



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년02월14일

(11) 등록번호 10-2635543

(24) 등록일자 2024년02월05일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 15/00 (2024.01) C09K 11/06 (2006.01)
H10K 50/12 (2023.01) H10K 85/30 (2023.01)
- (52) CPC특허분류
C07F 15/0033 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
- (21) 출원번호 10-2023-0071925(분할)
- (22) 출원일자 2023년06월02일
심사청구일자 2023년06월02일
- (65) 공개번호 10-2023-0087423
- (43) 공개일자 2023년06월16일
- (62) 원출원 특허 10-2017-0123701
원출원일자 2017년09월25일
심사청구일자 2020년08월03일
- (30) 우선권주장
1020160124243 2016년09월27일 대한민국(KR)
- (56) 선행기술조사문헌
CN104370974 A
KR1020070050859 A
KR1020070091355 A
- (73) 특허권자
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
- (72) 발명자
강선우
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
전상호
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 15 항

심사관 : 김지은

(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 85/342 (2023.02)

(72) 발명자

조영미

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

고수병

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

김태경

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

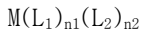
명세서

청구범위

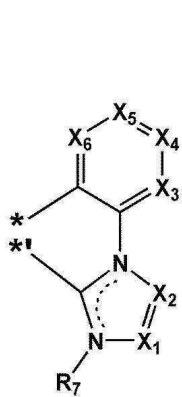
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물:

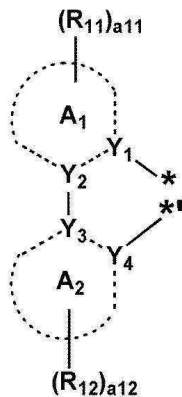
<화학식 1>



<화학식 2A>



<화학식 2B>



상기 화학식 1 중 M은 이리듐(Ir)이고,

상기 화학식 1 중 L₁은 상기 화학식 2A로 표시된 리간드이고, n₁은 1, 2 또는 3이고, n₁이 2 이상일 경우, 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 1 중 L₂는 상기 화학식 2B로 표시된 리간드이고, n₂는 0, 1 또는 2이고, n₂가 2 이상일 경우, 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하고,

상기 화학식 1 중 n₁ + n₂는 3이고,

상기 화학식 2A 및 2B 중 * 및 ‡'은 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

상기 화학식 2A 중 X₁은 N 또는 C(R₁)이고, X₂는 N 또는 C(R₂)이고, X₃은 N 또는 C(R₃)이고, X₄는 N 또는 C(R₄)이고, X₅는 N 또는 C(R₅)이고, X₆은 N 또는 C(R₆)이되, X₃ 내지 X₆ 중 N은 하나이고,

상기 화학식 2B 중 Y₁은 C이고, Y₂ 및 Y₃는 서로 독립적으로, C 또는 N이고, Y₄는 N이고, Y₁과 Y₂ 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고, Y₂와 Y₃ 사이의 결합은 단일 결합이고, Y₃와 Y₄ 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,

상기 화학식 2B 중 고리 A₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 또는 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 그룹이고, 고리 A₂는 피리딘 그룹, 퀴놀린 그룹, 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹이고,

상기 화학식 2A 및 2B 중 R₁ 내지 R₇, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로, 수소, -F, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 및 -B(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,

상기 화학식 2A 중 R₁ 내지 R₇ 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 2B 중 복수 개의 R_{11} 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 2B 중 복수 개의 R_{12} 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 2B 중 서로 이웃한 R_{11} 및 R_{12} 는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 화학식 2B 중 a_{11} 및 a_{12} 는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이고,

i) 상기 화학식 1 중 n_1 이 3일 경우, a) 화학식 2A의 X_2 및 X_3 는 N이거나; 또는 b) 화학식 2A의 X_4 내지 X_6 중 하나는 N이고, R_7 은 전자 당김기(electron withdrawing group)이고,

ii) 상기 화학식 1 중 n_1 이 1 또는 2일 경우, a) 화학식 2A의 X_3 , X_5 및 X_6 중 하나는 N이고, b) 화학식 2A의 X_1 은 $C(R_1)$ 이고, X_4 는 $C(R_4)$ 이고, R_1 및 R_4 중 적어도 하나는 전자 당김기이되, R_1 및 R_4 중 하나 이상은 시아노기이고,

상기 전자 당김기는,

-F, 시아노기, 또는 $-B(Q_1)(Q_2)$ 이거나; 또는 -F, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 시아노기, 및 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{20} 알킬기이고,

치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 및 치환된 C_6-C_{60} 아릴기의 치환기 중에서 선택된 치환기는 서로 독립적으로,

-F, 시아노기, 및 C_1-C_{60} 알킬기;

-F, 시아노기, C_6-C_{60} 아릴기, 및 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{60} 알킬기;

C_6-C_{60} 아릴기;

-F, 시아노기, C_1-C_{60} 알킬기 및 $-B(Q_{21})(Q_{22})$, 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_6-C_{60} 아릴기; 및

$-B(Q_{31})(Q_{32})$;

중에서 선택되고,

상기 Q_1 내지 Q_2 , Q_{11} 내지 Q_{12} , Q_{21} 내지 Q_{22} 및 Q_{31} 내지 Q_{32} 은 서로 독립적으로, 수소, -F, 시아노기, C_1-C_{60} 알킬기, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 및 -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_6-C_{60} 아릴기 중에서 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서,

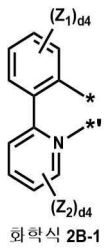
상기 화학식 1 중 n_1 은 3이고,

상기 화학식 1 중 3개의 L_1 은 서로 동일한, 유기금속 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 L₂가 하기 화학식 2B-1로 표시되는 리간드인, 유기금속 화합물:



상기 화학식 2B-1 중

Z₁ 및 Z₂에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₁₁ 및 R₁₂에 대한 설명과 동일하고,

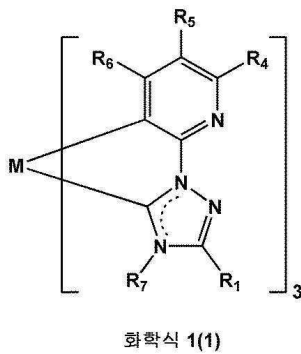
d₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

* 및 *'은 서로 독립적으로, 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

하기 화학식 1(1)로 표시되는, 유기금속 화합물:

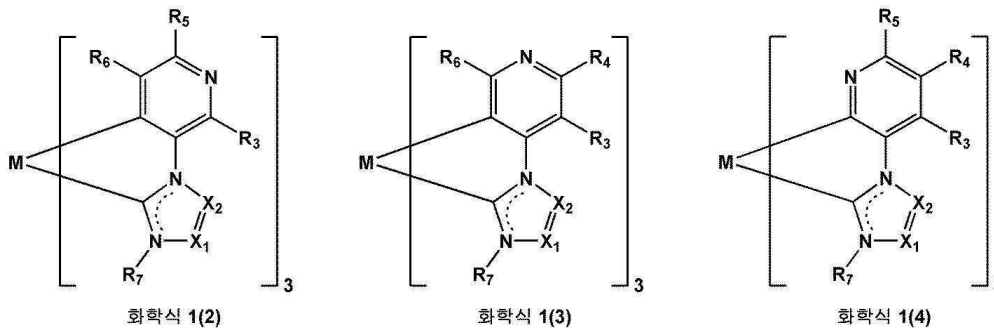


상기 화학식 1(1) 중 M, R₁ 및 R₄ 내지 R₇에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하다.

청구항 5

제1항에 있어서,

하기 화학식 1(2) 내지 1(4) 중 하나로 표시되는, 유기금속 화합물:



상기 화학식 1(2) 내지 1(4) 중

M, X₁, X₂, R₃ 내지 R₆에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

R₇은, -F, 시아노기, 또는 -B(Q₁)(Q₂)이거나; 또는 -F, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, 및 -B(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선

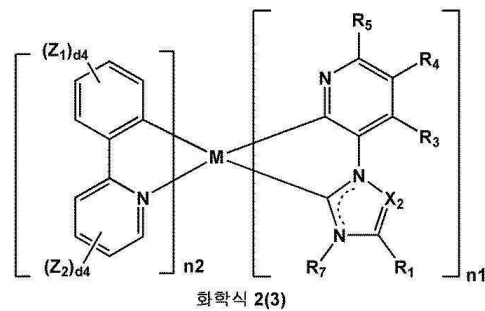
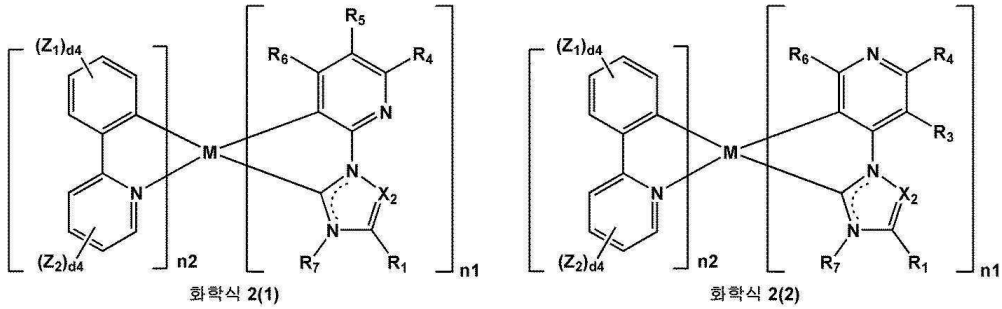
택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₂₀알킬기이고,

Q₁, Q₂, Q₃₁ 및 Q₃₂에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하다.

청구항 6

제1항에 있어서,

하기 화학식 2(1) 내지 2(3) 중 하나로 표시되는, 유기금속 화합물:



상기 화학식 2(1) 내지 2(3) 중

n₁ 및 n₂는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고,

d₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

Z₁ 및 Z₂에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₁₁ 및 R₁₂에 대한 설명과 동일하고,

M, R₁, X₂, R₃ 내지 R₇에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하되,

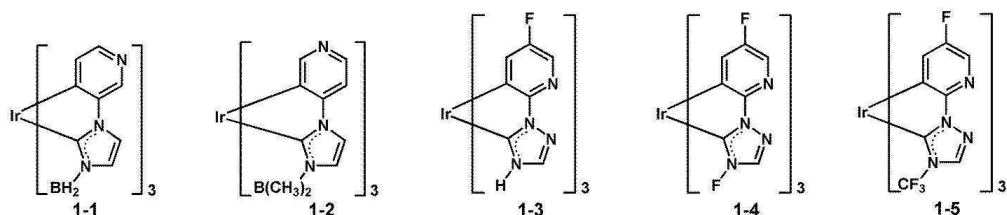
R₁ 및 R₄는 서로 독립적으로, -F, 시아노기, 또는 -B(Q₁)(Q₂)이거나; 또는 -F, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, 및 -B(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₂₀알킬기이고,

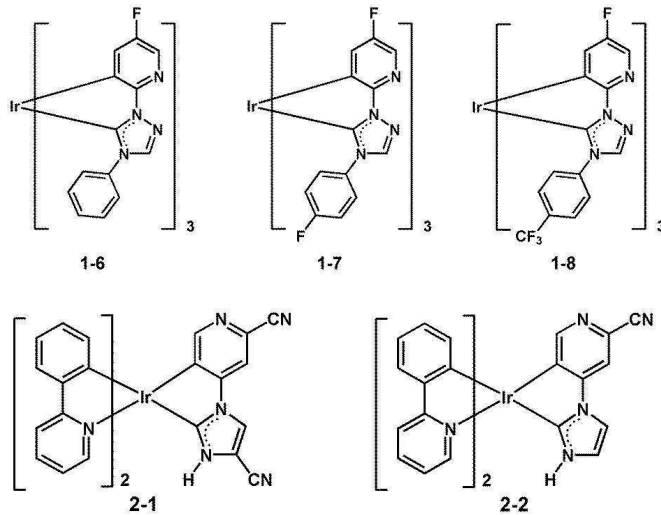
Q₁, Q₂, Q₃₁ 및 Q₃₂에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하다.

청구항 7

제1항에 있어서,

하기 화합물 1-1 내지 1-8, 2-1 및 2-2 중에서 선택된, 유기금속 화합물:





청구항 8

제1항에 있어서,

금속과 리간드 간의 결합 분해 에너지(bond dissociation energy) 중 최소값(eV)이 최저 여기 삼중항 에너지 준위(eV)보다 큰, 유기금속 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

2.7 eV 이상 및 3.3eV 이하의 최저 여기 삼중항 에너지 준위를 갖는, 유기금속 화합물.

청구항 10

제1항에 있어서,

77 Kelvin에서 392 nm 이상 및 460 nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 청색광을 방출하는, 유기금속 화합물.

청구항 11

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

상기 유기층은 상기 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 12

제11항에 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 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 13

제11항에 있어서,

상기 발광층에 상기 유기금속 화합물이 포함되어 있고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층 중 호스트의 중량은 상기 발광층 중 상기 유기금속 화합물의 중량보다 큰, 유기 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 유기금속 화합물의 LUMO 에너지 준위의 절대값이 상기 호스트의 LUMO 에너지 준위의 절대값보다 작은, 유기 발광 소자.

청구항 15

제12항에 있어서,

상기 정공 수송 영역이 LUMO 에너지 준위가 -3.5eV 보다 낮은 p-도펀트를 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.

발명의 내용

해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

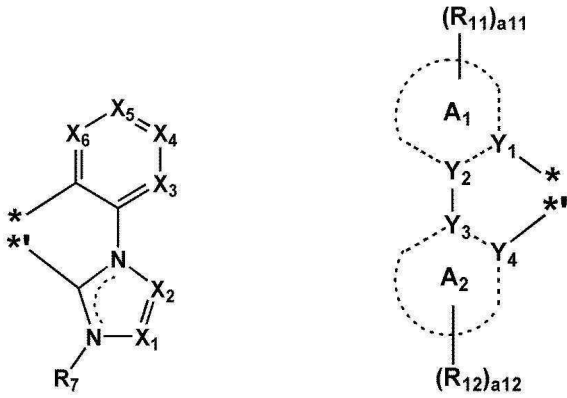
[0005] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물이 제공된다:

[0006] <화학식 1>

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

[0008] <화학식 2A>

<화학식 2B>



- [0009]
- [0010] 상기 화학식 1 중 M은 이리듐(Ir)이고,
- [0011] 상기 화학식 1 중 L₁은 상기 화학식 2A로 표시된 리간드이고, n₁은 1, 2 또는 3이고, n₁이 2 이상일 경우, 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고,
- [0012] 상기 화학식 1 중 L₂는 상기 화학식 2B로 표시된 리간드이고, n₂는 0, 1 또는 2이고, n₂가 2 이상일 경우, 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하고,
- [0013] 상기 화학식 1 중 n₁ + n₂는 3이고,
- [0014] 상기 화학식 2A 및 2B 중 * 및 *'은 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,
- [0015] 상기 화학식 2A 중 X₁은 N 또는 C(R₁)이고, X₂는 N 또는 C(R₂)이고, X₃은 N 또는 C(R₃)이고, X₄는 N 또는 C(R₄)이고, X₅는 N 또는 C(R₅)이고, X₆은 N 또는 C(R₆)이고,
- [0016] 상기 화학식 2B 중 Y₁은 C이고, Y₂ 및 Y₃는 서로 독립적으로, C 또는 N이고, Y₄는 N이고, Y₁과 Y₂ 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고, Y₂와 Y₃ 사이의 결합은 단일 결합이고, Y₃와 Y₄ 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고,
- [0017] 상기 화학식 2B 중 고리 A₁은 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고, 고리 A₂는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,
- [0018] 상기 화학식 2A 및 2B 중 R₁ 내지 R₇, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택되고,
- [0019] 상기 화학식 2A 중 R₁ 내지 R₇ 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0020] 상기 화학식 2B 중 복수 개의 R₁₁ 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0021] 상기 화학식 2B 중 복수 개의 R₁₂ 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

- [0022] 상기 화학식 2B 중 서로 이웃한 R₁₁ 및 R₁₂는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0023] 상기 화학식 2B 중 a₁₁ 및 a₁₂는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이고,
- [0024] i) 상기 화학식 1 중 n₁이 3일 경우, a) 화학식 2A 중 X₂ 및 X₃는 N이거나 또는 b) X₄ 내지 X₆ 중 적어도 하나는 N이고, R₇은 전자 당김기(electron withdrawing group)이고,
- [0025] ii) 상기 화학식 1 중 n₁이 1 또는 2일 경우, a) 화학식 2A 중 X₃, X₅ 및 X₆ 중 적어도 하나는 N이고, b) 화학식 2A 중 X₁은 C(R₁)이고, X₄는 C(R₄)이고, R₁ 및 R₄ 중 적어도 하나는 전자 당김기이고,
- [0026] 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 및 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹의 치환기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기는,
- [0027] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0028] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;
- [0029] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0030] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및
- [0031] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);
- [0032] 중에서 선택되고,
- [0033] 상기 Q₁ 내지 Q₃, Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기

중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택된다.

[0034] 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 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0035] 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0036] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0037] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

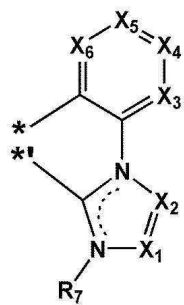
[0038] <화학식 1>



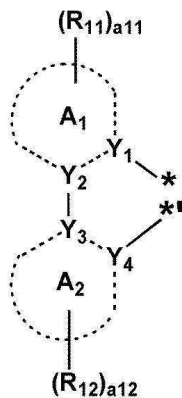
[0040] 상기 화학식 1 중 M은 이리듐(Ir)이다.

[0041] 상기 화학식1 중, i) L₁은 하기 화학식 2A로 표시된 리간드이고, n₁은 1, 2 또는 3이고, n₁이 2 이상일 경우, 2 이상의 L₁은 서로 동일하거나 상이하고, ii) 상기 화학식 1 중 L₂는 상기 화학식 2B로 표시된 리간드이고, n₂는 0, 1 또는 2이고, n₂가 2 이상일 경우, 2 이상의 L₂는 서로 동일하거나 상이하다.

[0042] <화학식 2A>



<화학식 2B>



[0043] 상기 화학식 2A 및 2B에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다. 상기 화학식 2A 및 2B 중 * 및 **은 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

[0045] 상기 화학식 1 중 n₁ + n₂는 3이다.

[0046] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 음이온과 양이온으로 이루어진 염의 형태를 갖지 않으며, 중성(neutral)이다.

[0047] 상기 화학식 2A 중 X₁은 N 또는 C(R₁)이고, X₂는 N 또는 C(R₂)이고, X₃은 N 또는 C(R₃)이고, X₄는 N 또는 C(R₄)이고, X₅는 N 또는 C(R₅)이고, X₆은 N 또는 C(R₆)일 수 있다.

[0049] *상기 화학식 2B 중 Y₁은 C이고, Y₂ 및 Y₃는 서로 독립적으로, C 또는 N이고, Y₄는 N이고, Y₁과 Y₂ 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합이고, Y₂와 Y₃ 사이의 결합은 단일 결합이고, Y₃와 Y₄ 사이의 결합은 단일 결합 또는 이중 결합일 수 있다.

[0050] 예를 들어, 상기 화학식 2B 중 Y₁ 내지 Y₃는 C이고, Y₄는 N일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0051] 상기 화학식 2B 중 고리 A₁은 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고, 고리 A₂는 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹일 수 있다.
- [0052] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중,
- [0053] 고리 A₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 셀레노펜 그룹, 피롤 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 실롤 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 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, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹이고,
- [0054] 고리 A₂는 피롤 그룹, 인돌 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, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹일 수 있다.
- [0055] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중,
- [0056] 고리 A₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 셀레노펜 그룹, 피롤 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 실롤 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹 또는 디벤조실롤 그룹이고,
- [0057] 고리 A₂는 피롤 그룹, 인돌 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹일 수 있다.
- [0058] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중,
- [0059] 고리 A₁은 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹 또는 디벤조실롤 그룹이고,
- [0060] 고리 A₂는 피롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹일 수 있다.
- [0061] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2B 중 고리 A₁은 벤젠 그룹이고, 고리 A₂는 피리딘 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0062] 상기 화학식 2A 및 2B 중 R₁ 내지 R₇, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹,

-Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂) 중에서 선택될 수 있다. 상기 Q₁ 내지 Q₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0063] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 R₁ 내지 R₇, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로,

[0064] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0065] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기 (adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0066] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0067] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0068] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂);

[0069] 중에서 선택되고,

[0070] Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로,

- [0071] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기, C₁-C₂₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헥테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헥테로시클로알케닐기, C₆-C₂₀아릴기, C₁-C₂₀헥테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헥테로축합다환 그룹;
- [0072] 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₂₀알킬기;
- [0073] 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₆-C₂₀아릴기; 및
- [0074] 비페닐기 및 터페닐기;
- [0075] 중에서 선택될 수 있다.
- [0076] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 및 2B 중 R₁ 내지 R₇, R₁₁ 및 R₁₂는 서로 독립적으로,
- [0077] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0078] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, 니트로기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0079] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기;
- [0080] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜틸기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜틸기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기;
- [0081] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂);
- [0082] 중에서 선택되고,
- [0083] Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

- [0084] 1) 상기 화학식 2A 중 R_1 내지 R_7 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, 2) 상기 화학식 2B 중 복수 개의 R_{11} 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, 3) 상기 화학식 2B 중 복수 개의 R_{12} 중 이웃한 2개의 임의의 그룹은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, 4) 상기 화학식 2B 중 서로 이웃한 R_{11} 및 R_{12} 는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다. 여기서, 상기 치환된 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹 및 치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹의 치환기에 대한 설명은 본 명세서 중 R_{11} 에 대한 설명을 참조하고, 상기 C_4-C_{60} 카보시클릭 그룹은, 예를 들면, 시클로펜탄 그룹, 시클로헥산 그룹, 아다만탄 그룹, 노르보난 그룹, 벤젠 그룹 또는 나프탈렌 그룹일 수 있고, 상기 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹은, 예를 들면, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 피롤 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 인돌 그룹 또는 피리딘 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0085] 상기 화학식 2B 중 a_{11} 및 a_{12} 는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 또는 5일 수 있다. 상기 a_{11} 은 R_{11} 의 개수를 나타낸 것으로서, a_{11} 이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{11} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 상기 a_{12} 는 R_{12} 의 개수를 나타낸 것으로서, a_{12} 이 2 이상일 경우 2 이상의 R_{12} 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0086] i) 상기 화학식 1 중 n_1 이 3일 경우, a) 화학식 2A의 X_2 및 X_3 는 N이거나; 또는 b) 화학식 2A의 X_4 내지 X_6 중 적어도 하나는 N이고, R_7 은 전자 당김기(electron withdrawing group)이고, ii) 상기 화학식 1 중 n_1 이 1 또는 2일 경우, a) 화학식 2A의 X_3 , X_5 및 X_6 중 적어도 하나는 N이고, b) 화학식 2A의 X_1 은 $C(R_1)$ 이고, X_4 는 $C(R_4)$ 이고, R_1 및 R_4 중 적어도 하나는 전자 당김기이다.
- [0087] 일 구현예에 따르면, i) 상기 화학식 1 중 n_1 이 3일 경우, a) 화학식 2A의 X_2 및 X_3 는 N이거나; 또는 b) 화학식 2A의 X_4 내지 X_6 중 하나는 N이고, X_4 내지 X_6 중 나머지는 N이 아니고, R_7 은 전자 당김기(electron withdrawing group)이고, ii) 상기 화학식 1 중 n_1 이 1 또는 2일 경우, a) 화학식 2A의 X_3 , X_5 및 X_6 중 하나는 N이고, X_3 , X_5 및 X_6 중 나머지는 N이 아니고, b) 화학식 2A의 X_1 은 $C(R_1)$ 이고, X_4 는 $C(R_4)$ 이고, R_1 및 R_4 중 적어도 하나는 전자 당김기일 수 있다.
- [0088] 상기 전자 당김기는, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 니트로기 또는 $-B(Q_1)(Q_2)$ 이거나; 또는 -F, -Cl, -Br, -I, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 시아노기, 니트로기 및 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 제1그룹이고,
- [0089] 상기 제1그룹은,
- [0090] C_1-C_{20} 알킬기, C_2-C_{20} 알케닐기, C_2-C_{20} 알키닐기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;
- [0091] 중수소, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, 히드록실기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기, C_2-C_{20} 알케닐기, C_2-C_{20} 알키닐기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;
- [0092] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸

일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

[0093] 중수소, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, 히드록실기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_2-C_{20} 알케닐기, C_2-C_{20} 알키닐기, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

[0094] 중에서 선택되고,

[0095] Q_1 내지 Q_3 및 Q_{31} 내지 Q_{33} 은 서로 독립적으로,

[0096] 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 시아노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_2-C_{20} 알케닐기, C_2-C_{20} 알키닐기, C_1-C_{20} 알콕시기, C_3-C_{10} 시클로알킬기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10} 시클로알케닐기, C_1-C_{10} 헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{20} 아릴기, C_1-C_{20} 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0097] 중수소, $-F$ 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{20} 알킬기;

[0098] 중수소, $-F$ 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_6-C_{20} 아릴기; 및

[0099] 비페닐기 및 터페닐기;

[0100] 중에서 선택될 수 있다.

[0101] 예를 들어, 1) 상기 전자 당김기가, 적어도 하나의 $-F$ 로 치환된 제1그룹이고, 상기 제1그룹이 "메틸기"라면, 상기 전자 당김기는, "적어도 하나의 $-F$ 로 치환된 메틸기(예를 들면, $-CF_3$, $-CHF_2$ 또는 $-CH_2F$)"이고, 2) 상기 전자 당김기가, 적어도 하나의 $-F$ 로 치환된 제1그룹이고, 상기 제1그룹이 "적어도 하나의 중수소로 치환된 메틸기"라면, 상기 전자 당김기는, "적어도 하나의 $-F$ 및 적어도 하나의 중수소로 치환된 메틸기(예를 들면, $-CDF_2$ 또는 $-CD_2F$)"임은 본 명세서로부터 명확히 파악될 수 있다.

[0102] 다른 구현예에 따르면, 상기 전자 당김기는, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 시아노기, 니트로기 또는 $-B(Q_1)(Q_2)$ 이거나; 또는 $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 시아노기, 니트로기 및 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 제1그룹이고,

[0103] 상기 제1그룹은,

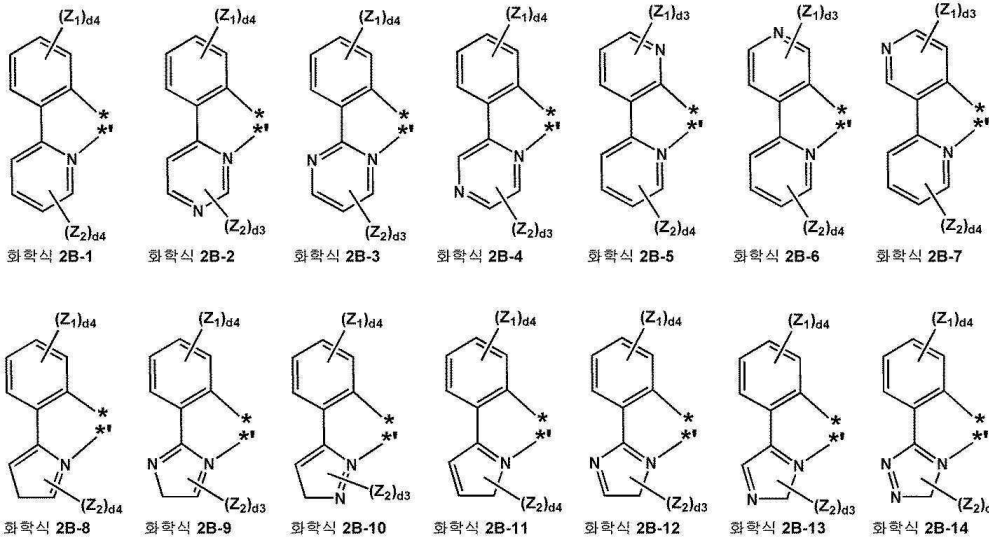
[0104] C_1-C_{20} 알킬기, C_2-C_{20} 알케닐기, C_2-C_{20} 알키닐기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;

- [0105] 중수소, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기, C_2 - C_{20} 알케닐기, C_2 - C_{20} 알키닐기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0106] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기 및 플루오레닐기; 및
- [0107] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, C_1 - C_{20} 알킬기, C_2 - C_{20} 알케닐기, C_2 - C_{20} 알키닐기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기 및 플루오레닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기 및 플루오레닐기;
- [0108] 중에서 선택되고,
- [0109] Q_1 , Q_2 , Q_{31} 및 Q_{32} 은 서로 독립적으로,
- [0110] 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기 및 나프틸기;
- [0112] *중수소, $-F$ 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기;
- [0113] 중수소, $-F$ 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기 및 나프틸기; 및
- [0114] 비페닐기 및 터페닐기;
- [0115] 중에서 선택될 수 있다.
- [0116] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 전자 당김기는, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 시아노기, 니트로기 또는 $-B(Q_1)(Q_2)$ 이거나; 또는 $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 시아노기, 니트로기 및 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 제1그룹이고,
- [0117] 상기 제1그룹은,
- [0118] C_1 - C_{20} 알킬기, C_2 - C_{20} 알케닐기, C_2 - C_{20} 알키닐기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기; 및
- [0119] 중수소, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1 - C_{20} 알킬기 및 C_1 - C_{20} 알콕시기;
- [0120] 중에서 선택되고,
- [0121] Q_1 , Q_2 , Q_{31} 및 Q_{32} 은 서로 독립적으로,
- [0122] 수소, 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 시아노기, C_1 - C_{20} 알킬기, C_1 - C_{20} 알콕시기, 페닐기 및 나프틸기;
- [0123] 중수소, $-F$ 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1 - C_{20} 알킬기;
- [0124] 중수소, $-F$ 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기 및 나프틸기; 및
- [0125] 비페닐기 및 터페닐기;
- [0126] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0127] 한편, 상기 화학식 1 중 n_1 은 3이고, 상기 화학식 1 중 3개의 L_1 은 서로 동일할 수 있다. 이 경우, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 호모렙틱(homoleptic) 착체가 된다.
- [0128] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 n_1 은 3이고, 상기 화학식 2A의 X_4 내지 X_6 중 하나는 N이고, 상기 화학식

2A 중 R₇은 전자 당김기일 수 있다. 상기 전자 당김기에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0129] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 n₁은 1 또는 2이고, 상기 화학식 2A의 X₃, X₅ 및 X₆ 중 하나는 N이고, 상기 화학식 2A의 R₁ 및 R₄ 중 적어도 하나(예를 들면, R₄ 또는 R₁ 및 R₄ 모두)는, 전자 당김기일 수 있다. 상기 전자 당김기에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0130] 한편, 상기 화학식 1 중 L₂는, 하기 화학식 2B-1 내지 2B-14로 표시되는 그룹 중에서 선택된 리간드일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0131]

상기 화학식 2B-1 내지 2B-14 중

[0133] Z₁ 및 Z₂에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₁₁ 및 R₁₂에 대한 설명과 동일하고,

[0134] d₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

[0135] d₃는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0136] d₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0137] * 및 *'은 서로 독립적으로, 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

[0138] 예를 들어, 상기 화학식 2B-1 내지 2B-14 중 Z₁ 및 Z₂는 서로 독립적으로,

[0139] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0140] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, 니트로기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기 및 C₁-C₂₀알콕시기;

[0141] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기;

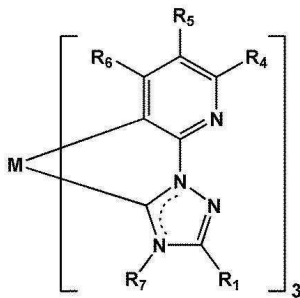
[0142] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀알킬기, C₂-C₂₀알케닐기, C₂-C₂₀알키닐기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보나닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기 및 디벤조카바졸일기; 및

[0143] -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃), -N(Q₁)(Q₂), -B(Q₁)(Q₂), -C(=O)(Q₁), -S(=O)₂(Q₁) 및 -P(=O)(Q₁)(Q₂);

[0144] 중에서 선택되고,

[0145] 상기 Q₁ 내지 Q₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

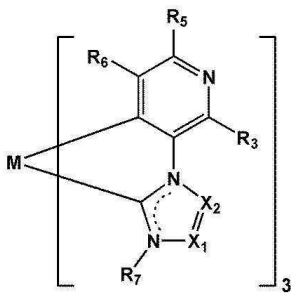
[0146] 일 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1(1)로 표시될 수 있다:



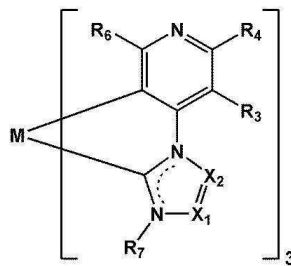
[0148] * 화학식 1(1)

[0149] 상기 화학식 1(1) 중 M, R₁ 및 R₄ 내지 R₇에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하다.

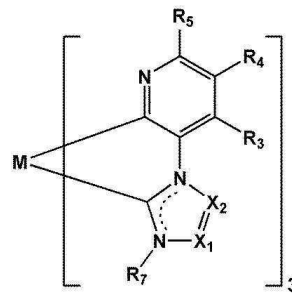
[0150] 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1(2) 내지 1(4) 중 하나로 표시될 수 있다:



화학식 1(2)



화학식 1(3)

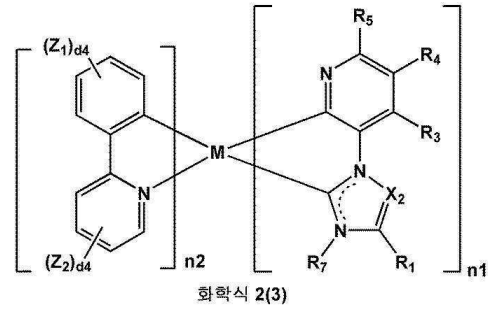
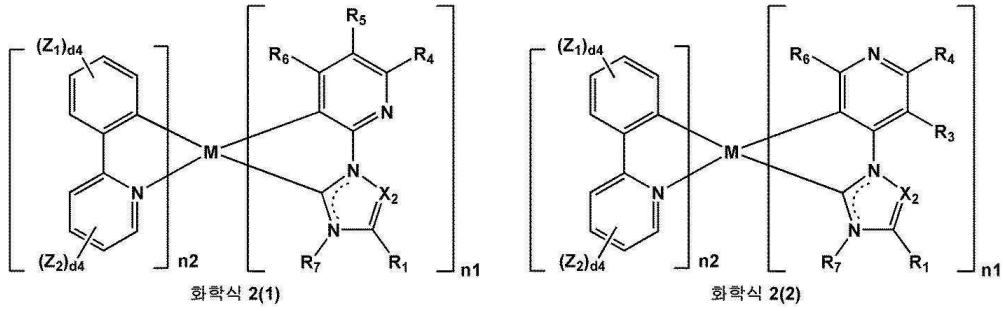


화학식 1(4)

[0151]

[0152] 상기 화학식 1(2) 내지 1(4) 중 M, X₁, X₂, R₃ 내지 R₆에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하고, R₇은 전자 당김기이다. 상기 전자 당김기에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

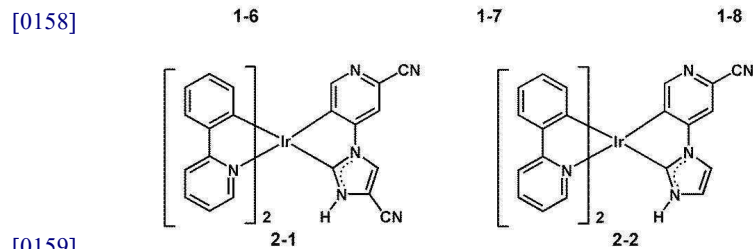
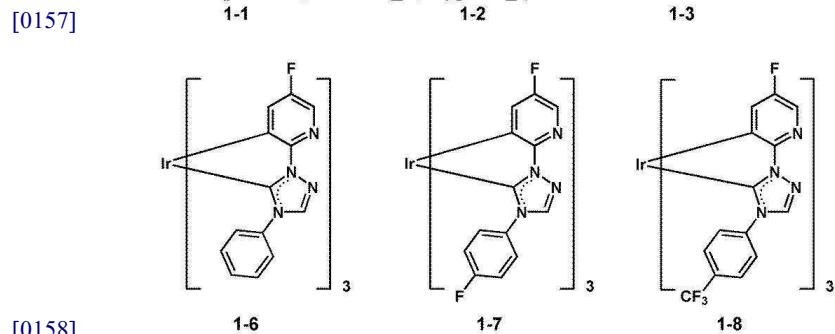
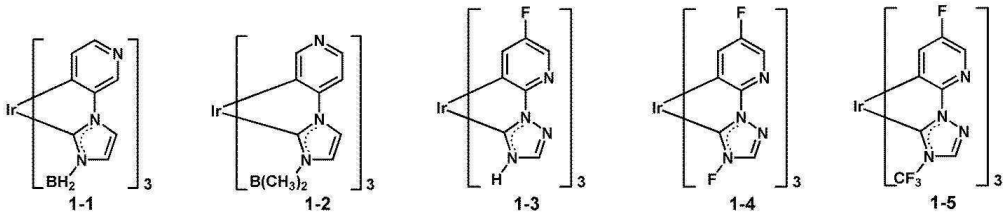
[0153] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은, 하기 화학식 2(1) 내지 2(3) 중 하나로 표시될 수 있다:



[0154]

[0155] 상기 화학식 2(1) 내지 2(3) 중 n1 및 n2는 서로 독립적으로, 1 또는 2이고, n1 + n2는 3이고, Z₁ 및 Z₂에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₁₁ 및 R₁₂에 대한 설명과 동일하고, M, R₁, X₂, R₃ 내지 R₇에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바와 동일하되, R₁ 및 R₄ 중 적어도 하나는 서로 독립적으로, 전자 당김기 중에서 선택된다. 상기 전자 당김기에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0156] 상기 유기금속 화합물은, 예를 들면, 하기 화합물 1-1 내지 1-8, 2-1 및 2-2 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0159]

[0160] 상기 유기금속 화합물은, "i) 상기 화학식 1 중 n1이 3일 경우, a) 화학식 2A의 X₂ 및 X₃는 N이거나; 또는 b) 화학식 2A의 X₄ 내지 X₆ 중 적어도 하나는 N이고, R₇은 전자 당김기(electron withdrawing group)이고, ii) 상

기 화학식 1 중 n_1 이 1 또는 2일 경우, a) 화학식 2A의 X_3 , X_5 및 X_6 중 적어도 하나는 N이고, b) 화학식 2A의 X_1 은 C(R_1)이고, X_4 는 C(R_4)이고, R_1 및 R_4 중 적어도 하나는 전자 당김기이다"란 조건을 만족하는 유기금속 화합물이다.

- [0161] 상술한 바와 같은 유기금속 화합물은, 상대적으로 큰 금속(화학식 1 중 M)과 리간드(화학식 1 중 n_2 가 0인 경우, L_1 이고, 화학식 1 중 n_2 가 0이 아닌 경우, L_1 및 L_2) 간의 큰 결합 분해 에너지(bond dissociation energy)(eV)를 가질 수 있게 되는 바, 상기 유기금속 화합물의 내적 분해(intrinsic degradation)가 최소화될 수 있다. 이로써, 상기 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자 중, 발광 효율을 감소시키는 킨처(quencher)로 작용할 수 있는, 상기 유기금속 화합물의 분해에 의하여 생성된 분해 생성물(예를 들면, 금속과 분리된 리간드 화학종) 등의 생성이 억제될 수 있어, 상기 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 장수명을 가질 수 있다.
- [0162] 일 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물의 금속과 리간드 간의 결합 분해 에너지 중 최소값(eV)은 상기 유기금속 화합물의 최저 여기 삼중항 에너지 준위(eV)보다 클 수 있다.
- [0163] 다른 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물의 금속과 리간드 간의 결합 분해 에너지 중 최소값(eV)은 상기 유기금속 화합물의 최저 여기 삼중항 에너지 준위(eV)보다 0.002 eV 이상만큼, 예를 들면, 0.5eV 이상만큼 클 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0164] 상기 유기금속 화합물은, 2.7 eV 이상 및 3.2eV 이하의 최저 여기 삼중항 에너지 준위를 가질 수 있다.
- [0165] 상기 유기금속 화합물은 청색광을 방출할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은, 77 Kelvin에서 392 nm 이상 및 460 nm 이하의 최대 발광 파장을 갖는 청색광을 방출할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0166] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자가 인식할 수 있다.
- [0167] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물 중 적어도 하나는 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은 발광층에 포함될 수 있다. 상기 발광층에 포함된 유기금속 화합물은 도펀트로서의 역할을 수 있다.
- [0168] 따라서, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0169] 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.
- [0170] 예를 들어, 상기 유기층은, 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1-1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1-1과 화합물 1-2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1-1과 화합물 1-2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1-1과 화합물 1-2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1-1은 발광층에 존재하고 상기 화합물 1-2는 전자 수송 영역에 존재할 수 있음)할 수 있다.
- [0171] 일 구현예에 따르면,
- [0172] 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 애노드이고,
- [0173] 상기 유기 발광 소자의 제2전극은 캐소드이고,
- [0174] 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고,
- [0175] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,
- [0176] 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0177] 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.

[0178] [도 1에 대한 설명]

[0179] 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.

[0180] 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.

[0181] [제1전극(110)]

[0182] 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.

[0183] 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.

[0184] 상기 제1전극(110)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0185] 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.

[0186] [유기층(150)]

[0187] 상기 제1전극(110) 상부에는 유기층(150)이 배치되어 있다. 상기 유기층(150)은 발광층을 포함한다.

[0188] 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.

[0189] [유기층(150) 중 정공 수송 영역]

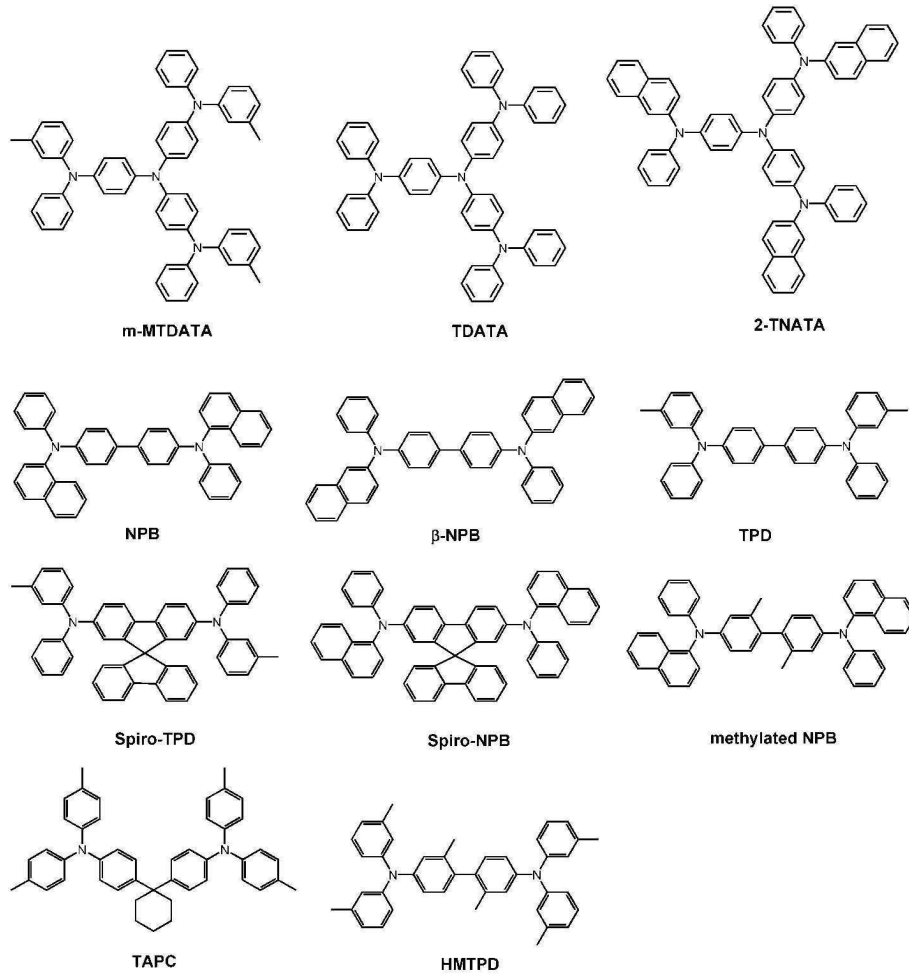
[0190] 상기 정공 수송 영역은, i) 단일 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조, ii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층으로 이루어진 단층 구조 또는 iii) 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0191] 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광 보조층 및 전자 저지층(EBL) 중에서 선택된 적어도 하나의 층을 포함할 수 있다.

[0192] 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.

[0193] 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/도데실벤젠설포닉산)), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate) (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트))), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid (폴리아닐린/캄페롤설포닉산)), 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:

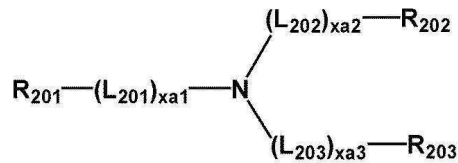
[0194]



[0195]

[0196]

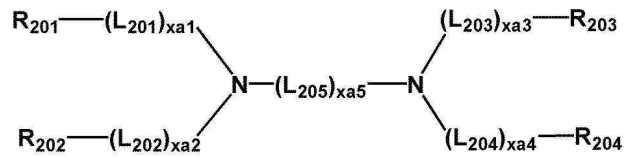
<화학식 201>



[0197]

[0198]

<화학식 202>



[0199]

[0200]

상기 화학식 201 및 202 중,

[0201]

L₂₀₁ 내지 L₂₀₄는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0202]

L₂₀₅은, *-O-*', *-S-*', *-N(Q₂₀₁)-*', 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₂₀알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치

환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0203] xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0204] xa5는 1 내지 10의 정수 중에서 선택되고,

[0205] R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 및 Q₂₀₁은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0207] * 예를 들어, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁과 R₂₀₂는, 선택적으로(optionally), 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있고, R₂₀₃과 R₂₀₄는, 선택적으로, 단일 결합, 디메틸-메틸렌기 또는 디페닐-메틸렌기를 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0208] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 및 202 중,

[0210] *L₂₀₁ 내지 L₂₀₅는 서로 독립적으로,

[0211] 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴어로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 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

[0212] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴어로-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, 피리디닐기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜탈레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 인다세닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스퀴어로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페날레닐렌기, 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;

[0213] 중에서 선택되고,

[0214] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0215] 다른 구현예에 따르면, xa1 내지 xa4는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0216] 또 다른 구현예에 따르면, xa5는 1, 2, 3 또는 4일 수 있다.

[0217] 또 다른 구현예에 따르면, R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 및 Q₂₀₁은 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈

레닐기, 인데닐기, 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

[0218] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 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(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃) 및 -N(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 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;

[0219] 중에서 선택될 수 있고,

[0220] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0221] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 201 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₃ 중 적어도 하나는, 서로 독립적으로,

[0222] 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및

[0223] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기;

[0224] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0225] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 i) R₂₀₁과 R₂₀₂은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있거나, 및/또는 ii) R₂₀₃과 R₂₀₄은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0226] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202 중 R₂₀₁ 내지 R₂₀₄ 중 적어도 하나는,

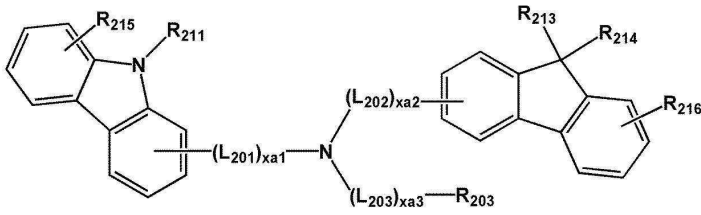
[0227] 카바졸일기; 및

[0228] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 카바졸일기;

[0229] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0230] 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있다:

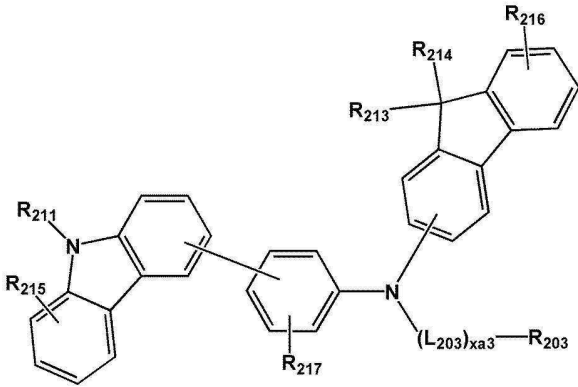
[0231] <화학식 201A>



[0232]

[0233] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A(1)로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

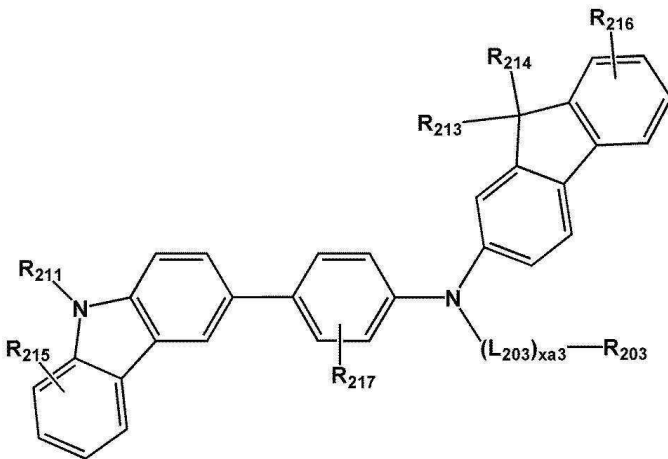
[0234] <화학식 201A(1)>



[0235]

[0236] 또 다른 예로서, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A-1로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

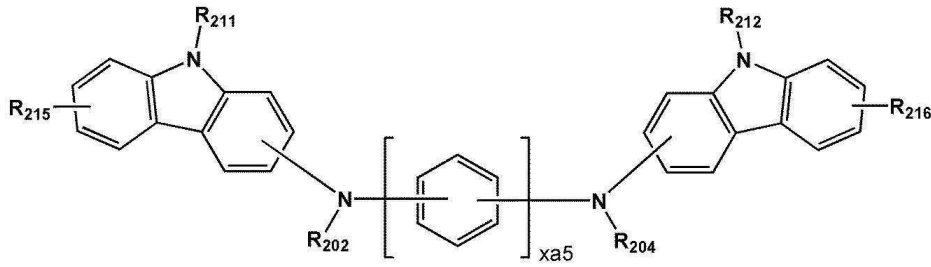
[0237] <화학식 201A-1>



[0238]

[0239] 한편, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A로 표시될 수 있다:

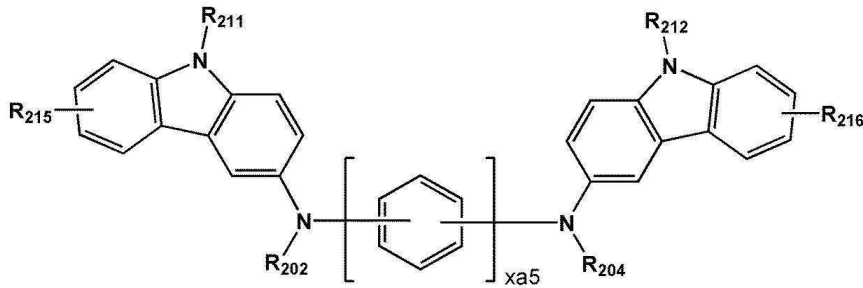
[0240] <화학식 202A>



[0241]

[0242] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화학식 202A-1로 표시될 수 있다:

[0243] <화학식 202A-1>



[0244]

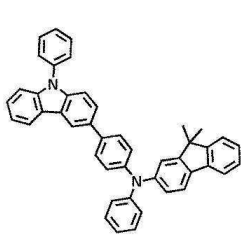
[0245] 상기 화학식 201A, 201A(1), 201A-1, 202A 및 202A-1 중,

[0246] L₂₀₁ 내지 L₂₀₃, xa1 내지 xa3, xa5 및 R₂₀₂ 내지 R₂₀₄에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

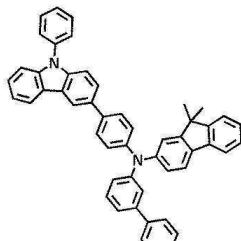
[0247] R₂₁₁ 및 R₂₁₂에 대한 설명은 본 명세서 중 R₂₀₃에 대한 설명을 참조하고,

[0248] R₂₁₃ 내지 R₂₁₇은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로헨테닐기, 시클로헥세닐기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, C₁-C₁₀알킬기로 치환된 페닐기, -F로 치환된 페닐기, 펜탈레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵탈레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스퀴이로-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.

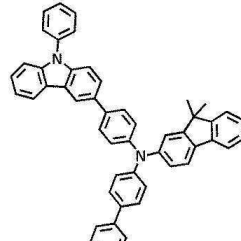
[0249] 상기 정공 수송 영역은 하기 화합물 HT1 내지 HT39 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



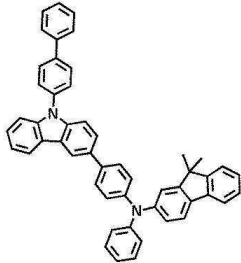
HT1



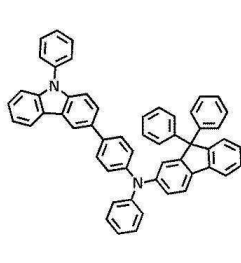
HT2



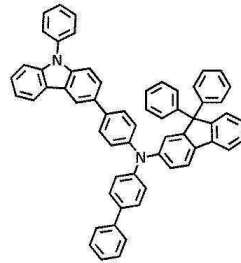
HT3



HT4

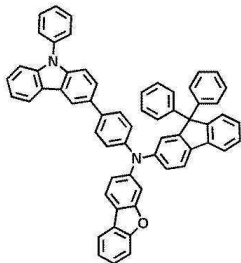


HT5

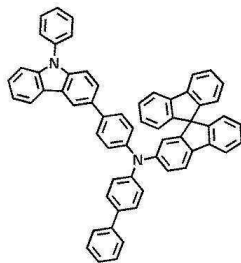


HT6

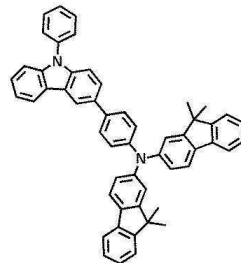
[0250]



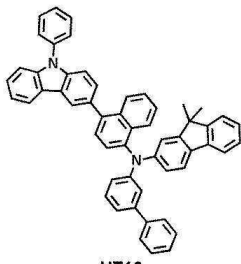
HT7



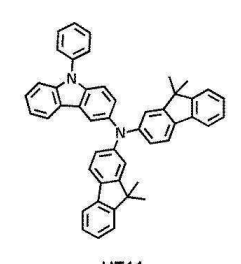
HT8



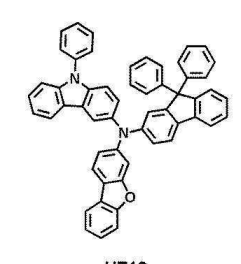
HT9



HT10

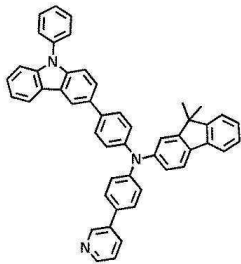


HT11

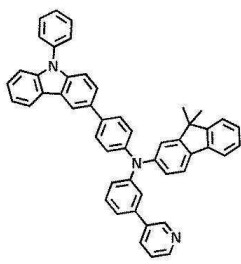


HT12

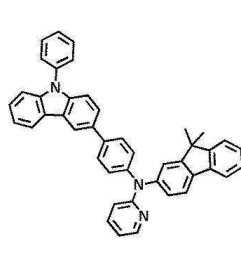
[0251]



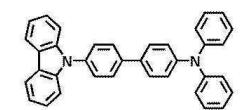
HT13



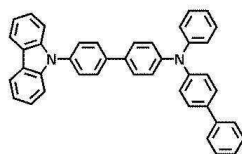
HT14



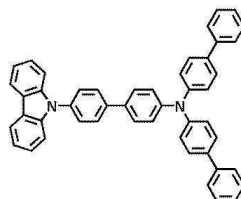
HT15



HT16

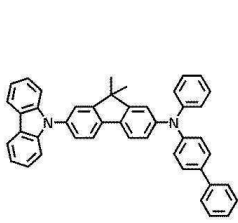


HT17

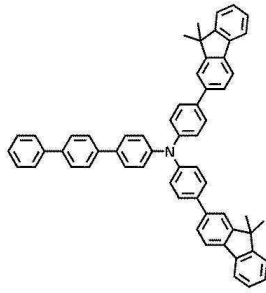


HT18

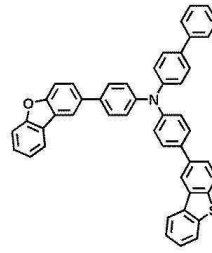
[0252]



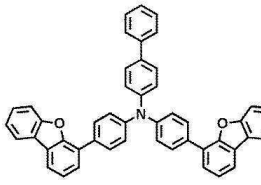
HT19



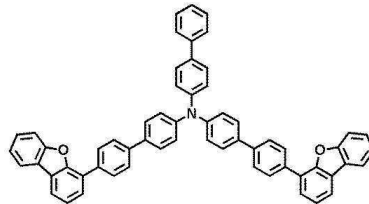
HT20



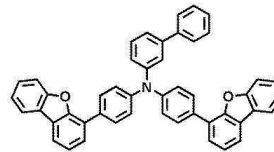
HT21



HT22

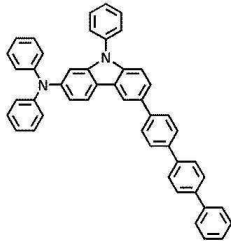


HT23

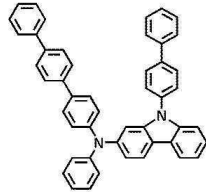


HT24

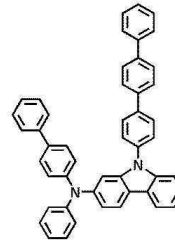
[0253]



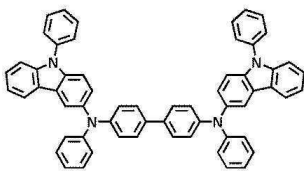
HT25



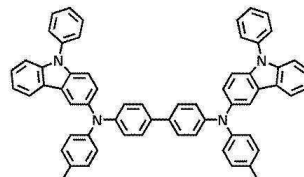
HT26



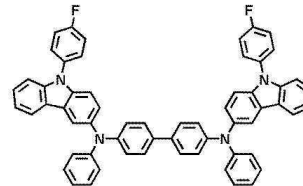
HT27



HT28

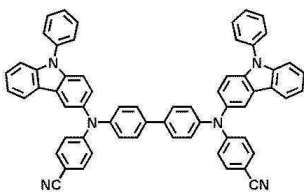


HT29

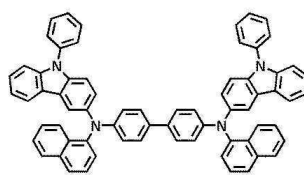


HT30

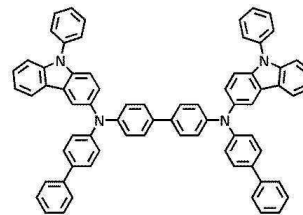
[0254]



HT31

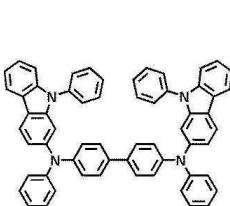


HT32

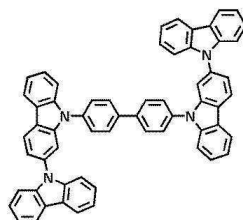


HT33

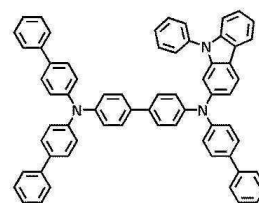
[0255]



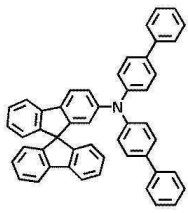
HT34



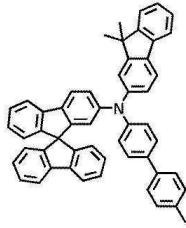
HT35



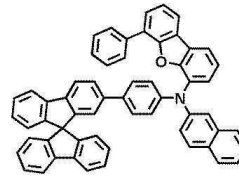
HT36



HT37



HT38



HT39

[0256]

[0257]

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.

[0258]

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.

[0259]

[p-도펀트]

[0260]

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.

[0261]

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다.

[0262]

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

[0263]

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

[0264]

예를 들어, 상기 p-도펀트는,

[0265]

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

[0266]

텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물;

[0267]

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

[0268]

하기 화학식 221로 표시되는 화합물;

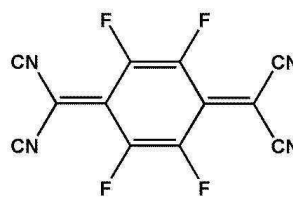
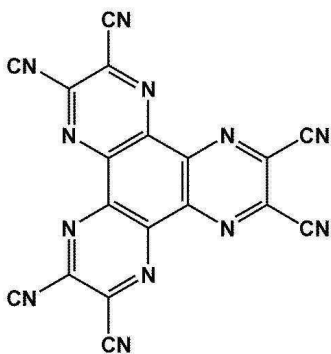
[0269]

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

[0270]

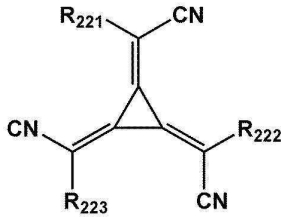
<HAT-CN>

<F4-TCNQ>



[0271]

[0272] <화학식 221>



[0273]

[0274] 상기 화학식 221 중,

[0275] R₂₂₁ 내지 R₂₂₃은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되며, 상기 R₂₂₁ 내지 R₂₂₃ 중 적어도 하나는 시아노기, -F, -Cl, -Br, -I, -F로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Cl로 치환된 C₁-C₂₀알킬기, -Br로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 및 -I로 치환된 C₁-C₂₀알킬기 중에서 선택된 적어도 하나의 치환기를 갖는다.

[0276] [유기층(150) 중 발광층]

[0277] 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.

[0278] 상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

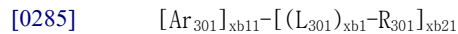
[0279] 상기 발광층 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부에 대하여, 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0280] 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.

[0281] [발광층 중 호스트]

[0282] 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0284] *<화학식 301>



[0286] 상기 화학식 301 중,

[0287] Ar₃₀₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이고,

[0288] xb11은 1, 2 또는 3이고,

[0289] L₃₀₁은, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0290] xb1는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0291] R₃₀₁은, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₃₀₁)(Q₃₀₂)(Q₃₀₃), -N(Q₃₀₁)(Q₃₀₂), -B(Q₃₀₁)(Q₃₀₂), -C(=O)(Q₃₀₁), -S(=O)₂(Q₃₀₁) 및 -P(=O)(Q₃₀₁)(Q₃₀₂) 중에서 선택되고,

[0292] xb21는 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0293] Q₃₀₁ 내지 Q₃₀₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0294] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 301 중 Ar₃₀₁은,

[0295] 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, 펜타렌 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹; 및

[0296] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타렌 그룹, 인데노안트라센 그룹, 디벤조퓨란 그룹 및 디벤조티오펜 그룹;

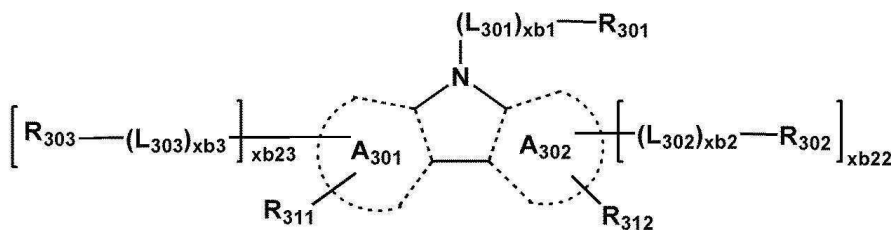
[0297] 중에서 선택되고,

[0298] Q₃₁ 내지 Q₃₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0299] 상기 화학식 301 중 xb11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₃₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

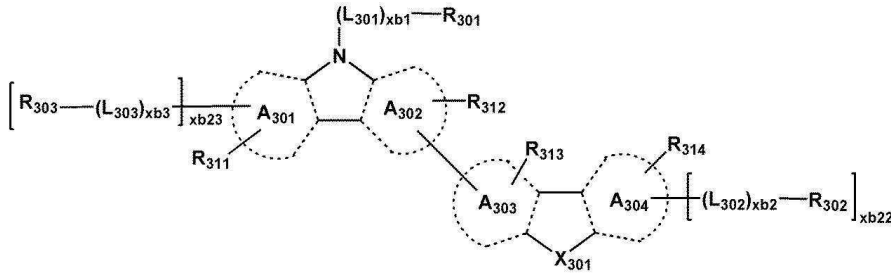
[0300] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 301로 표시되는 화합물은 하기 화학식 301-1 또는 301-2로 표시될 수 있다:

[0301] <화학식 301-1>



[0302]

[0303] <화학식 301-2>



[0304]

[0305] 상기 화학식 301-1 내지 301-2 중

[0306]

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

[0307]

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

[0308]

R₃₁₁ 내지 R₃₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂) 중에서 선택되고,

[0309]

xb₂₂ 및 xb₂₃은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고,

[0310]

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

[0311]

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

[0312]

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

[0313]

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

[0314]

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

[0315]

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, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0316]

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 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, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 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, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기;

[0317] 중에서 선택되고,

[0318] 상기 Q_{31} 내지 Q_{33} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0319] 다른 예로서, 상기 화학식 301, 301-1 및 301-2 중 R_{301} 내지 R_{304} 는 서로 독립적으로,

[0320] 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기; 및

[0321] 중수소, $-F$, $-Cl$, $-Br$, $-I$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_{1-20} 알킬기, C_{1-20} 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, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기,

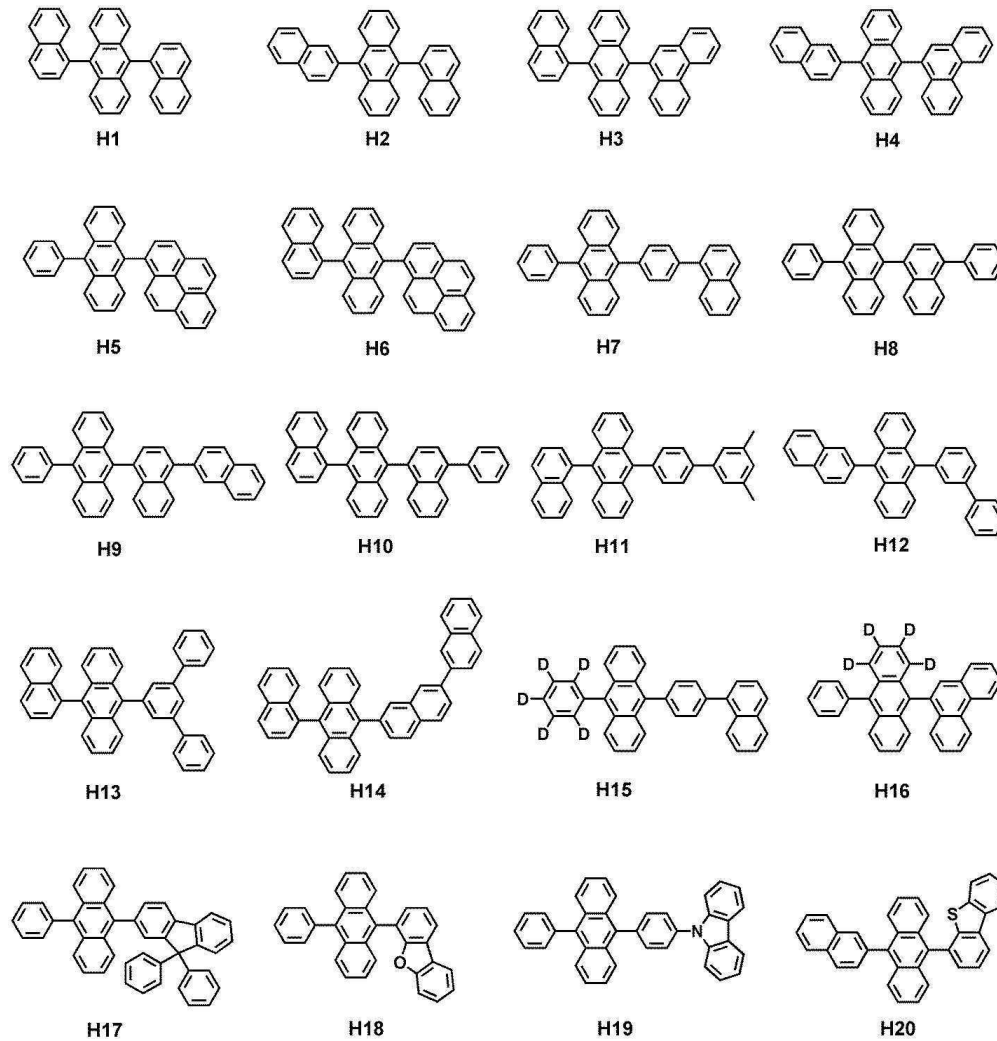
벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기;

[0322] 중에서 선택되고,

[0323] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

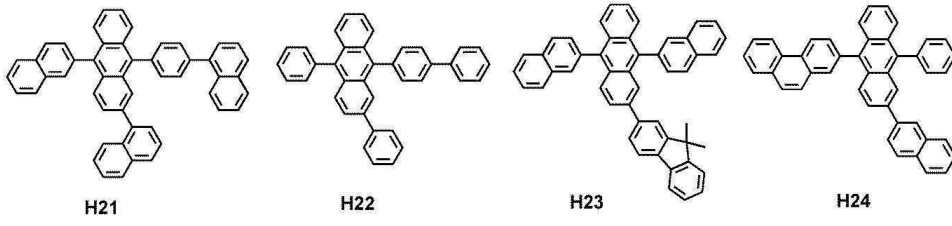
[0324] 또 다른 예로서, 상기 호스트는 알칼리토 금속 착체를 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 Be 착체 (예를 들면, 하기 화합물 H55), Mg 착체 및 Zn 착체 중에서 선택될 수 있다.

[0325] 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:

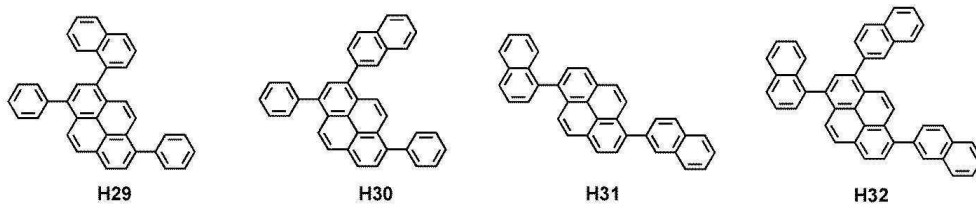
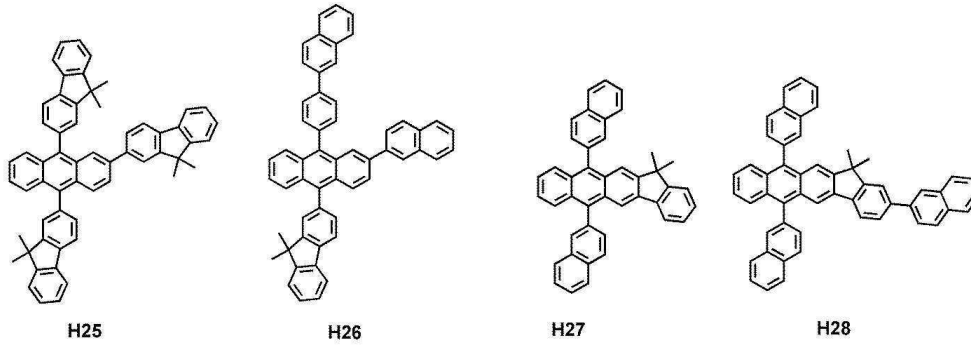


[0326]

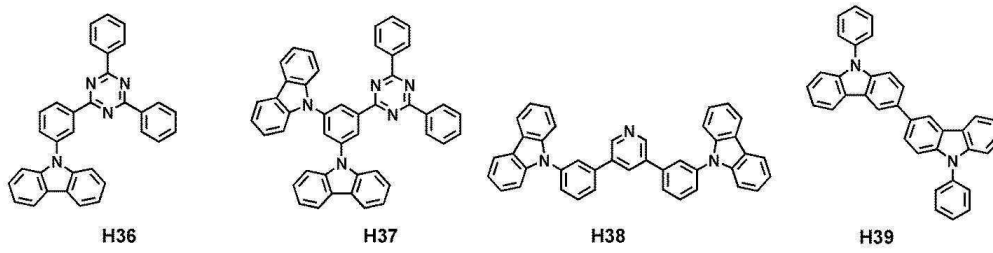
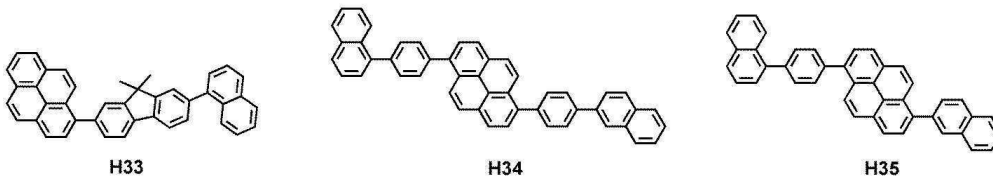
[0327]



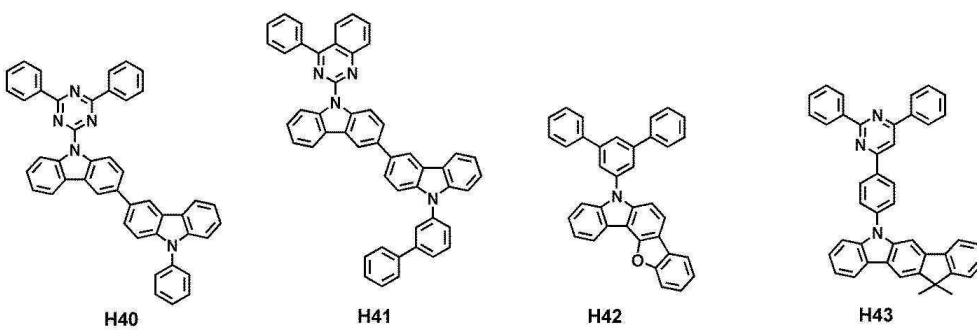
[0328]

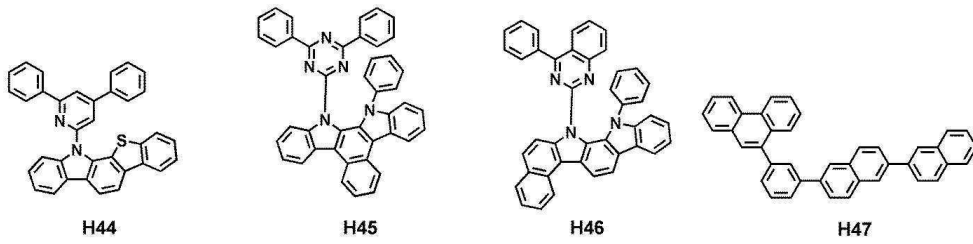


[0329]

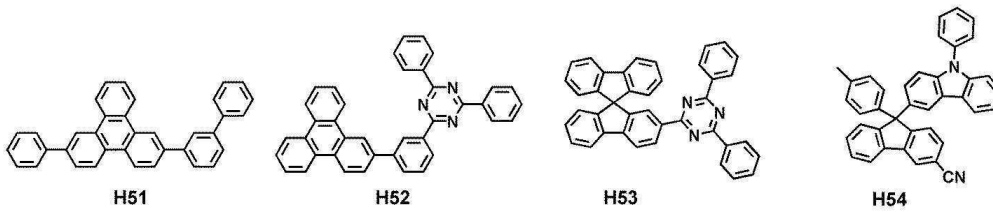
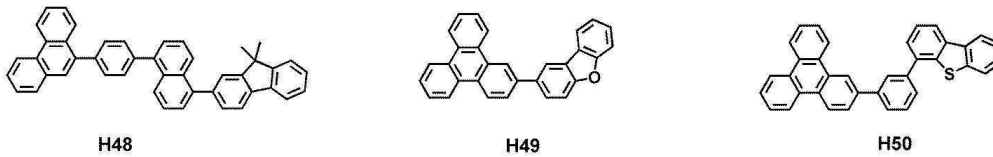


[0330]

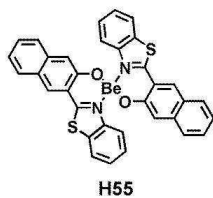




[0331]



[0332]



[0333]

[유기층(150) 중 발광층에 포함된 인광 도펀트]

[0334]

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

[0335]

[유기층(150) 중 전자 수송 영역]

[0336]

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.

[0337]

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.

[0338]

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.

[0339]

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

[0340]

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

[0341]

예를 들어, 상기 " π 전자 결핍성 합질소 고리"는, i) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹이거나, ii) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 2 이상이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹이거나, 또는 iii) 적어도 하나의 *-N=* 모이어티를 갖는 5원 내지 7원 헤테로모노시클릭 그룹 중 적어도 하나와, 적어도 하나의 C₅-C₆₀가보시클릭 그룹이 서로 축합되어 있는 헤테로폴리시클릭 그룹일 수 있다.

[0342]

상기 π 전자 결핍성 합질소 고리의 구체예로는, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속

사졸, 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.

- [0343] 예를 들어, 상기 전자 수송 영역은 하기 화학식 601로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0344] <화학식 601>
- [0345] $[Ar_{601}]_{xe11}-[(L_{601})_{xe1}-R_{601}]_{xe21}$
- [0346] 상기 화학식 601 중,
- [0347] Ar_{601} 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0348] $xe11$ 은 1, 2 또는 3이고,
- [0349] 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,
- [0350] $xe1$ 은 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0351] 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,
- [0352] 상기 Q_{601} 내지 Q_{603} 은 서로 독립적으로, C_1-C_{10} 알킬기, C_1-C_{10} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기이고,
- [0353] $xe21$ 은 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다.
- [0354] 일 구현예에 따르면, 상기 $xe11$ 개의 Ar_{601} 및 $xe21$ 개의 R_{601} 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 π 전자 결핍성 합질소 고리를 포함할 수 있다.
- [0355] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 고리 Ar_{601} 은,
- [0356] 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타켄 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
- [0357] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{20} 알킬기, C_1-C_{20} 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$ 및 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-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, 펜타켄 그

룹, 인테노안트라센 그룹, 디벤조푸란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹;

[0358] 중에서 선택될 수 있고,

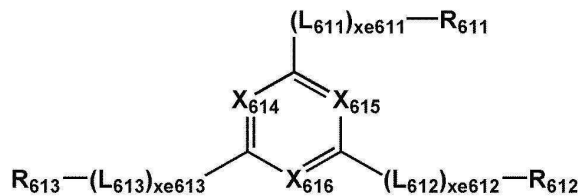
[0359] 상기 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0360] 상기 화학식 601 중 xe11이 2 이상일 경우 2 이상의 Ar₆₀₁은 단일 결합을 통하여 서로 연결될 수 있다.

[0361] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 중 Ar₆₀₁은 안트라센 그룹일 수 있다.

[0362] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 601로 표시되는 화합물은 하기 화학식 601-1로 표시될 수 있다:

[0363] <화학식 601-1>



[0364] 상기 화학식 601-1 중,
 [0365]

[0366] X₆₁₄는 N 또는 C(R₆₁₄)이고, X₆₁₅는 N 또는 C(R₆₁₅)이고, X₆₁₆은 N 또는 C(R₆₁₆)이고, X₆₁₄ 내지 X₆₁₆ 중 적어도 하나는 N이고,

[0367] L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 L₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0368] xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 상기 xe1에 대한 설명을 참조하고,

[0369] R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로, 상기 R₆₀₁에 대한 설명을 참조하고,

[0370] R₆₁₄ 내지 R₆₁₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 및 나프틸기 중에서 선택될 수 있다.

[0371] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 L₆₀₁ 및 L₆₁₁ 내지 L₆₁₃은 서로 독립적으로,

[0372] 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 티오펜렌기, 퓨라닐렌기, 카바졸일렌기, 인돌일렌기, 이소인돌일렌기, 벤조푸라닐렌기, 벤조티오펜렌기, 디벤조푸라닐렌기, 디벤조티오펜렌기, 벤조카바졸일렌기, 디벤조카바졸일렌기, 디벤조실롤일렌기, 피리다닐렌기, 이미다졸일렌기, 피라졸일렌기, 티아졸일렌기, 이소티아졸일렌기, 옥사졸일렌기, 이속사졸일렌기, 티아디아졸일렌기, 옥사디아졸일렌기, 피라지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피리다지닐렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기, 벤조퀴놀리닐렌기, 프탈라지닐렌기, 나프티리디닐렌기, 퀴녹살리닐렌기, 퀴나졸리닐렌기, 시놀리닐렌기, 페난트리디닐렌기, 아크리디닐렌기, 페난트롤리닐렌기, 페나지닐렌기, 벤조이미다졸일렌기, 이소벤조티아졸일렌기, 벤조옥사졸일렌기, 이소벤조옥사졸일렌기, 트리아졸일렌기, 테트라졸일렌기, 이미다조피리디닐렌기, 이미다조피리미디닐렌기 및 아자카바졸일렌기; 및

[0373] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-

C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 스파이로-비플루오레닐렌기, 벤조플루오레닐렌기, 디벤조플루오레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐렌기, 페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헥사세닐렌기, 펜타세닐렌기, 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;

[0374] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0375] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 xe1 및 xe611 내지 xe613은 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0376] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 601 및 601-1 중 R₆₀₁ 및 R₆₁₁ 내지 R₆₁₃은 서로 독립적으로,

[0377] 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;

[0378] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 아자카바졸일기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 페틸레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 펜타세닐기, 티오펜기, 퓨라닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 이소인돌일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기,

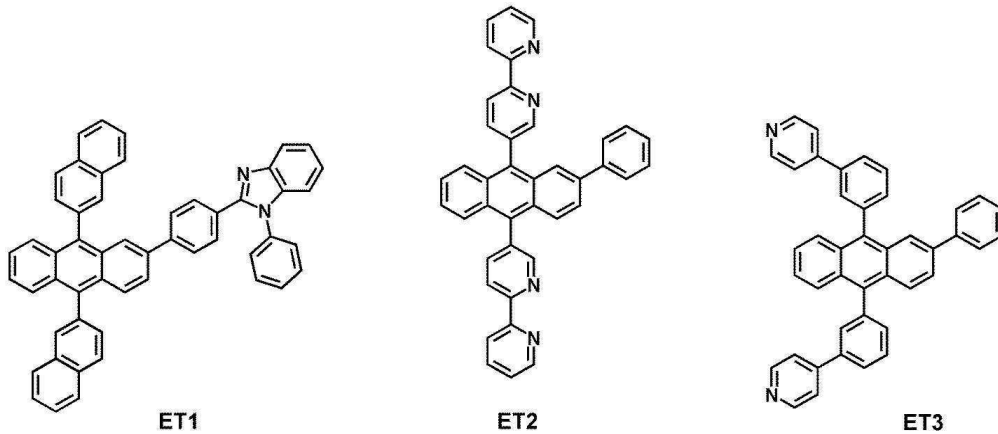
페닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 디벤조실롤일기, 피리디닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 티아디아졸일기, 옥사디아졸일기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조이미다졸일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기,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

[0379] $-S(=O)_2(Q_{601})$ 및 $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$;

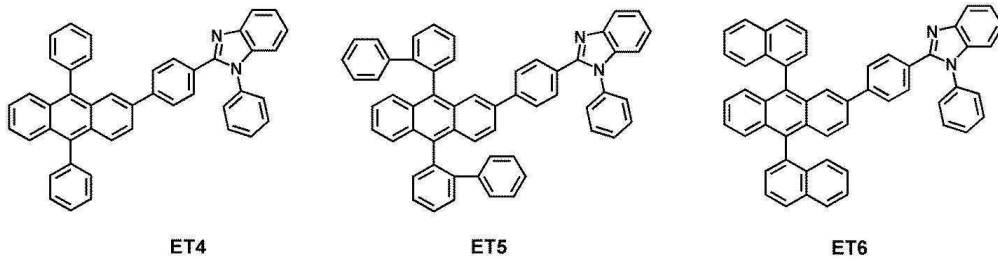
[0380] 중에서 선택되고,

[0381] 상기 Q_{601} 및 Q_{602} 에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

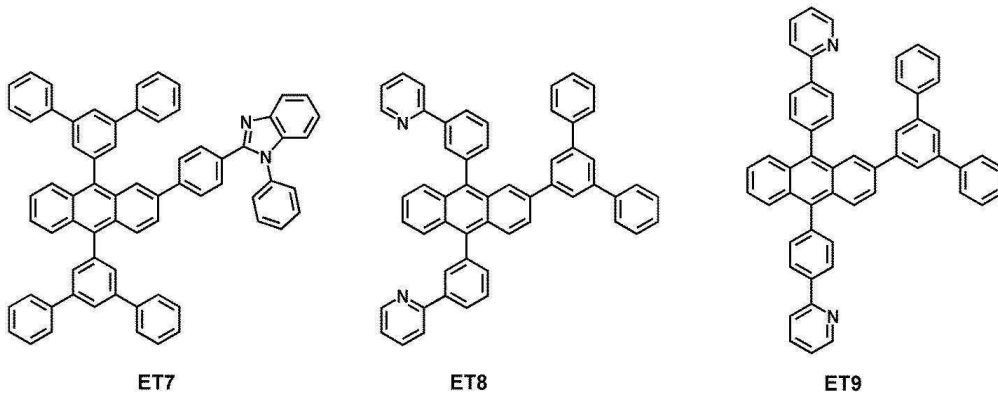
[0382] 상기 전자 수송 영역은 하기 화합물 ET1 내지 ET36 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



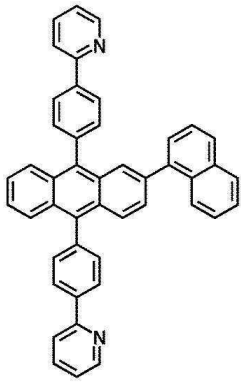
[0383]



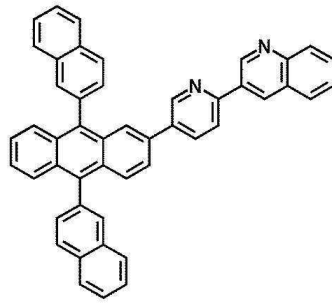
[0384]



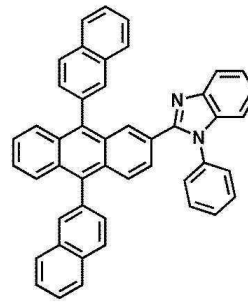
[0385]



ET10

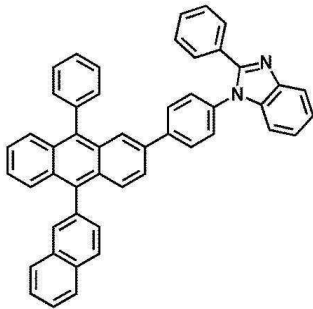


ET11

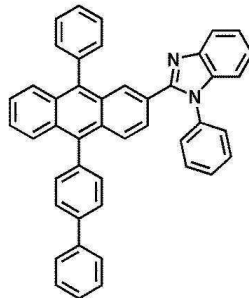


ET12

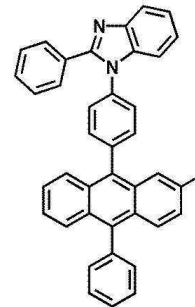
[0386]



ET13

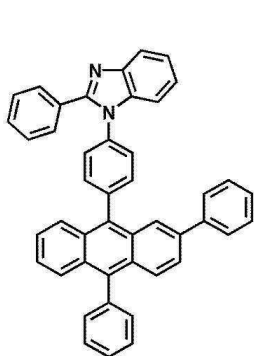


ET14

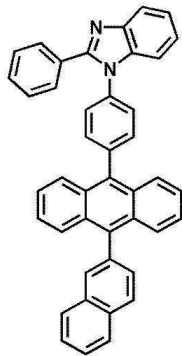


ET15

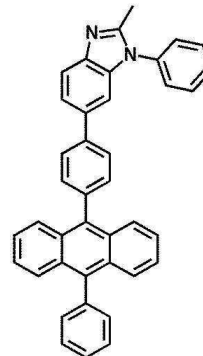
[0387]



ET16

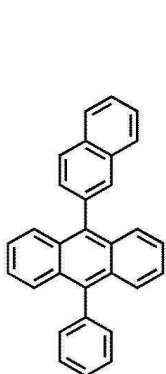


ET17

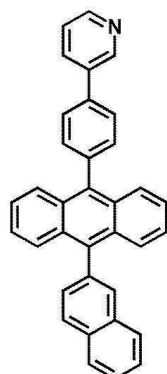


ET18

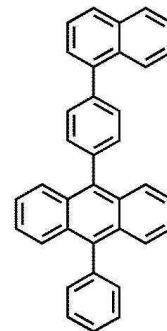
[0388]



ET19

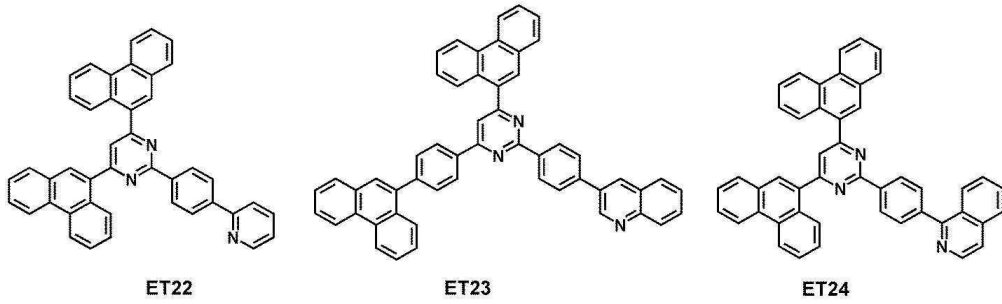


ET20

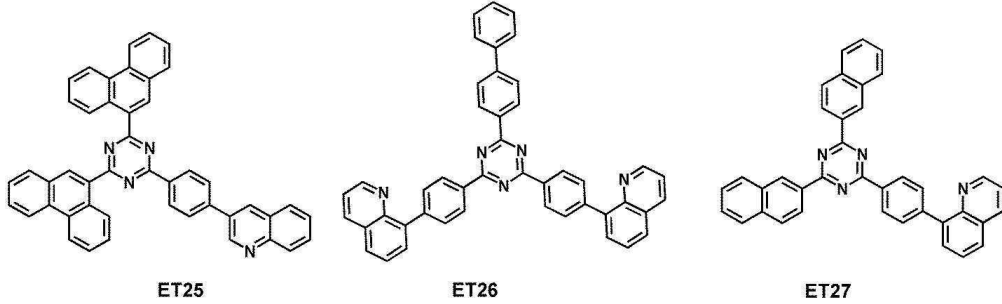


ET21

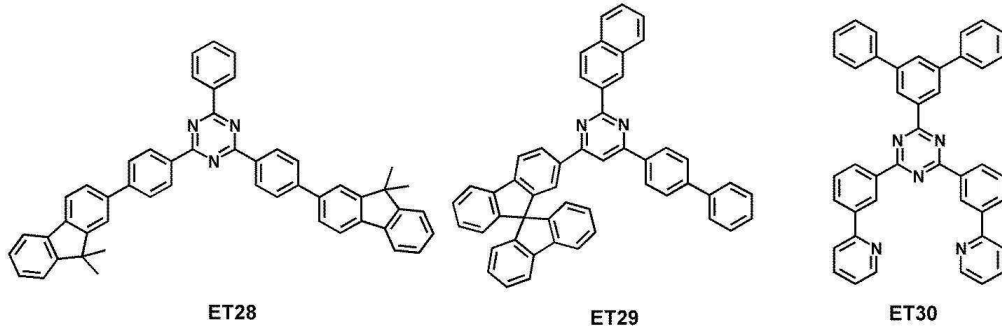
[0389]



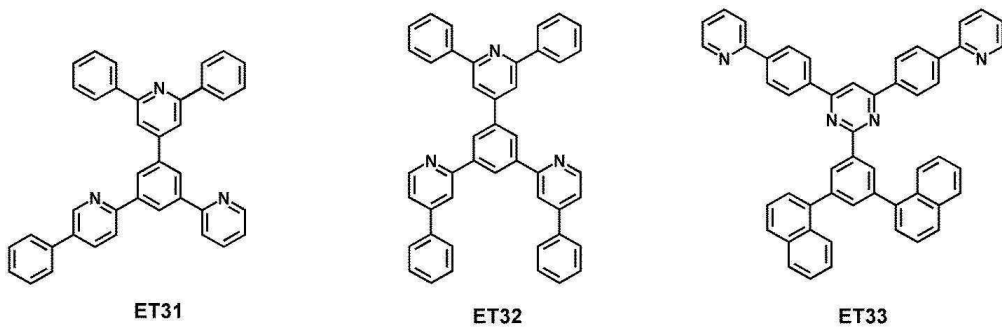
[0390]



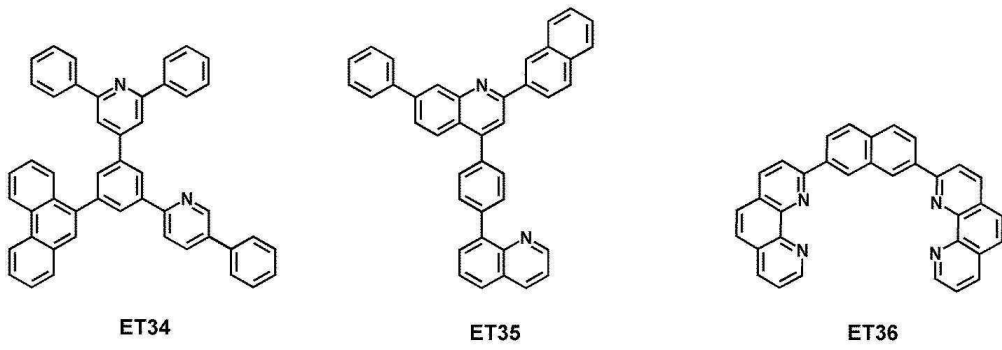
[0391]



[0392]

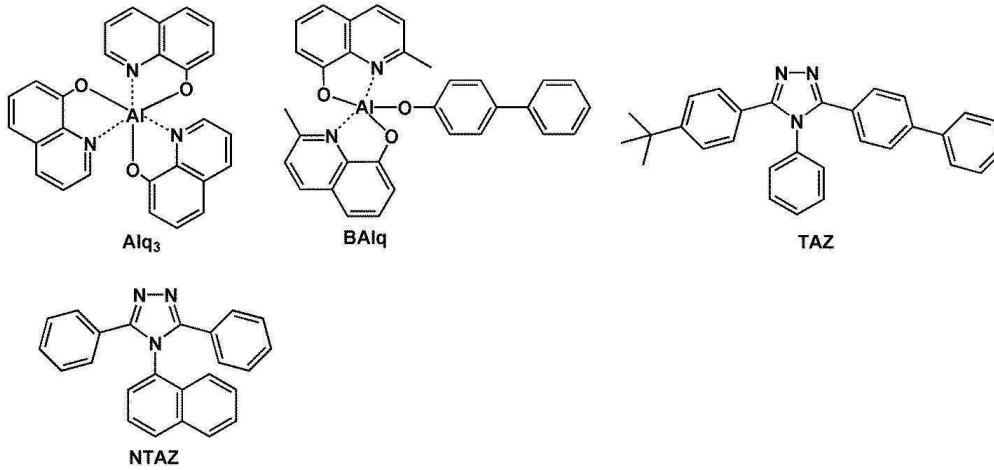


[0393]



[0394]

[0395] 또는, 상기 전자 수송 영역은 BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), Alq₃, BA1q, 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.



[0396]

[0397]

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.

[0398]

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.

[0399]

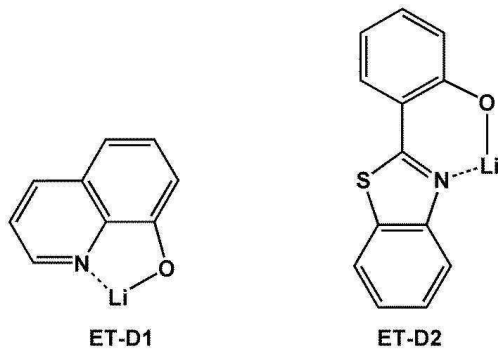
상기 전자 수송 영역(예를 들면, 상기 전자 수송 영역 중 전자 수송층)은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0400]

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.

[0401]

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.



[0402]

[0403]

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.

[0404]

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.

[0405]

상기 전자 주입층은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화

합물, 희토류 금속 화합물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체 또는 이들 중 임의의 조합을 포함할 수 있다.

- [0406] 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.
- [0407] 상기 알칼리 토금속은, Mg, Ca, Sr, 및 Ba 중에서 선택될 수 있다.
- [0408] 상기 희토류 금속은 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 및 Gd 중에서 선택될 수 있다.
- [0409] 상기 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속 화합물 및 상기 희토류 금속 화합물은, 상기 알칼리 금속, 상기 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 산화물 및 할로젠화물(예를 들면, 불화물, 염화물, 브롬화물, 요오드화물 등) 중에서 선택될 수 있다.
- [0410] 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 할로젠화물 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.
- [0411] 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.
- [0412] 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.
- [0413] 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체는, 상술한 바와 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속 및 희토류 금속의 이온을 포함하고, 상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체 및 희토류 금속 착체의 금속 이온에 배위된 리간드는, 서로 독립적으로, 히드록시퀴놀린, 히드록시이소퀴놀린, 히드록시벤조퀴놀린, 히드록시아크리딘, 히드록시페난트리딘, 히드록시페닐옥사졸, 히드록시페닐티아졸, 히드록시디페닐옥사디아졸, 히드록시디페닐티아디아졸, 히드록시페닐피리딘, 히드록시페닐벤조이미다졸, 히드록시페닐벤조티아졸, 비피리딘, 페난트롤린 및 시클로펜타다이엔 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0414] 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.
- [0415] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 상술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0416] [제2전극(190)]
- [0417] 상술한 바와 같은 유기층(150) 상부에는 제2전극(190)이 배치되어 있다. 상기 제2전극(190)은 전자 주입 전극인 캐소드(cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극(190)용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합(combination)을 사용할 수 있다.
- [0418] 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.
- [0419] 상기 제2전극(190)은 단일층인 단층 구조 또는 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0420] 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층은 각각, 진공 증착법, 스핀 코

팅법, 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.

- [0421] 진공 증착법에 의하여 상기 정공 수송 영역에 포함된 각 층, 발광층 및 전자 수송 영역에 포함된 각 층을 각각 형성할 경우, 증착 조건은, 예를 들면, 약 100 내지 약 500°C의 증착 온도, 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr의 진공도 및 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 증착 속도 범위 내에서, 형성하고자 하는 층에 포함될 재료 및 형성하고자 하는 층의 구조를 고려하여 선택될 수 있다.
- [0422] 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.
- [0423] [치환기의 일반적인 정의]
- [0424] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는, 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, ter-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0425] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0426] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는, 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 탄화수소 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기, 프로피닐기, 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0427] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는, -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0428] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는, 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0429] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 1,2,3,4-옥사트리아졸리딘기(1,2,3,4-oxatriazolidiny), 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranly), 테트라히드로티오펜기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0430] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예에는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0431] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예에는, 4,5-디히드로-1,2,3,4-옥사트리아졸일기, 2,3-디히드로퓨라닐기, 2,3-디히드로티오펜기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0432] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을

의미하며, C₆-C₆₀아틸렌기는 탄소수 6 내지 60개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아틸기의 구체예에는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함된다. 상기 C₆-C₆₀아틸기 및 C₆-C₆₀아틸렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 상기 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

[0433] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아틸기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C₁-C₆₀헤테로아틸렌기는 N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아틸기의 구체예에는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등이 포함된다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아틸기 및 C₁-C₆₀헤테로아틸렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 축합될 수 있다.

[0434] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아틸옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아틸기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아틸티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아틸기임)를 가리킨다.

[0435] 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.

[0436] 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.

[0437] 본 명세서 중 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹이란, 고리-형성 원자로서 탄소만을 포함한 탄소수 4 내지 60의 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹을 의미한다. 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹은 방향족 카보시클릭 그룹 또는 비-방향족 카보시클릭 그룹일 수 있다. 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹은 벤젠과 같은 고리, 페닐기와 같은 1가 그룹 또는 페닐렌기와 같은 2가 그룹일 수 있다. 또는, 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹에 연결된 치환기에 개수에 따라, 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹은 3가 그룹 또는 4가 그룹일 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

[0438] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹이란, 상기 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹과 동일한 구조를 갖되, 고리-형성 원자로서, 탄소(탄소수는 1 내지 60일 수 있음) 외에, N, O, Si, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함한 그룹을 의미한다.

[0439] 본 명세서 중, 상기 치환된 C₄-C₆₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C₆-C₆₀아틸렌기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아틸렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알킬닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아틸기, 치환된 C₆-C₆₀아틸옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아틸티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아틸기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0440] 중수소(-D), -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기,

C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0441] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₁₁)(Q₁₂)(Q₁₃), -N(Q₁₁)(Q₁₂), -B(Q₁₁)(Q₁₂), -C(=O)(Q₁₁), -S(=O)₂(Q₁₁) 및 -P(=O)(Q₁₁)(Q₁₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0442] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0443] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -Si(Q₂₁)(Q₂₂)(Q₂₃), -N(Q₂₁)(Q₂₂), -B(Q₂₁)(Q₂₂), -C(=O)(Q₂₁), -S(=O)₂(Q₂₁) 및 -P(=O)(Q₂₁)(Q₂₂) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0444] -Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃), -N(Q₃₁)(Q₃₂), -B(Q₃₁)(Q₃₂), -C(=O)(Q₃₁), -S(=O)₂(Q₃₁) 및 -P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂);

[0445] 중에서 선택되고,

[0446] 상기 Q₁₁ 내지 Q₁₃, Q₂₁ 내지 Q₂₃ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 중수소, -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 비페닐기 및 터페닐기 중에서 선택될 수 있다.

[0447] 본 명세서 중 "Ph"은 페닐기를 의미하고, "Me"은 메틸기를 의미하고, "Et"은 에틸기를 의미하고, "ter-Bu" 또는 "Bu^t"은 tert-부틸기를 의미하고, "OMe"는 메톡시기를 의미한다.

[0448] 본 명세서 중 "비페닐기"는 "페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "비페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

[0449] 본 명세서 중 "터페닐기"는 "비페닐기로 치환된 페닐기"를 의미한다. 상기 "터페닐기"는, 치환기가 "C₆-C₆₀아릴기로 치환된 C₆-C₆₀아릴기"인 "치환된 페닐기"에 속한다.

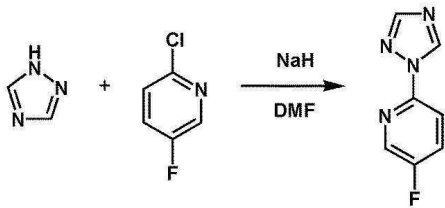
[0450] 본 명세서 중 * 및 *'은, 다른 정의가 없는 한, 해당 화학식 중 이웃한 원자와의 결합 사이트를 의미한다.

[0451] 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.

[0452] [실시예]

[0453] 합성예 1: 화합물 1-6의 합성

[0454] 중간체 1-6(1)의 합성

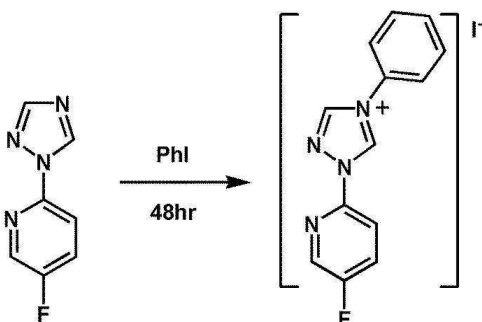


중간체 1-6(1)

[0455]

[0456] 질소 봉입 장치 하에서 72.7g (0.6 mol)의 2-클로로-5-플루오로피리딘(2-chloro-5-fluoropyridine), 61.2g (0.9 mol)의 1,2,4-트리아졸(1,2,4-triazole) 및 21.6g (0.9 mol)의 NaH를 1500 ml의 DMF과 혼합한 다음, 4시간 동안 100℃까지 가열하였다. 이어서, 추가로 4시간 동안 동일 온도에서 교반한 다음, 실온에서 밤새 추가 교반하여 수득한 반응 혼합물을 디클로로메탄(dichloromethane)과 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 마그네슘 설페이트(magnesium sulfate)로 건조시킨 다음, Celite를 이용하여 여과한 후, 컬럼크로마토그래피를 수행하여, 중간체 1-6(1) 93g (수율=93%)을 얻었다.

[0457] 중간체 1-6(2)의 합성



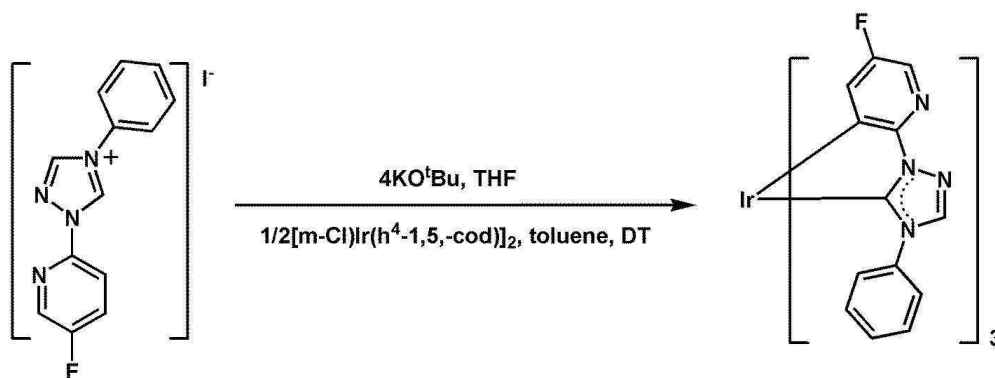
중간체 1-6(1)

중간체 1-6(2)

[0458]

[0459] 56g (0.33 mol)의 중간체 1-6(1)을 560 ml의 THF 용액에 녹인 다음, 234.2g (1.65 mol)의 페닐 아이오다이드(phenyl iodide)를 첨가하여 100℃에서 가열 교반하여 수득한 반응 혼합물을 상온까지 냉각시킨 후 생성된 고체를 여과하고 건조하여, 중간체 1-6(2) 81.54g (수율=79.7%)를 얻었다.

[0460] 화합물 1-6의 합성



중간체 1-6(2)

화합물 1-6

[0461]

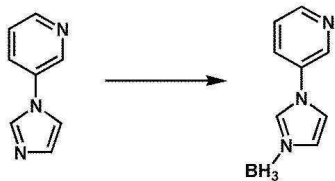
[0462] 10g (32 mmol)의 합성된 중간체 1-6(2) (iodide salt in toluene)에 64.3 ml의 KO^tBu를 추가하고 실온에서 30분동안 반응시킨 다음, 추가로 30분동안 교반하였다. 이로부터 수득한 반응물에 2.16g (3.2 mmol)의 [m-Cl]Ir(h⁴-1,5,-cod)₂ (in toluene)을 추가하고, 실온에서 1시간 교반한 다음, 70℃에서 2시간 추가로 교반한 다음, 밤새 환류(reflux)시켰다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 상온까지 낮추고 디클로로메탄(dichloromethane)과 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득한 다음, 수득한 유기층을 마그네슘 설페이트

(magnesium sulfate)로 건조시킨 후, Celite를 이용하여 여과한 후, 컬럼크로마토그래피를 수행하여, 화합물 1-6 1.15g (수율=24%)을 얻었다. 수득한 화합물 1-6을 ¹H NMR(CDCl₃, 500 MHz) 및 FAB-MS로 확인하였다.

[0463] ¹H NMR : δ=6.57(6H), 6.74(6H), δ=7.12(6H), δ=7.34(3H), δ=7.94(3H), δ=8.04(3H)

[0464] FAB-MS [M⁺] found: 859.2, clac.: 859

[0465] **합성예 2: 화합물 1-1의 합성**



[0466] 중간체 1-1(1)

중간체 1-1(2)

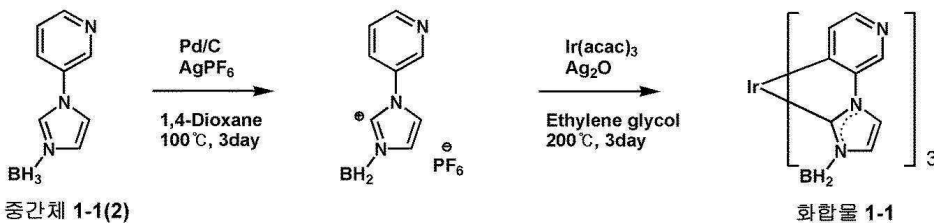
[0467] **중간체 1-1(1)의 합성**

[0468] 질소 봉입 장치 하에서 72.7g (0.6 mol)의 2-클로로-5-플루오로피리딘(2-chloro-5-fluoropyridine), 61.2g (0.9 mol)의 imidazole 및 21.6g (0.9 mol)의 NaH를 1500 ml의 DMF과 혼합한 다음, 4시간 동안 100℃까지 가열 하였다. 이어서, 추가로 4시간 동안 동일 온도에서 교반한 다음, 실온에서 밤새 추가 교반하여 수득한 반응 혼합물을 디클로로메탄(dichloromethane)과 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득하였다. 상기 수득한 유기층을 마그네슘 설페이트(magnesium sulfate)로 건조시킨 다음, Celite를 이용하여 여과한 후, 컬럼크로마토그래피를 수행하여, 중간체 1-1(1) 86g (수율=86%)을 얻었다.

[0469] **중간체 1-1(2)의 합성**

[0470] 56g (0.33 mol)의 중간체 1-1(1)을 560 ml의 THF 용액에 녹인 다음, 234.2g (1.65 mol)의 아이오도 보란 (iodobrane)를 첨가하여 120℃에서 가열 교반하여 수득한 반응 혼합물을 상온까지 냉각시킨 후 생성된 고체를 여과하고 건조하여, 중간체 1-1(2) 72.13g (수율=45.34%)를 얻었다.

[0471] **화합물 1-1의 합성**



[0472] 중간체 1-1(2)

화합물 1-1

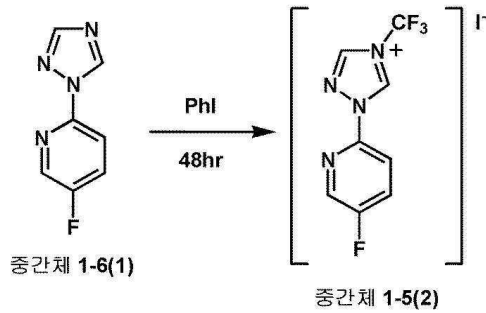
[0473] 10g (32 mmol)의 합성된 중간체 1-1(2)에 Pd/C (20 wt%) 촉매를 이용하여 AgPF₆ 3equiv로 100℃로 3일간 교반하여 밤새 환류(reflux)시켰다. 여기에 Ir(acac)₃ 0.33 당량을 첨가하고 base로 Ag₂O를 1.2 당량 첨가하여 ethylene glycol 하에 3일간 교반하여 밤새 환류(reflux)시켰다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 상온까지 낮추고 디클로로메탄(dichloromethane)과 물을 이용하여 3회 추출하여 유기층을 수득한 다음, 수득한 유기층을 마그네슘 설페이트(magnesium sulfate)로 건조시킨 후, Celite를 이용하여 여과한 후, 컬럼크로마토그래피를 수행하여, 화합물 1-1 1.15g (수율=20%)을 얻었다. 수득한 화합물 1-1을 ¹H NMR(CDCl₃, 500 MHz) 및 FAB-MS로 확인하였다.

[0474] ¹H NMR : δ=7.23(6H), 6.77(3H), δ=6.67(3H), δ=5.21(3H), δ=5.06(3H),

[0475] FAB-MS [M⁺] found: 661.2, calc.: 661

[0476] **합성예 3: 화합물 1-5의 합성**

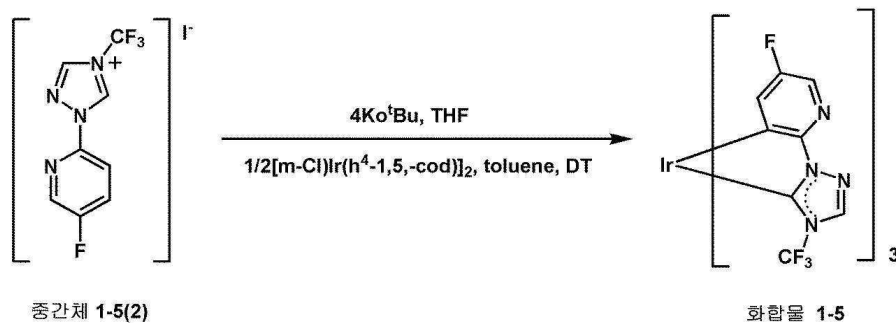
[0477] 중간체 1-5(2)의 합성



[0478]

[0479] 페닐 아이오다이드 대신 트리플루오로아이오도메탄(trifluoroiodomethane)를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 1-6(2)의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 1-5(2) 85g (수율 = 85%)를 합성하였다.

[0480] 화합물 1-5의 합성



[0481]

[0482] 중간체 1-6(2) 대신 중간체 1-5(2)를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1-6의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 1-5를 합성하였다. 수득한 화합물 1-5 1.02g (수율 = 19%)을 $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 500 \text{ MHz})$ 및 FAB-MS로 확인하였다.

[0483] $^1\text{H NMR} : \delta = 3.8(3\text{H}), 7.32(3\text{H}), \delta = 7.50(3\text{H}), \delta = 7.63(6\text{H}), \delta = 8.35(3\text{H})$

[0484] FAB-MS $[M]^+$ found: 832.1, clac.: 832

[0485] **평가예 1**

[0486] 화합물 1-1 내지 1-8, 1-A 내지 1-C, 2-1, 2-2 및 2-A 내지 2-C에 대하여 금속과 리간드 간의 결합 분해 에너지(BDE) 중 최소값과 최저 여기 삼중항(T_1) 에너지 준위를 Gaussian 프로그램의 DFT 방법을 이용(B3LYP, LANL2DZ:6-31+G* 수준에서 구조 최적화)하여 평가한 결과를 표 1에 요약하였다.

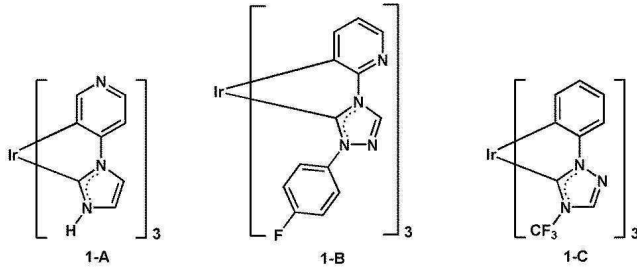
표 1

[0487]

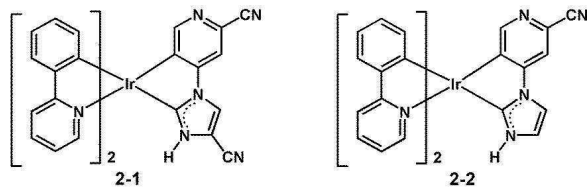
화합물 No.	시뮬레이션 데이터		
	BDE 최소값 (eV)	T_1 에너지 준위 (eV)	BDE 최소값 - T_1 에너지 준위 (eV)
1-1	3.674	2.718	0.956
1-2	2.894	2.892	0.002
1-3	3.729	3.156	0.573
1-4	3.709	3.149	0.56
1-5	3.288	3.063	0.225
1-6	3.557	3.175	0.382
1-7	3.556	3.184	0.327
1-8	3.225	3.162	0.057
1-A	3.182	3.234	-0.052
1-B	3.166	3.287	-0.121

1-C	3.27	3.280	-0.01
2-1	2.910	2.864	0.046
2-2	3.551	2.816	0.735
2-A	0.94	3.096	-2.102
2-B	2.57	2.67	-0.1
2-C	2.58	2.99	-0.38

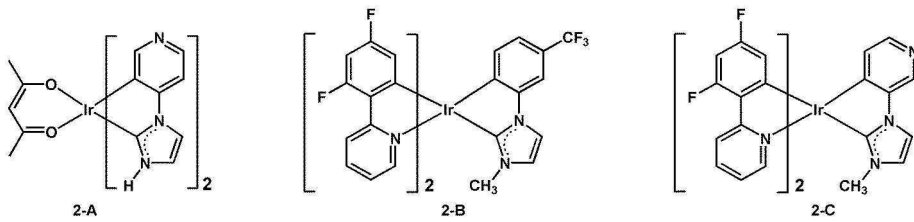
[0488]



[0489]



[0490]



[0491]

[0492]

실시예 1

[0493]

기판 및 애노드로서 코닝(corning) 15Ω/cm² (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 상기 유리 기판을 설치하였다.

[0494]

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.

[0495]

상기 정공 수송층 상부에 CBP(호스트) 및 화합물 1-5(도펀트)을 중량비 98 : 2로 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0496]

상기 발광층 상부에 BCP를 증착하여 200Å 두께의 정공 저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상부에 Alq₃를 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.

[0497]

비교예 A

[0498]

발광층 형성시 도펀트로서 화합물 1-5 대신 화합물 1-A를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0499]

평가예 2

[0500]

상기 실시예 1 및 비교예 A에서 제작된 유기 발광 소자의 전류 밀도, 발광 효율, 최대 발광 파장 및 수명을

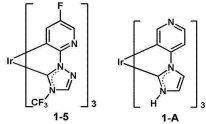
Keithley SMU 236 및 휘도계 PR650을 이용하여 측정하여, 그 결과를 표 2에 나타내었다. 수명(T₉₇)은, 유기 발광 소자 구동 후 휘도(@1000nit)가 초기 휘도(100%)의 97%가 되는데 걸리는 시간을 측정한 것이다.

표 2

[0501]

	도펀트 화합물 No.	전류 밀도 (mA/cm ²)	발광 효율 (cd/A)	최대 발광 파장 (nm)	수명(T ₉₇) (hr@1000nit)
실시예 1	1-5	4.2	15	461	0.7
비교예 A	1-A	4.1	13	454	0.2

[0502]



상기 표 2로부터 실시예 1의 유기 발광 소자는 비교예 A의 유기 발광 소자에 비하여 동등 수준 또는 우수한 전류 밀도, 발광 효율 및 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0503]

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

도면

도면1

10

190
150
110