 (m, 3H), 7.47 ~ 7.49(m, 2H), 7.37(d, 2H), 7.25 ~ 7.29 (m, 3H), 7.24(m, 1H), 7.09(d, 2H), 6.84(d, 1H), 6.77(d, 1H), 6.44(m, 1H), 6.22(m, 1H), 3.57(s, 3H), 2.20(s, 3H), 2.14(s, 3H)	779.7715	779.7756
22	δ 8.08 ~8.12(d, 2H), 7.63(d, 2H), 7.37 ~ 7.40(m, 3H), 7.06(d, 2H), 6.93(d, 2H), 6.45 ~ 6.55(m, 4H), 6.11 ~ 6.20(m, 4H), 5.70(m, 1H), 3.10(s, 3H), 2.23(s, 3H), 2.15(s, 3H)	829.8341	829.8382
24	δ 8.31(d, 1H), 8.06 ~ 8.09(m, 2H), 7.85 ~ 7.88(m, 2H), 7.59 ~ 7.63(m, 3H), 7.37 ~ 7.42(m, 5H), 7.30~ 7.33(m, 2H), 7.10 ~ 7.18(m, 3H), 6.78 ~ 6.84(m, 3H), 6.55 ~ 6.57(m, 2H), 6.47(d, 2H), 6.06(d, 1H), 2.20(s, 3H), 2.13(s, 3H)	867.8818	867.8847
26	δ 8.25 ~ 8.27(d, 1H), 8.05~8.10(m, 2H), 7.93(m, 2H), 7.88(m, 2H), 7.62 ~ 7.66(m, 3H), 7.32 ~ 7.39(m, 7H), 7.08 ~ 7.13(m, 2H), 6.74 ~ 6.80(m, 3H), 6.55 ~ 6.57(m, 2H), 6.47(d, 2H), 6.06(d, 1H), 2.21(s, 3H), 2.15(s, 3H)	782.7754	782.7720
28	δ 7.94 ~ 8.10(m, 7H), 7.83 ~ 7.85(m, 2H), 7.68(d, 1H), 7.59~7.64(m, 4H), 7.48(m, 1H), 7.37(d, 2H), 7.29(m, 2H), 7.02 ~ 7.08(m, 3H), 6.58 ~ 7.03(m, 2H), 2.33(s, 3H), 2.30(s, 3H)	865.8634	865.8683
40	δ 7.99 ~ 8.08(m, 5H), 7.79 ~ 7.84(m, 3H), 7.64 ~ 7.68(m, 3H), 7.60(d, 2H), 7.35 ~ 7.38(m, 3H), 7.29(m, 2H), 7.12(d, 1H), 7.00 ~ 7.03(m, 2H), 6.59(m, 2H), 2.29(s, 3H), 2.25(s, 3H), 2.20(s, 3H)	879.8921	879.8944
41	δ 8.02 ~ 8.10(m, 5H), 7.73 ~ 7.82(m, 6H), 7.60 ~ 7.63(m, 4H), 7.57(m, 2H), 7.39 ~ 7.45(m, 6H), 7.29(m, 2H), 6.58 ~ 7.03(m, 3H), 2.28(s, 3H), 2.24(s, 3H)	941.9682	941.9637
42	δ 7.99 ~ 8.09(m, 6H), 7.77 ~ 7.81(m, 3H), 7.61 ~ 7.65(m, 4H), 7.46 ~ 7.48(m, 2H), 7.37(d, 2H), 7.29(m, 2H), 6.94(m, 1H), 6.66 ~ 7.68(m, 1H), 6.59(d, 2H), 2.97(m, 1H), 2.29(s, 3H), 2.26(s, 3H), 1.45(s, 6H)	907.9453	907.9415

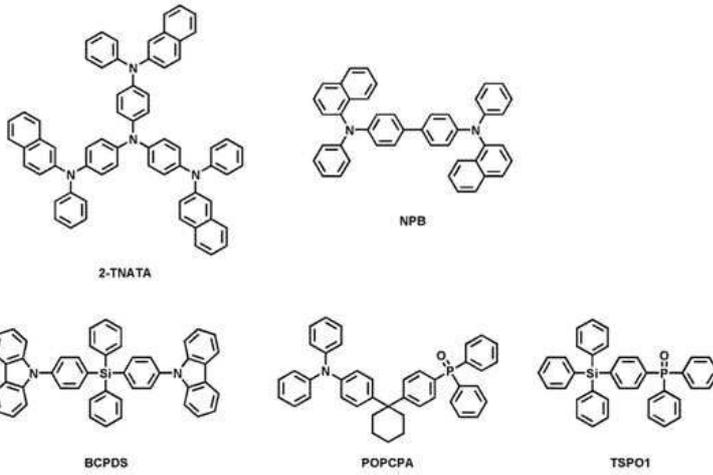
[0497] **실시예 1**

[0498] 기판 및 애노드로서 코닝(corning)사의  $15\Omega/\text{cm}^2$  (1200Å) ITO가 형성된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 상기 유리 기판을 설치하였다.

[0499] 상기 유기 기판에 형성된 ITO 애노드 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0500] 상기 정공 수송층 상부에 코-호스트인 BCPDS 및 POPCPA(BCPDS와 POPCPA의 중량비는 1:1임)와 도펀트인 화합물 2를 코-호스트와 도펀트의 중량비가 90 : 10이 되도록 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

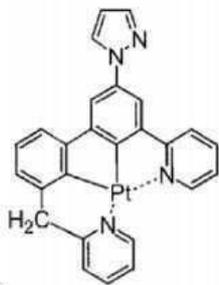
[0501] 상기 발광층 상부에 TSP01을 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상부에 Alq<sub>3</sub>를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 후, 상기 전자 주입층 상부에 Al를 진공 증착하여 3000Å 두께의 캐소드를 형성하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0502] **실시예 2 내지 10 및 비교예 1 내지 4**

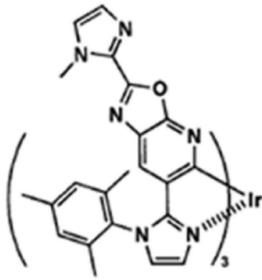
[0504] 발광층 형성시 도펀트로서 화합물 1 대신 표 2에 기재된 화합물을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0505] <비교화합물 A>



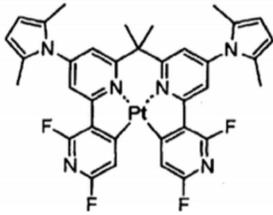
[0506]

[0507] <비교화합물 B>



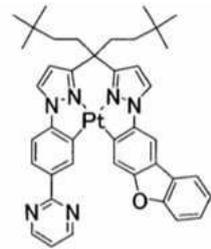
[0508]

[0509] <비교화합물 C>



[0510]

[0511] <비교화합물 D>



[0512]

[0513] **평가예 1**

[0514] 상기 실시예 1 내지 10 및 비교예 1 내지 4에서 제작된 유기 발광 소자의 구동전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율 및 최대 발광 파장을 Keithley SMU 236 및 휘도계 PR650을 이용하여 측정하여, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

**표 2**

[0515]	도펀트	구동 전압 (V)	전류밀도 (mA/cm <sup>2</sup> )	휘도 (cd/m <sup>2</sup> )	발광 효율 (cd/A)	발광색	최대 발광 파장(nm)	
	실시예 1	화합물 2	3.4	0.09	15	17.8	청색	450
	실시예 2	화합물 3	3.4	0.08	15	18.2	청색	449
	실시예 3	화합물 17	3.3	0.08	15	18.1	청색	452
	실시예 4	화합물 18	3.3	0.08	15	18.2	청색	446
	실시예 5	화합물 24	3.3	0.09	15	17.6	청색	450
	실시예 6	화합물 26	3.3	0.08	15	18.1	청색	451
	실시예 7	화합물 28	3.4	0.08	15	18.2	청색	455
	실시예 8	화합물 40	3.4	0.06	15	18.6	청색	456
	실시예 9	화합물 41	3.3	0.10	15	16.4	청색	448
	실시예 10	화합물 42	3.4	0.10	15	16.9	청색	448
	비교예 1	비교화합물 A	3.9	0.09	15	10.2	녹색	514
	비교예 2	비교화합물 B	4.5	0.11	15	13.8	청색	455
	비교예 3	비교화합물 C	3.7	0.15	15	15.5	연청색	490
	비교예 4	비교화합물 D	5.2	0.09	15	17.0	청색	473

[0516] 상기 표 2로부터, 실시예 1 내지 10의 유기 발광 소자는 비교예 1 내지 4의 유기 발광 소자에 비하여, 낮은 구동전압 및 높은 발광 효율을 가지면서도 진한 청색광 발광에 적합함을 확인할 수 있다.

**부호의 설명**

- [0517] 10: 유기 발광 소자
- 110: 제1전극
- 150: 유기층
- 190: 제2전극

**도면**

**도면1**

**10**

190
150
110

【심사관 직권보정사항】

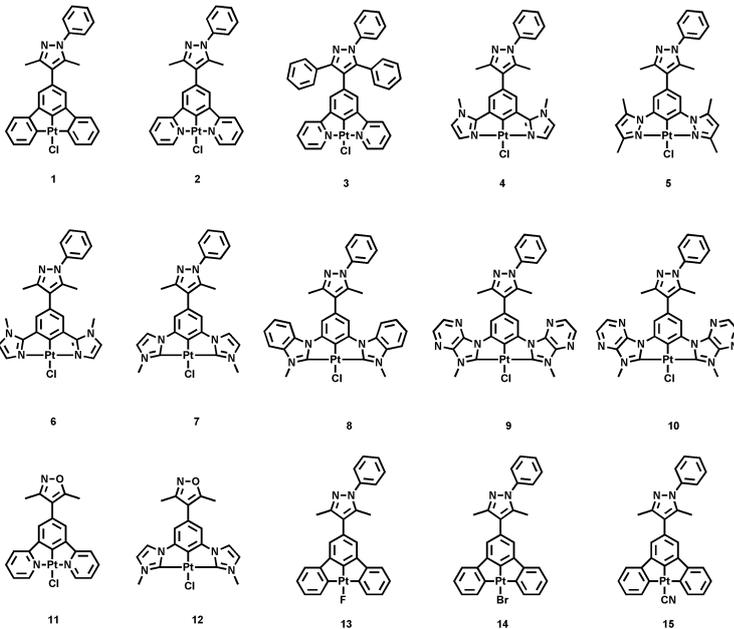
【직권보정 1】

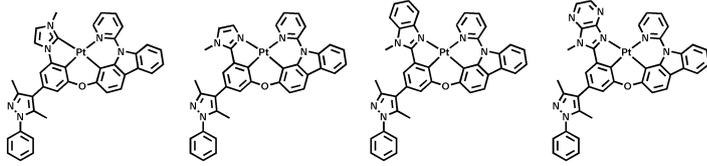
【보정항목】 청구범위

【보정세부항목】 청구항 14

【변경전】

상기 화합물 1 내지 42 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



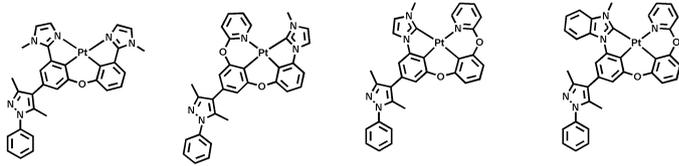


16

17

18

19

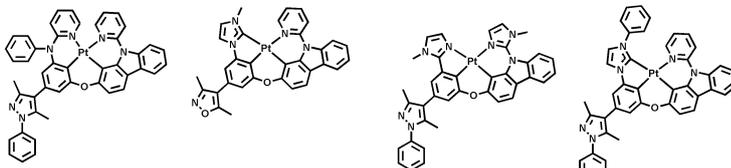


20

21

22

23

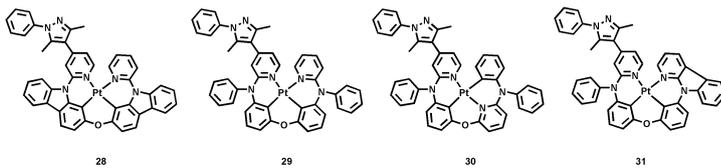


24

25

26

27

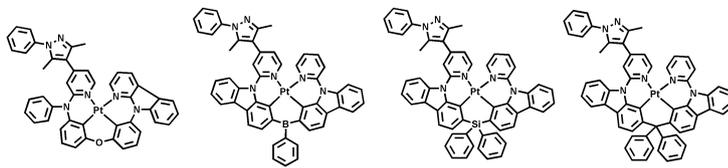


28

29

30

31

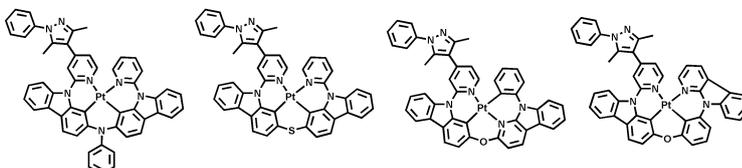


32

33

34

35

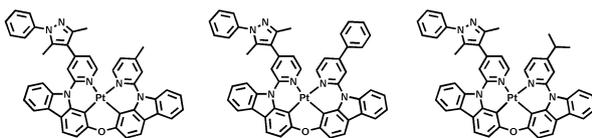


36

37

38

39



40

41

42

【변경후】

하기 화합물 1 내지 42 중에서 선택된, 유기금속 화합물:

