



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2025년06월20일
(11) 등록번호 10-2823895
(24) 등록일자 2025년06월18일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 15/00 (2024.01) C09K 11/06 (2006.01)
H10K 50/00 (2023.01) H10K 99/00 (2023.01)
- (52) CPC특허분류
C07F 15/0033 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
- (21) 출원번호 10-2021-0161319
- (22) 출원일자 2021년11월22일
심사청구일자 2021년11월22일
- (65) 공개번호 10-2022-0071124
- (43) 공개일자 2022년05월31일
- (30) 우선권주장
202011305815.2 2020년11월23일 중국(CN)
202111036660.1 2021년09월09일 중국(CN)
- (56) 선행기술조사문헌
CN111808142 A*
KR1020200096423 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

- (73) 특허권자
베이징 썸머 스프라우트 테크놀로지 컴퍼니 리미티드
중국, 베이징 102308, 먼투우거우 구, 탄위안 로드, 넘버 1, 빌딩 3, 6층, 601호
- (72) 발명자
상, 덩
중국, 베이징 102308, 먼투우고우 디스트릭트, 탄웬 로드 넘버.1, 빌딩3 6번째 층, 룸 601
리, 홍보
중국, 베이징 102308, 먼투우고우 디스트릭트, 탄웬 로드 넘버.1, 빌딩3 6번째 층, 룸 601
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
특허법인(유한) 대아

전체 청구항 수 : 총 27 항

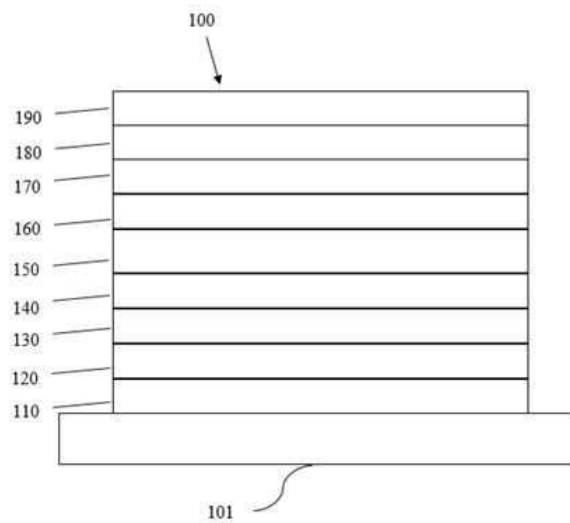
심사관 : 김지은

(54) 발명의 명칭 유기 전계발광재료 및 그의 소자

(57) 요약

본 발명은 유기 전계발광재료 및 그의 소자를 개시하였다. 해당 유기 전계발광재료는 식 1 구조의 L_a 리간드 구조를 구비하는 금속 착물을 포함하며, L_a 리간드의 특정 위치에 불소 치환기를 도입함으로써, 이러한 신규 화합물이 전계발광소자에 응용되어 더욱 포화된 발광, 더욱 우수한 소자 성능을 제공할 수 있는바, 예를 들어 소자 효율의 향상, 소자 전압의 감소를 제공할 수 있다. 본 발명은 해당 금속 착물을 포함하는 전계발광소자 및 해당 금속 착물을 포함하는 화합물 조합을 더 개시하였다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H10K 50/12 (2023.02)

H10K 85/342 (2023.02)

H10K 85/6572 (2023.02)

(72) 발명자

차이, 웨이

중국, 베이징 102308, 먼토우고우 디스트릭트, 탄
웬 로드 넘버.1, 빌딩3 6번째 층, 룸 601

왕, 쥘

중국, 베이징 102308, 먼토우고우 디스트릭트, 탄
웬 로드 넘버.1, 빌딩3 6번째 층, 룸 601

왕, 타오

중국, 베이징 102308, 먼토우고우 디스트릭트, 탄
웬 로드 넘버.1, 빌딩3 6번째 층, 룸 601

칙 웬 레이몬드 쉰

중국, 베이징 102308, 먼토우고우 디스트릭트, 탄
웬 로드 넘버.1, 빌딩3 6번째 층, 룸 601

관권 사

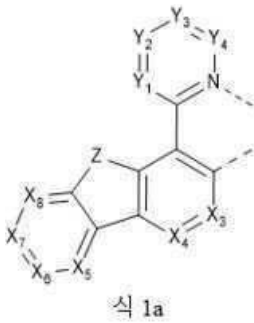
중국, 베이징 102308, 먼토우고우 디스트릭트, 탄
웬 로드 넘버.1, 빌딩3 6번째 층, 룸 601

명세서

청구범위

청구항 1

금속 착물에 있어서, 여기서, 상기 금속 착물은 $Ir(L_a)(L_b)_2$ 의 구조로 나타내고; 그 중 L_a 는 식 1a의 구조로 나타내며:



식 1a에서,

Z는 O에서 선택되며;

X_3 - X_8 은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_x 에서 선택되며;

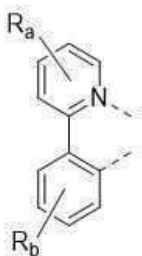
Y_1 - Y_4 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 에서 선택되며;

R_x , R_y 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~12 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 4~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 시아노기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;

X_7 는 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이며, 또는 X_8 는 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이며;

Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이고, 상기 R_y 는 F이며;

L_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 이하 구조에서 선택되며:



여기서,

R_a 및 R_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 단일 치환, 다중 치환 또는 비치환을 나타내며;

R_a 및 R_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아

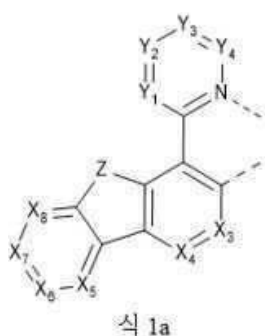
릴실릴기, 시아노기, 이소시아노기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;

상기 치환된 알킬기, 치환된 시클로알킬기, 치환된 헤테로알킬기, 치환된 헤테로시클릭기, 치환된 아릴기, 치환된 헤테로아릴기, 치환된 알킬실릴기, 치환된 아릴실릴기는, 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로알킬기, 헤테로시클릭기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬실릴기, 아릴실릴기 중의 임의의 하나의 그룹이, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 비치환된 헤테로시클릭기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아릴실릴기, 시아노기, 이소시아노기, 및 이들 조합에서 선택된 하나 또는 복수 개에 의해 치환될 수 있음을 의미하는 금속 착물.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

L_a는 식 1a의 구조로 나타내며:



Z는 0에서 선택되며;

X₃-X₈은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_x에서 선택되며;

Y₁- Y₄는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y에서 선택되며;

R_x는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~12 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 시아노기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;

X₇는 CR_x이고, 상기 R_x는 시아노기이며, 또는 X₈는 CR_x이고, 상기 R_x는 시아노기이며;

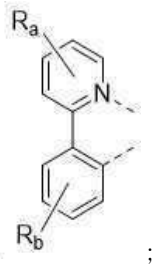
Y₂ 및 Y₃ 중 적어도 하나는 CR_y이고, 상기 R_y는 F이며;

Y₁-Y₄ 중 나머지가 CR_y로부터 선택될 경우, 상기 R_y는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 1~12 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 4~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

L_b는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 하기로 표시된 구조에서 선택되며:



여기서,

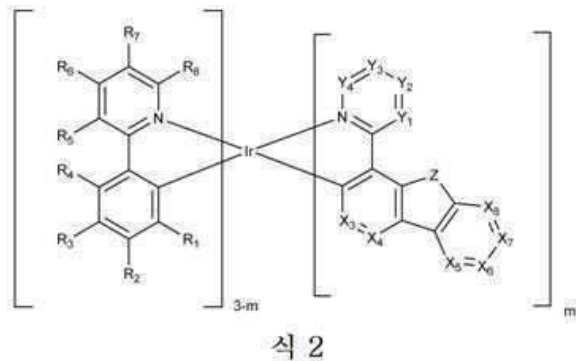
R_a , R_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 단일 치환, 다중 치환 또는 비치환을 나타내며;

R_a , R_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 시아노기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

상기 금속 착물은 식 2의 구조로 나타내며:



여기서,

m 은 1이고, 두 개의 L_b 는 동일하고;

Z 는 0에서 선택되며;

X_3 - X_8 은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_x 에서 선택되며;

Y_1 - Y_4 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 에서 선택되며;

R_x , R_y , R_1 - R_8 은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~12 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 4~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 시아노기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;

X_7 은 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이며, 또는 X_8 은 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이며;

Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이고, 상기 R_y 는 F인 금속 착물.

청구항 5

제 1 항에 있어서,

Y_1 - Y_4 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 로부터 선택되며, Y_2 또는 Y_3 은 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F인 금속 착물.

청구항 6

제 1 항에 있어서,

Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이고; Y_1 - Y_4 중 나머지가 CR_y 로부터 선택될 경우, R_y 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 1~12 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물.

청구항 7

제 1 항에 있어서,

Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이고; Y_1 - Y_4 중 나머지가 CR_y 로부터 선택될 경우, R_y 는 수소, 듀테륨, 메틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, tert-부틸기, 이소부틸기, 펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 또는 이들의 조합에서 선택되며; 선택적으로, 상기 그룹 중의 수소는 듀테륨에 의해 부분적으로 또는 완전히 치환되는 금속 착물.

청구항 8

제 1 항에 있어서,

Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이고; Y_1 - Y_4 중 적어도 또 하나는 CR_y 로부터 선택되며, 적어도 하나의 R_y 는 듀테륨, 할로젠, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 4~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물.

청구항 9

제 1 항에 있어서,

Y_2 는 CR_y 이고, 상기 R_y 는 불소이며; Y_3 은 CR_y 이고, 상기 R_y 는 듀테륨, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 4~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;

또는, Y_3 은 CR_y 이고, 상기 R_y 는 불소이며; Y_2 는 CR_y 이고, 상기 R_y 는 듀테륨, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 4~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물.

청구항 10

제 1 항에 있어서,

X_7 또는 X_8 은 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이며, 또한 적어도 하나의 R_x 는 듀테륨, 할로젠, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 4~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물.

청구항 11

제 1 항에 있어서,

X_7 은 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기인 금속 착물.

청구항 12

제 4 항에 있어서,

R_2 , R_3 , R_6 , R_7 중 적어도 하나 또는 적어도 두 개 또는 적어도 세 개 또는 전부는 듀테륨, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물.

청구항 13

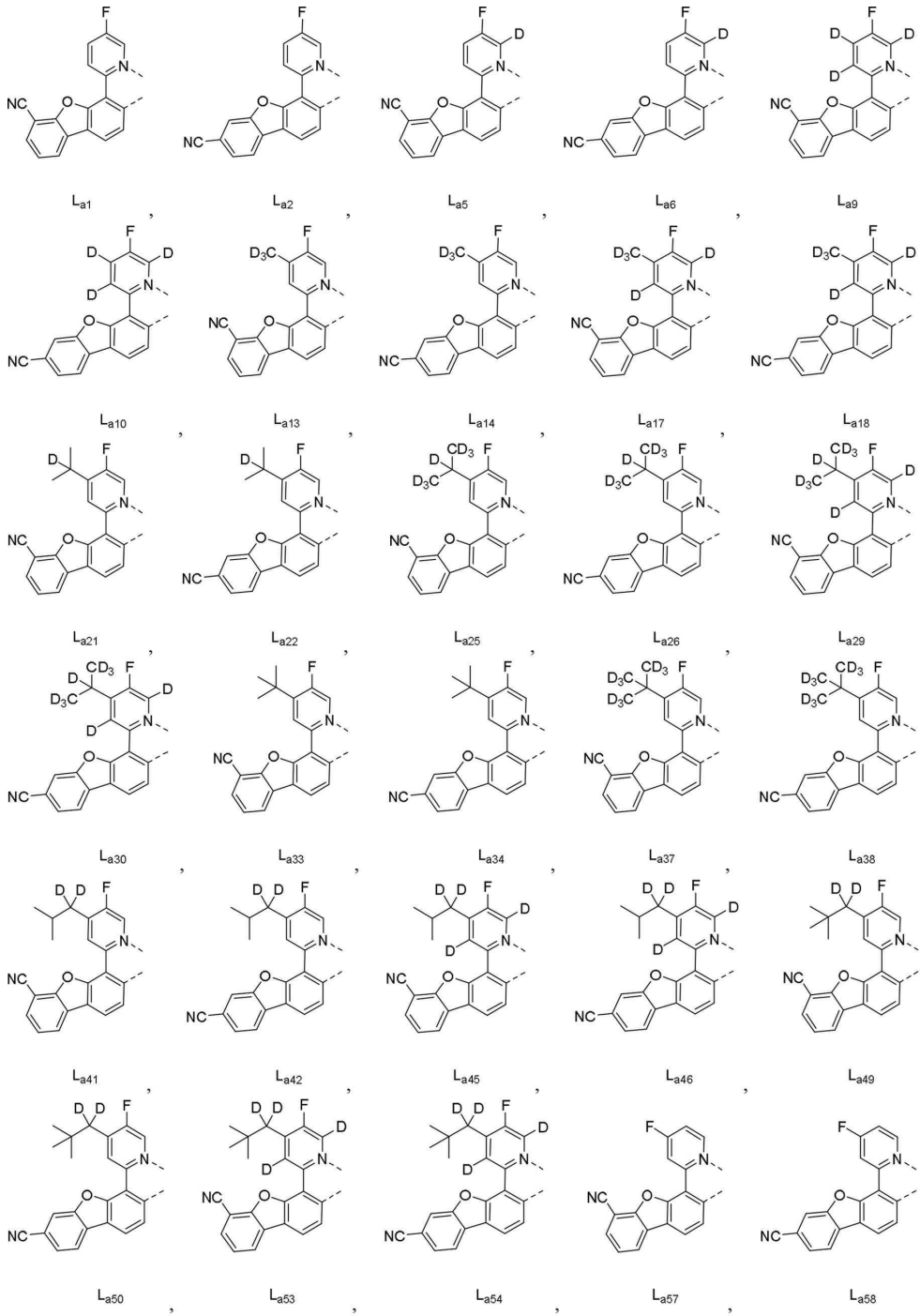
제 4 항에 있어서,

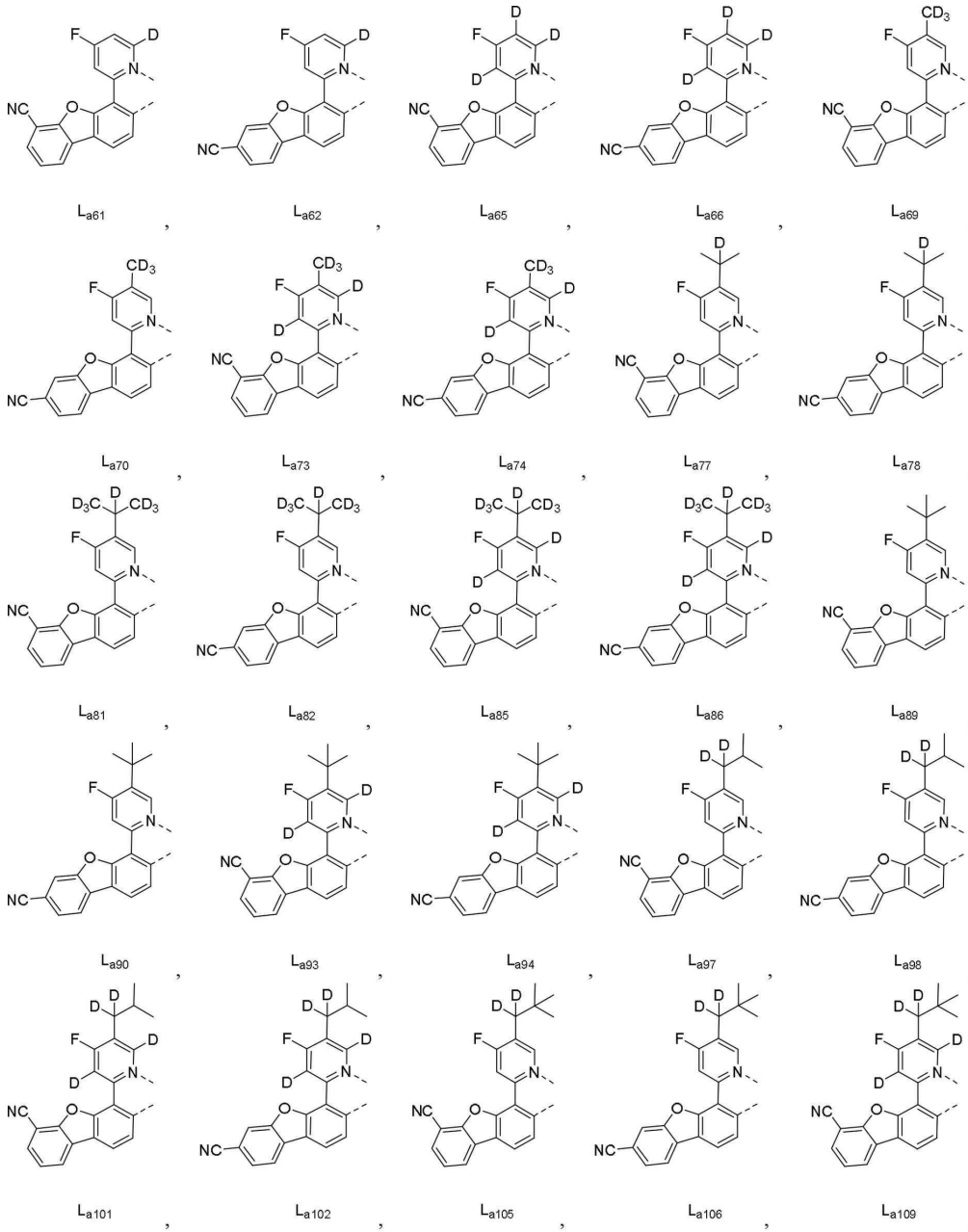
R_2 , R_3 , R_6 , R_7 중 적어도 하나 또는 적어도 두 개 또는 적어도 세 개 또는 전부는 듀테륨, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며; 선택적으로 상기 그룹 중의 수소는 듀테륨에 의해 부분적으로 또는 완전히 치환되는 금속 착물.

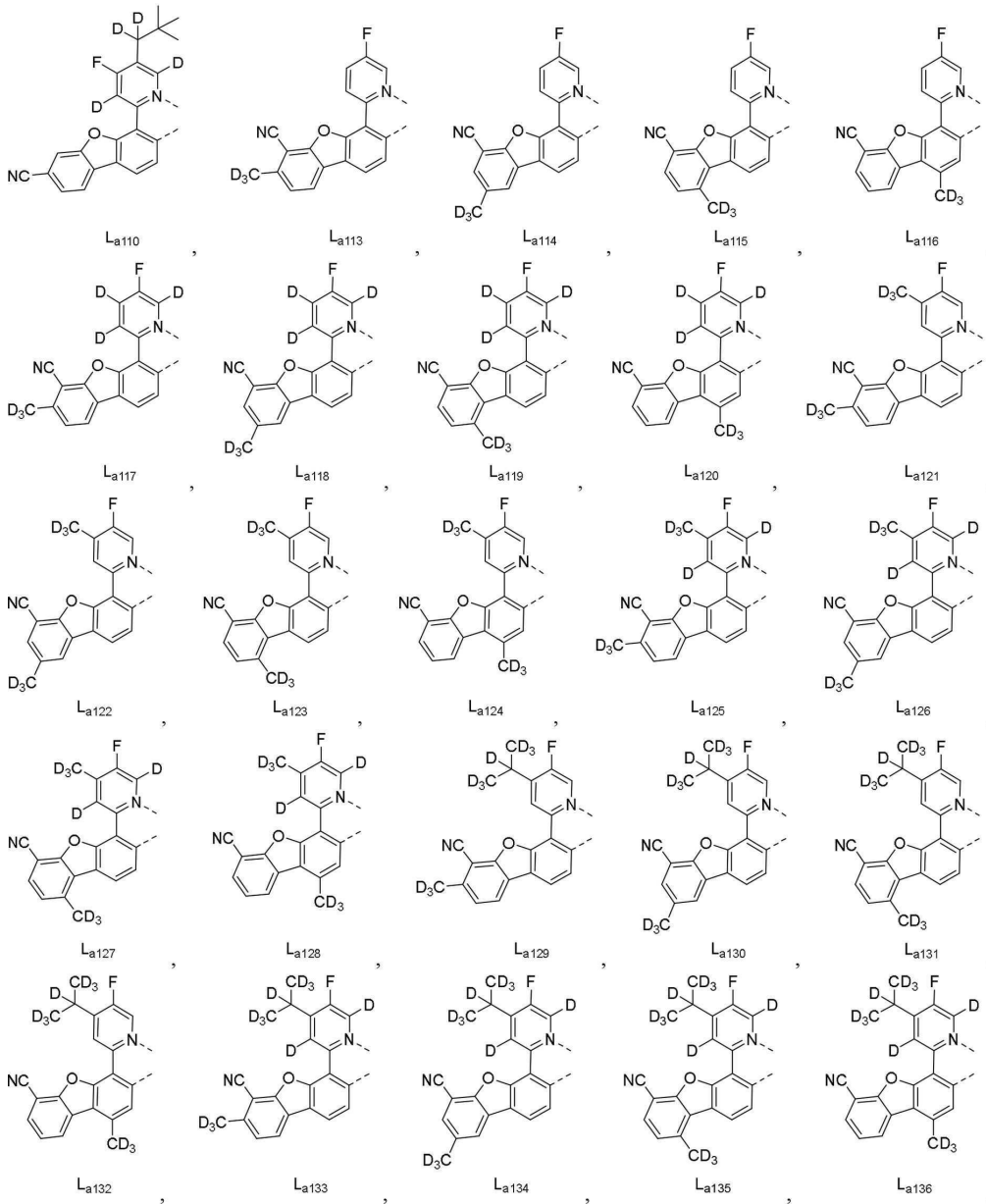
청구항 14

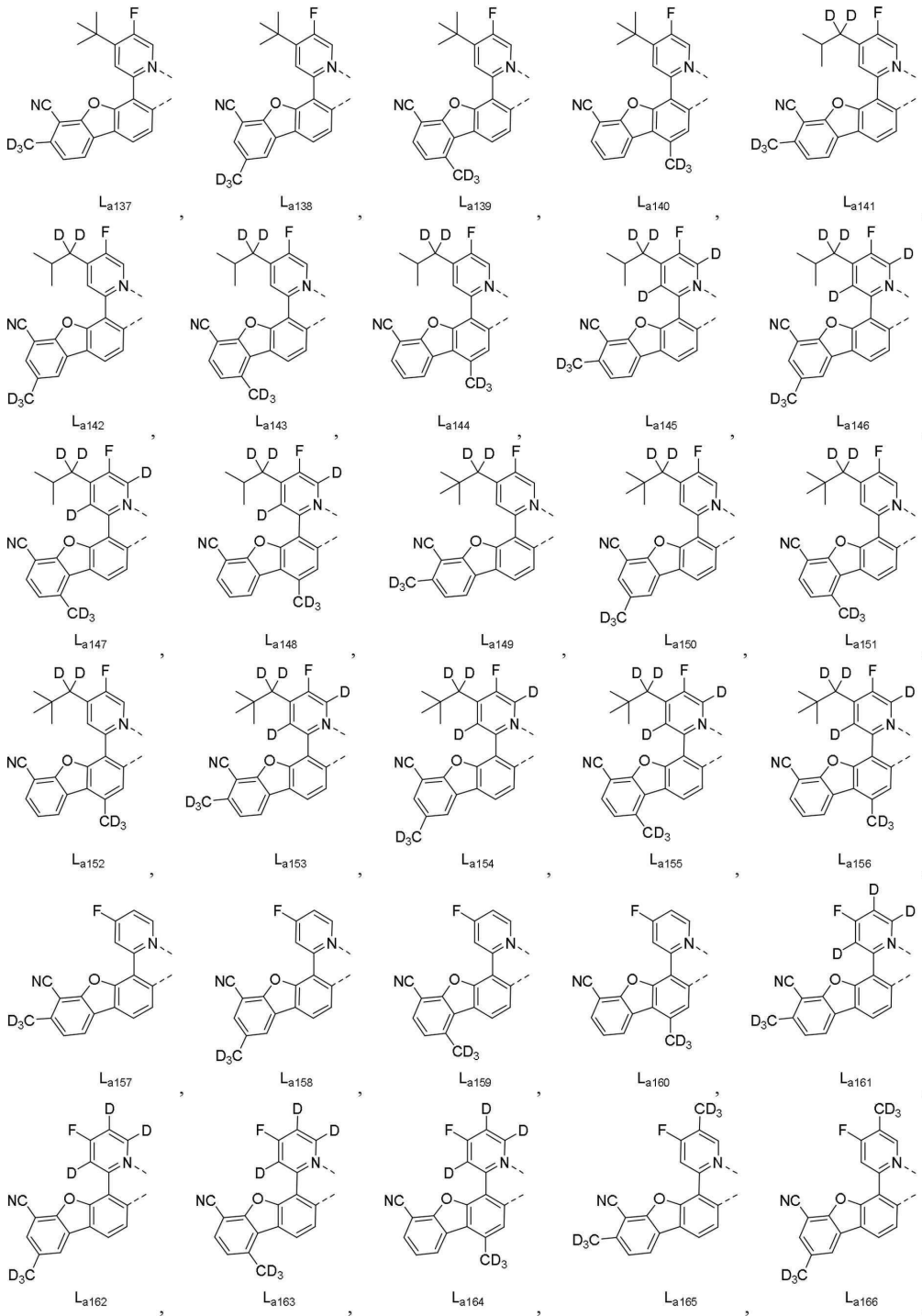
제 1 항에 있어서,

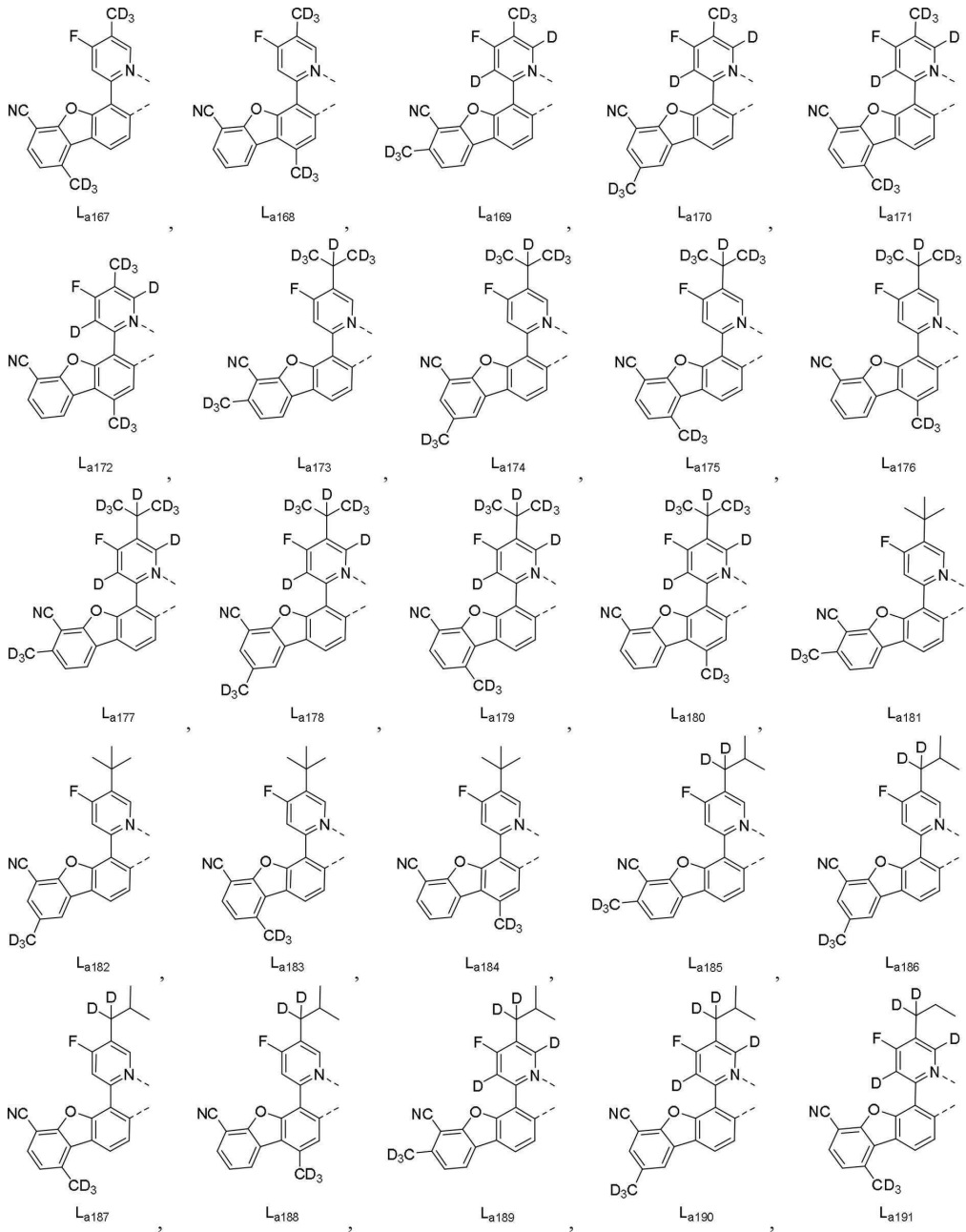
L_a는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 이하 구조로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물:

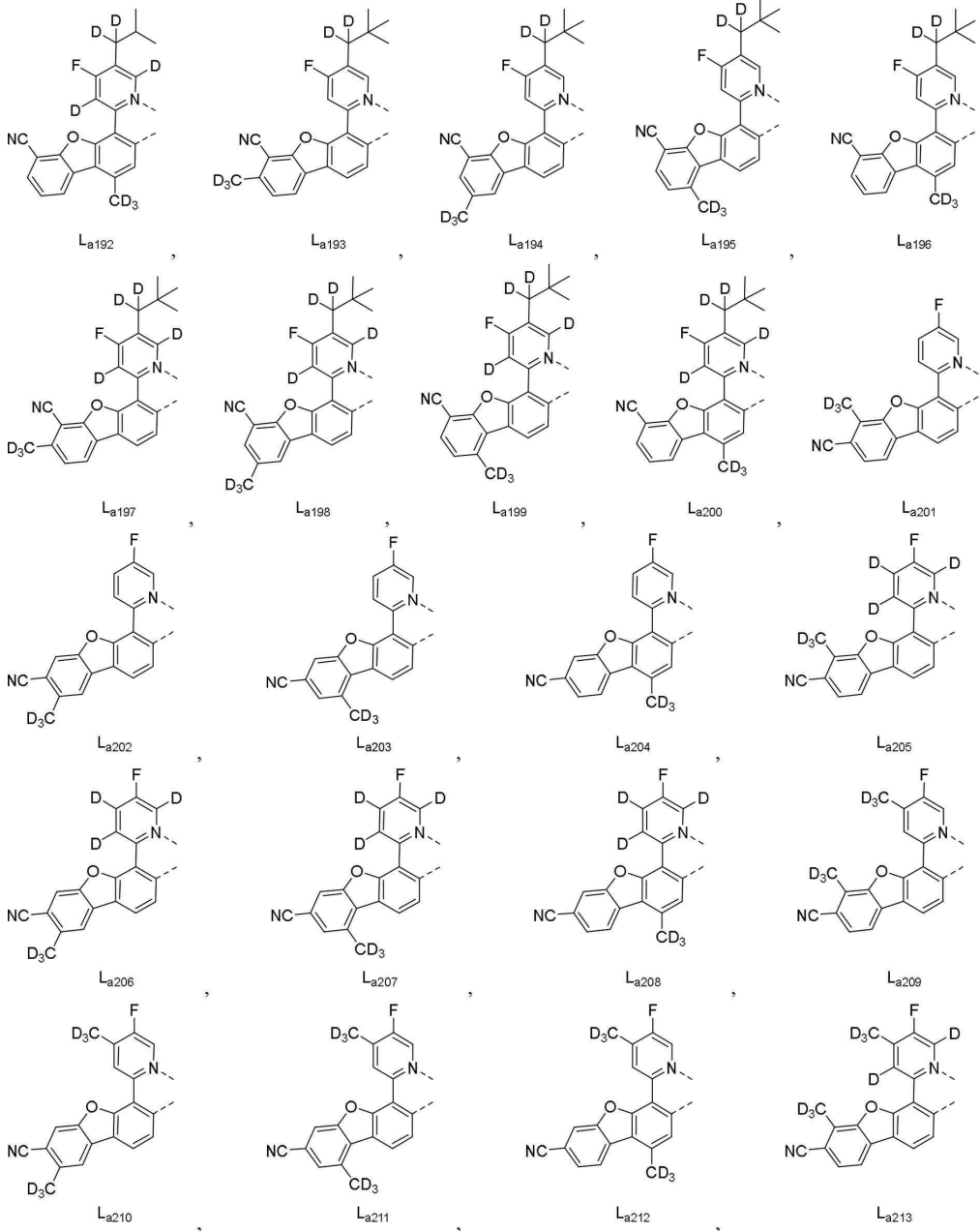


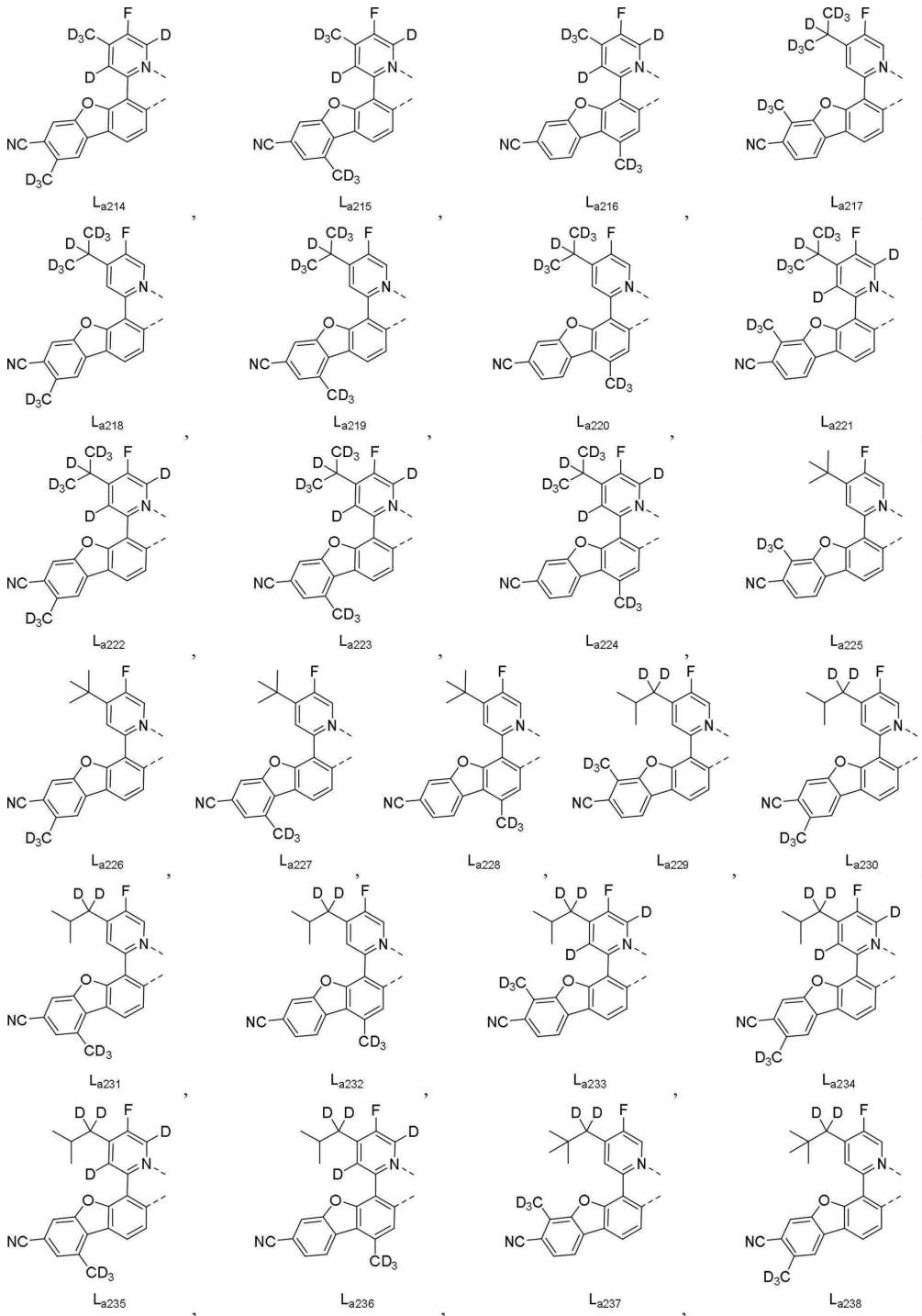


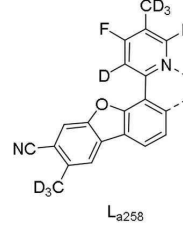
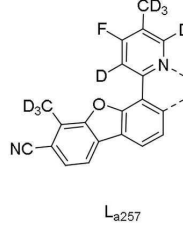
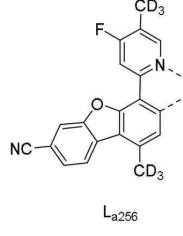
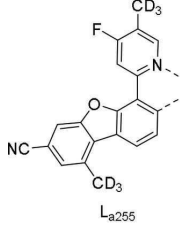
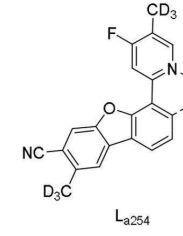
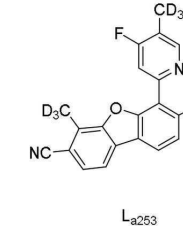
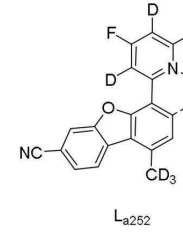
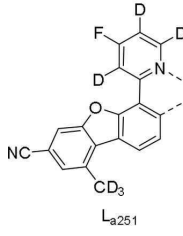
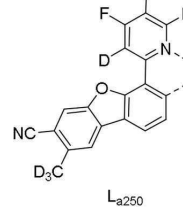
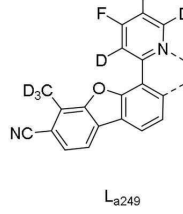
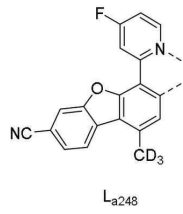
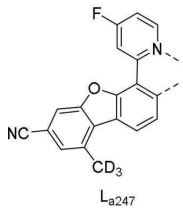
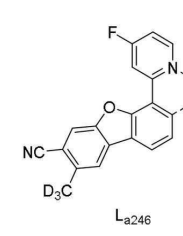
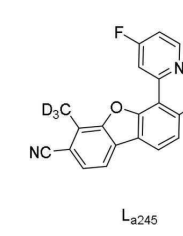
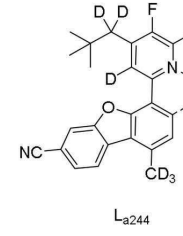
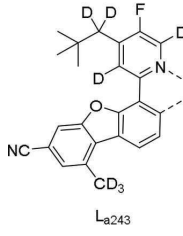
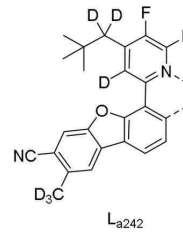
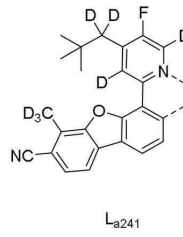
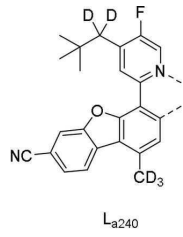
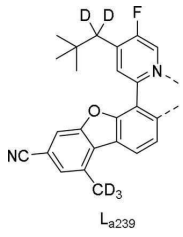


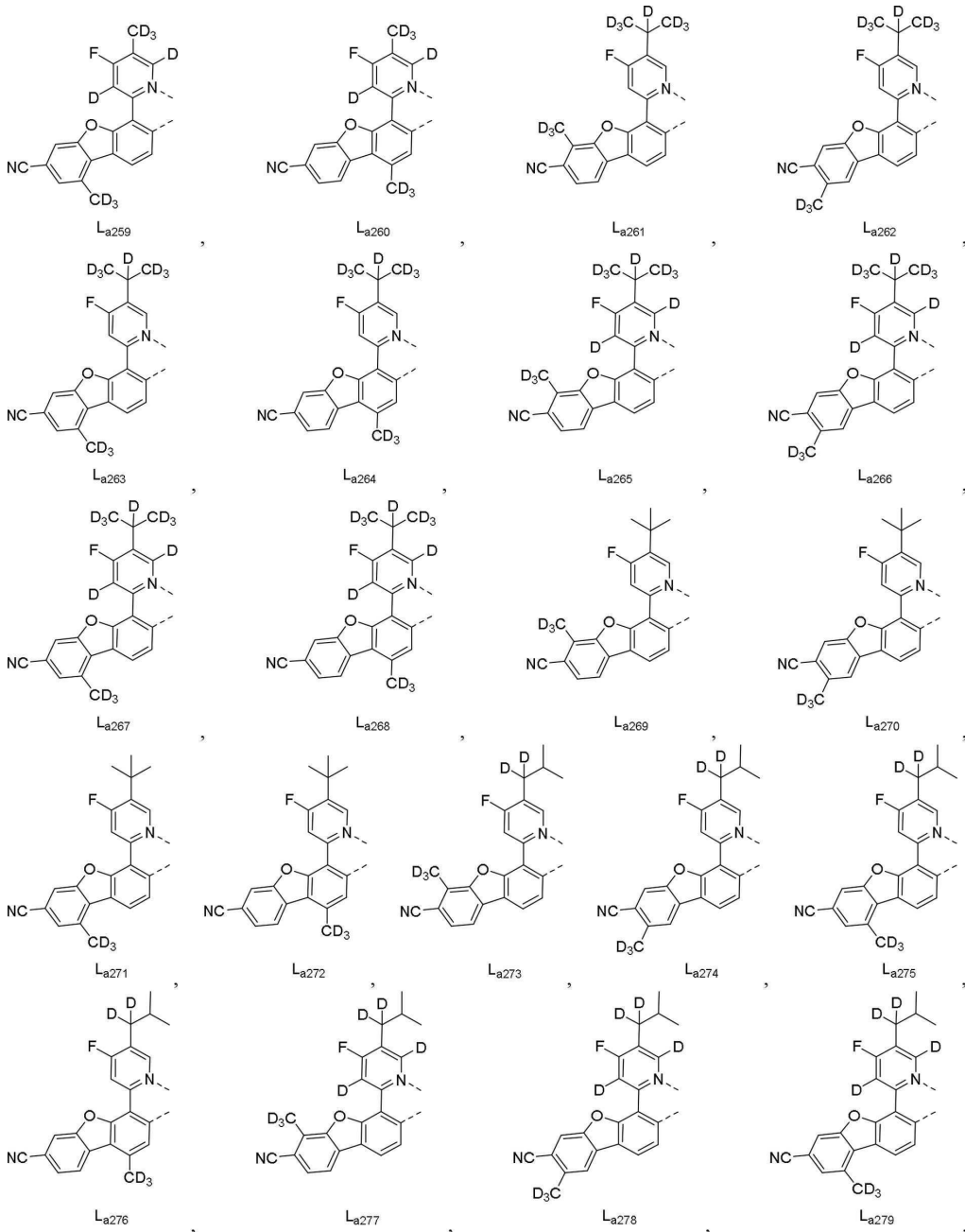


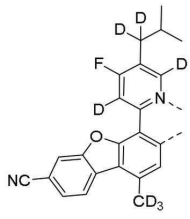




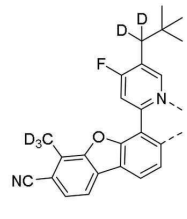




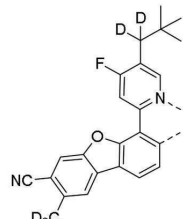




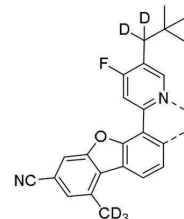
La280



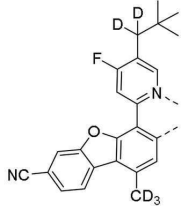
La281



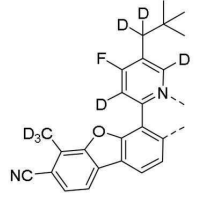
La282



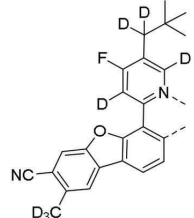
La283



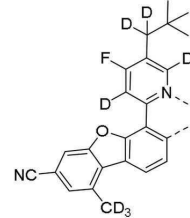
La284



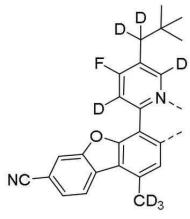
La285



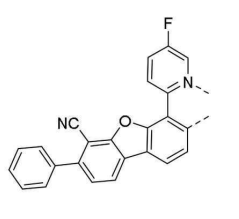
La286



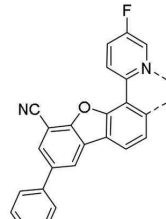
La287



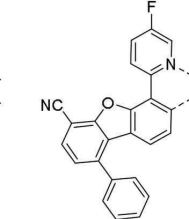
La288



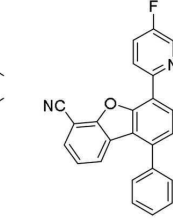
La381



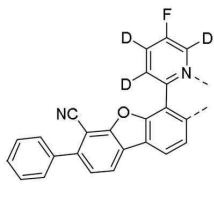
La382



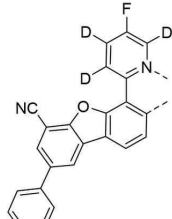
La383



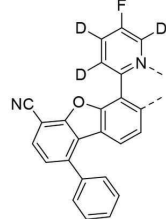
La384



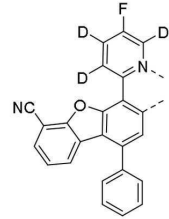
La385



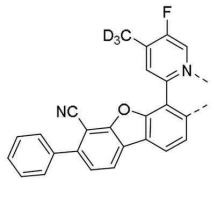
La386



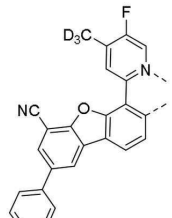
La387



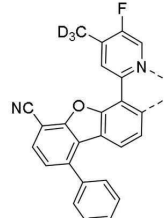
La388



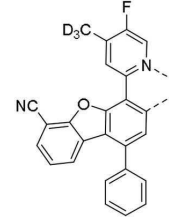
La389



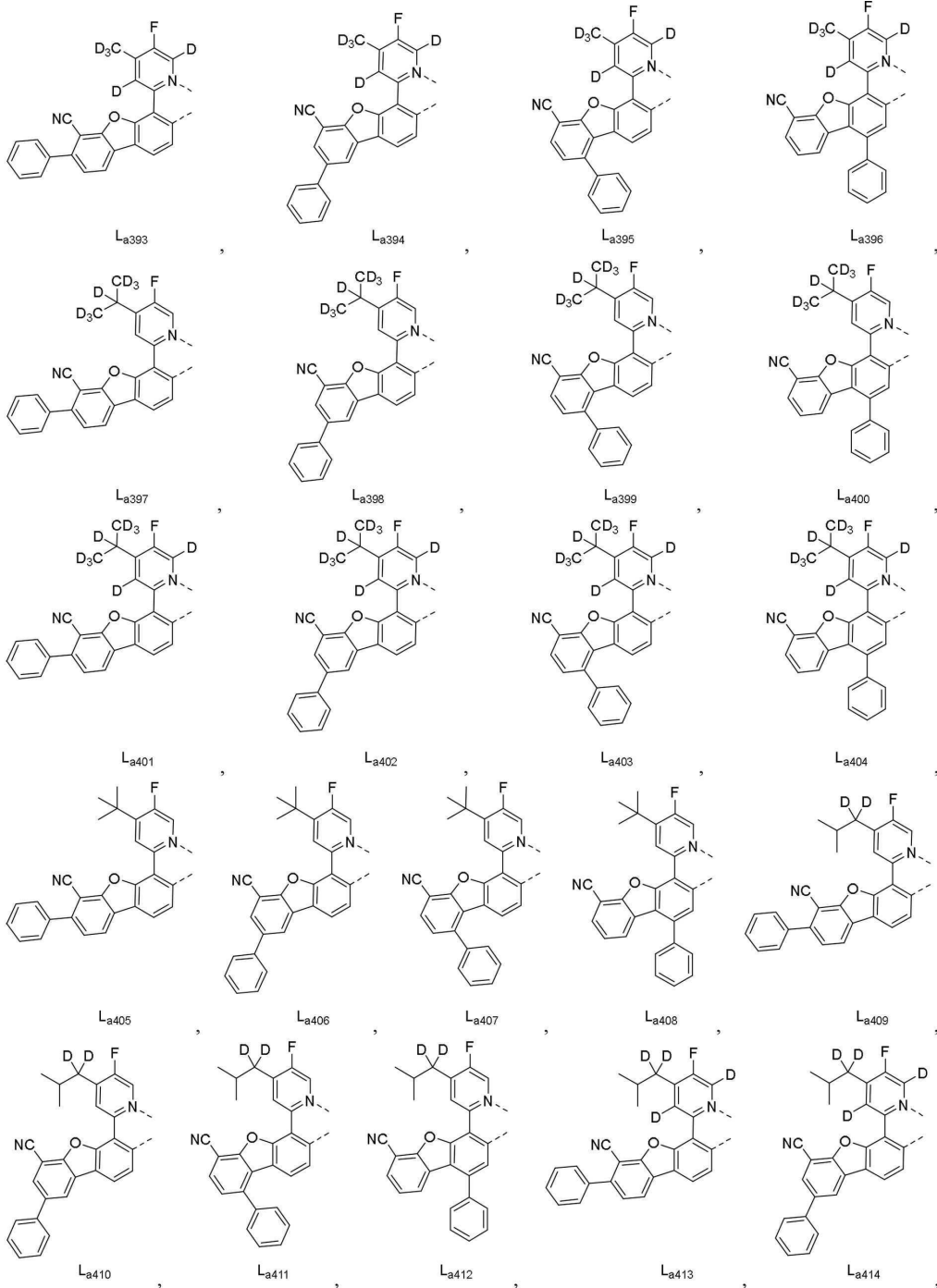
La390

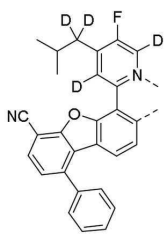


La391

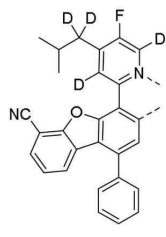


La392

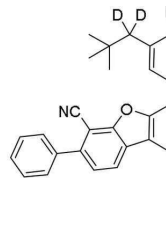




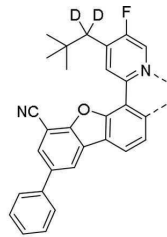
La415



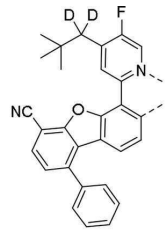
La416



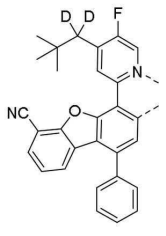
La417



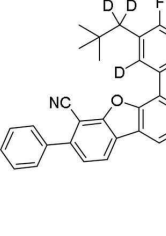
La418



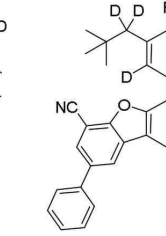
La419



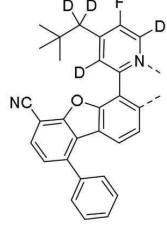
La420



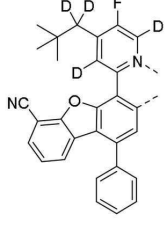
La421



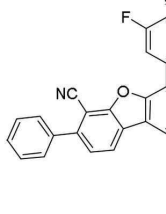
La422



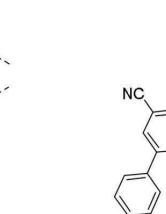
La423



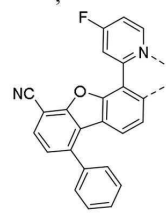
La424



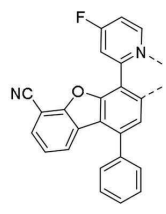
La425



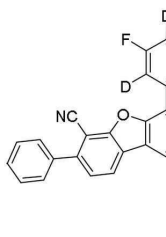
La426



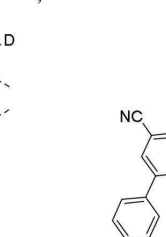
La427



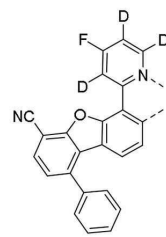
La428



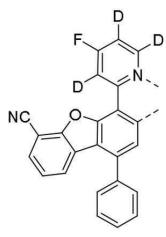
La429



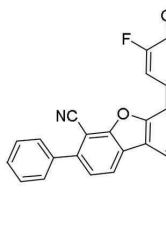
La430



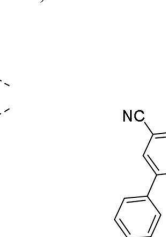
La431



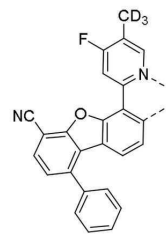
La432



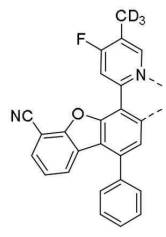
La433



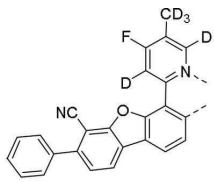
La434



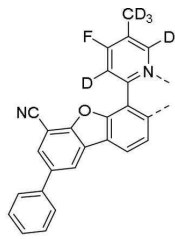
La435



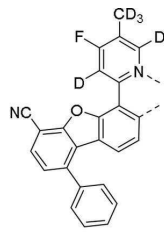
La436



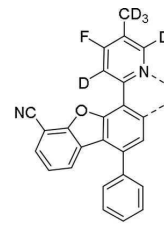
La437



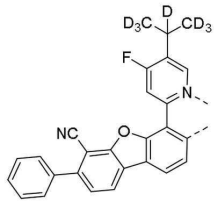
La438



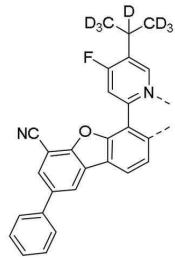
La439



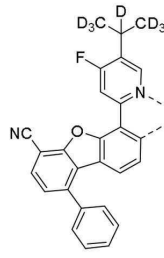
La440



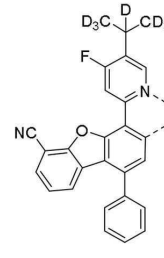
La441



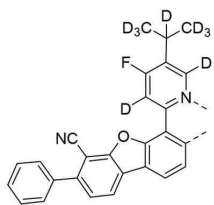
La442



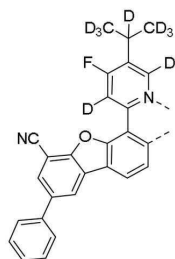
La443



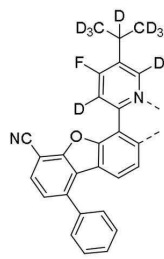
La444



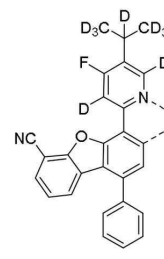
La445



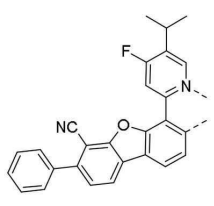
La446



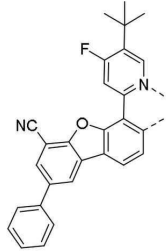
La447



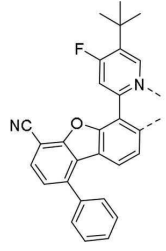
La448



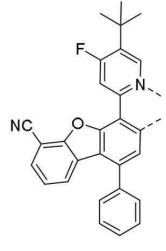
La449



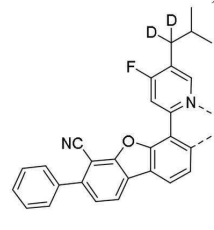
La450



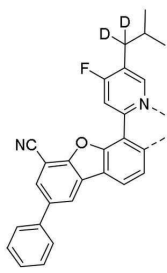
La451



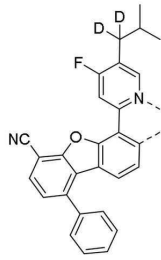
La452



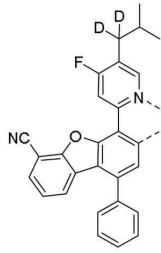
La453



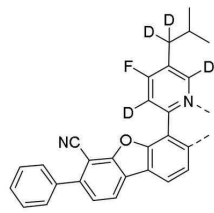
La454



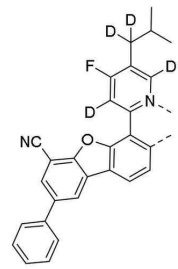
La455



La456



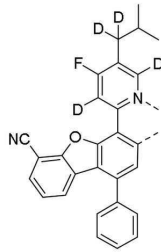
La457



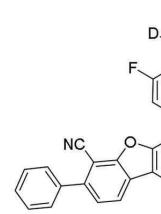
La458



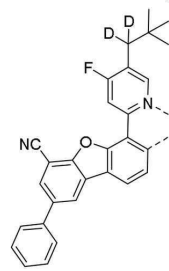
La459



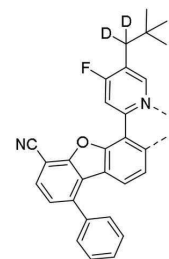
La460



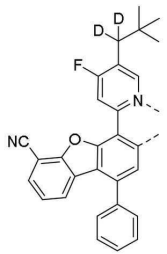
La461



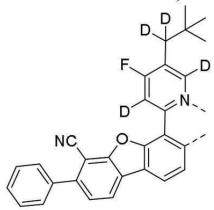
La462



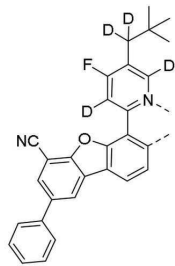
La463



La464



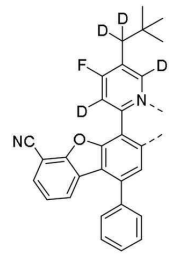
La465



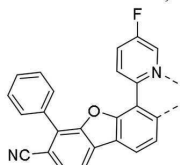
La466



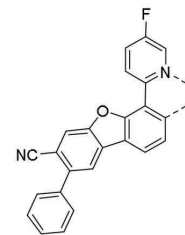
La467



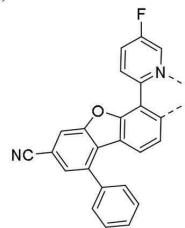
La468



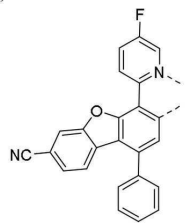
La469



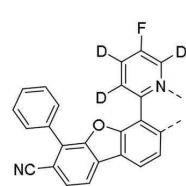
La470



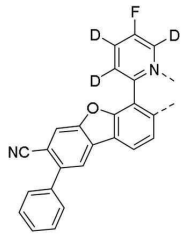
La471



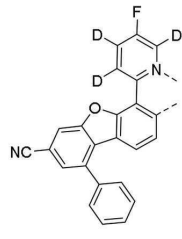
La472



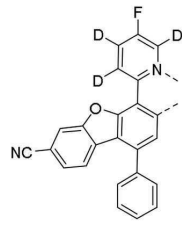
La473



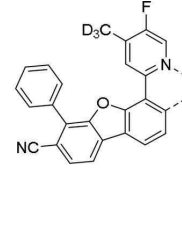
La474



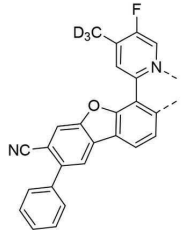
La475



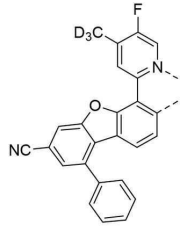
La476



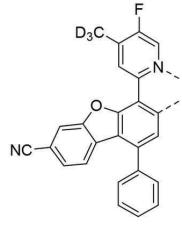
La477



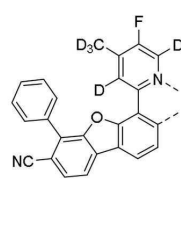
La478



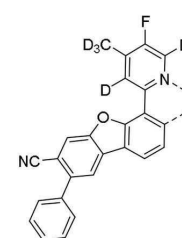
La479



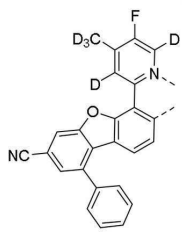
La480



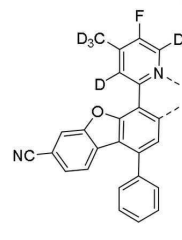
La481



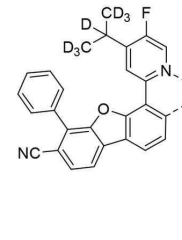
La482



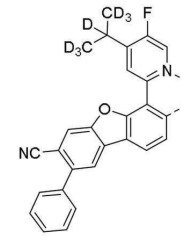
La483



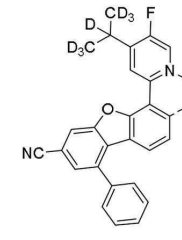
La484



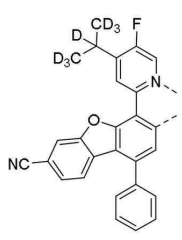
La485



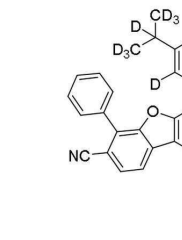
La486



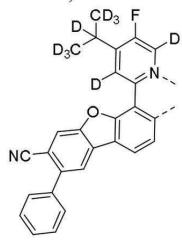
La487



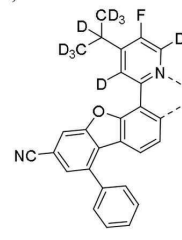
La488



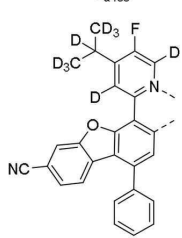
La489



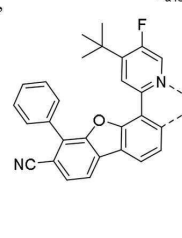
La490



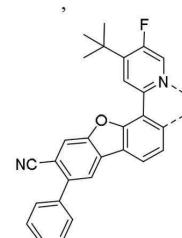
La491



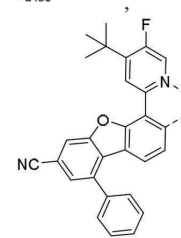
La492



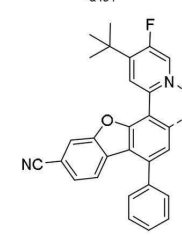
La493



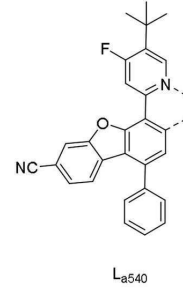
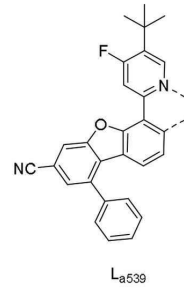
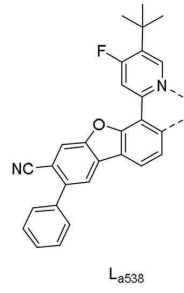
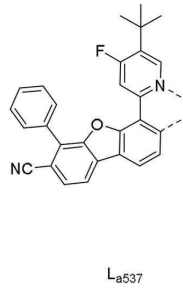
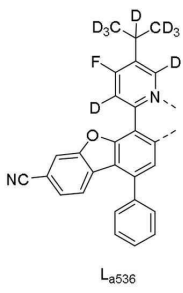
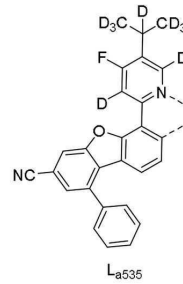
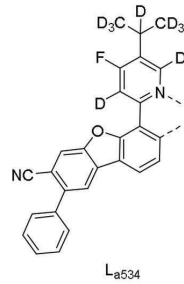
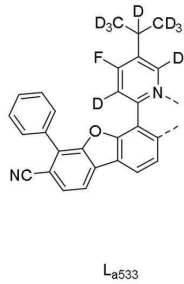
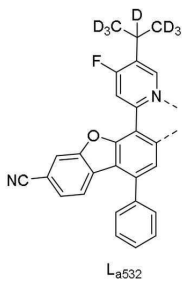
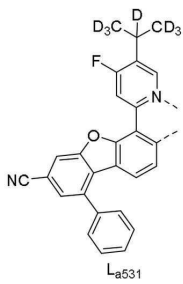
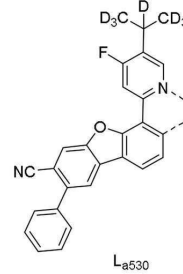
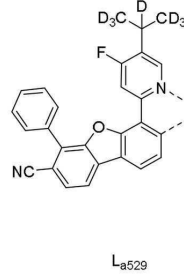
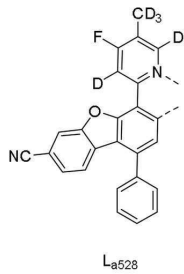
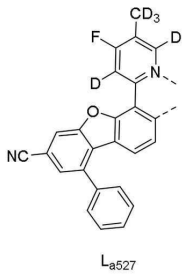
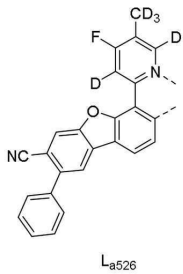
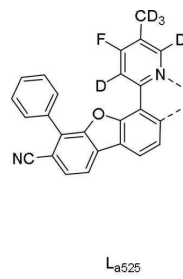
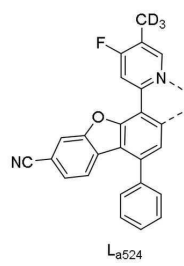
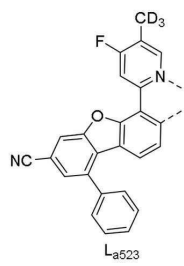
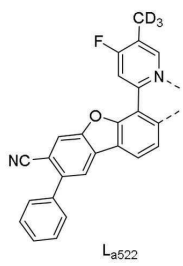
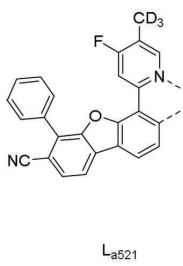
La494

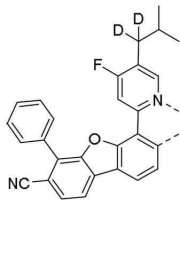


La495

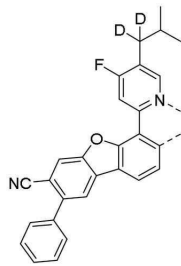


La496

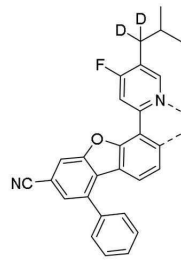




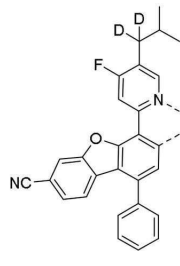
L-a541



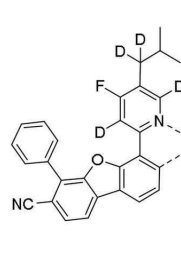
L-a542



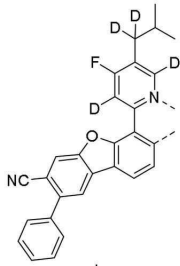
L-a543



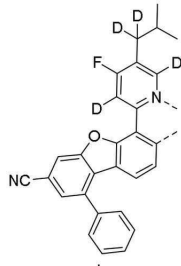
L-a544



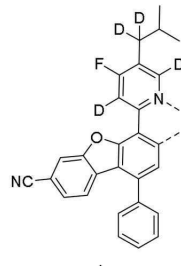
L-a545



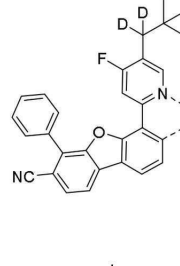
L-a546



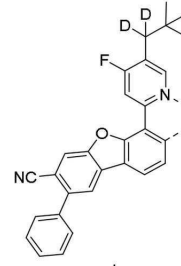
L-a547



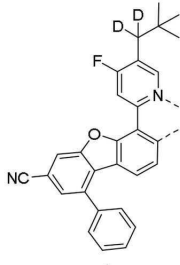
L-a548



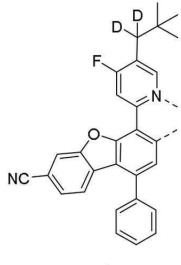
L-a549



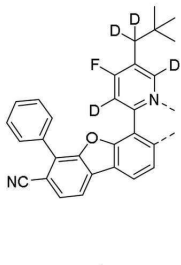
L-a550



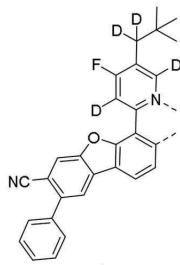
L-a551



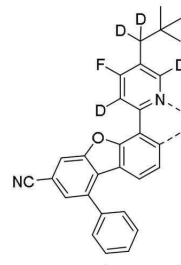
L-a552



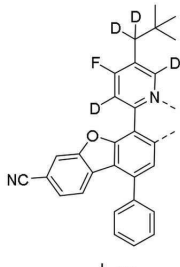
L-a553



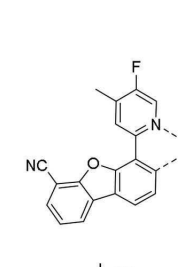
L-a554



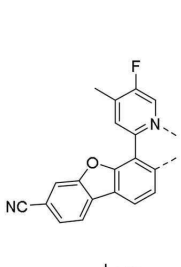
L-a555



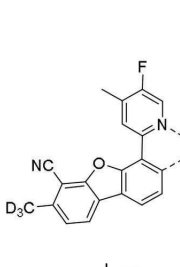
L-a556



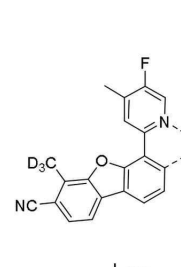
L-a711



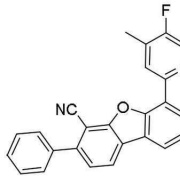
L-a712



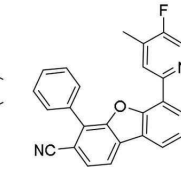
L-a715



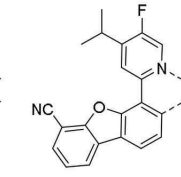
L-a716



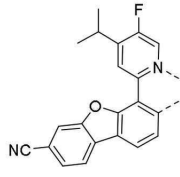
L-a719



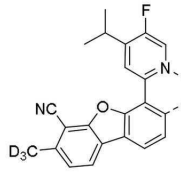
L-a720



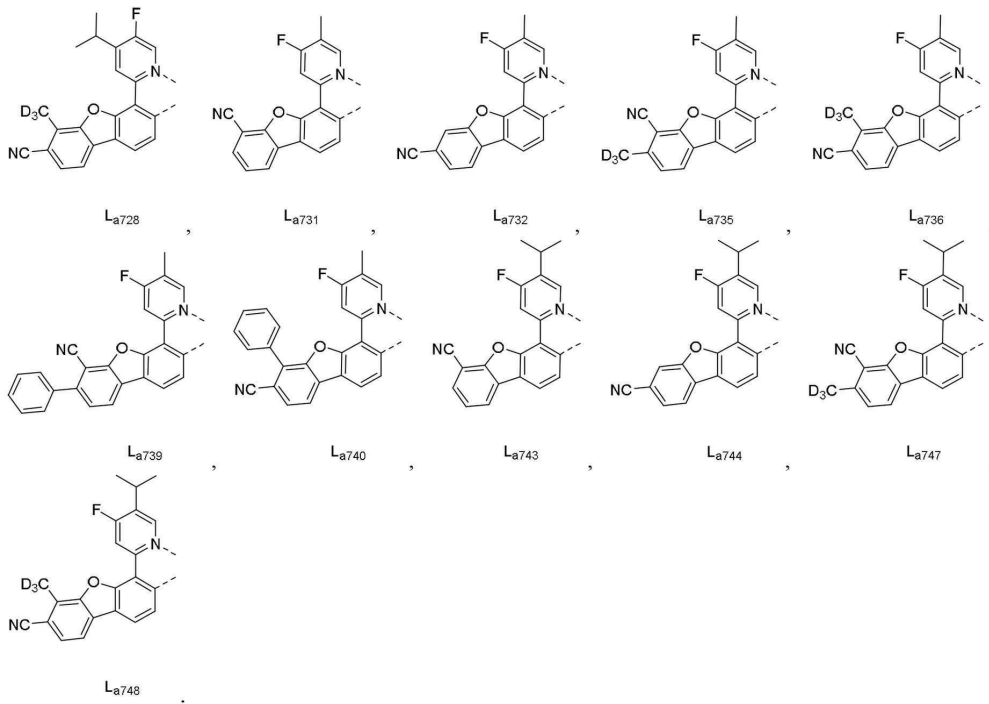
L-a723



L-a724



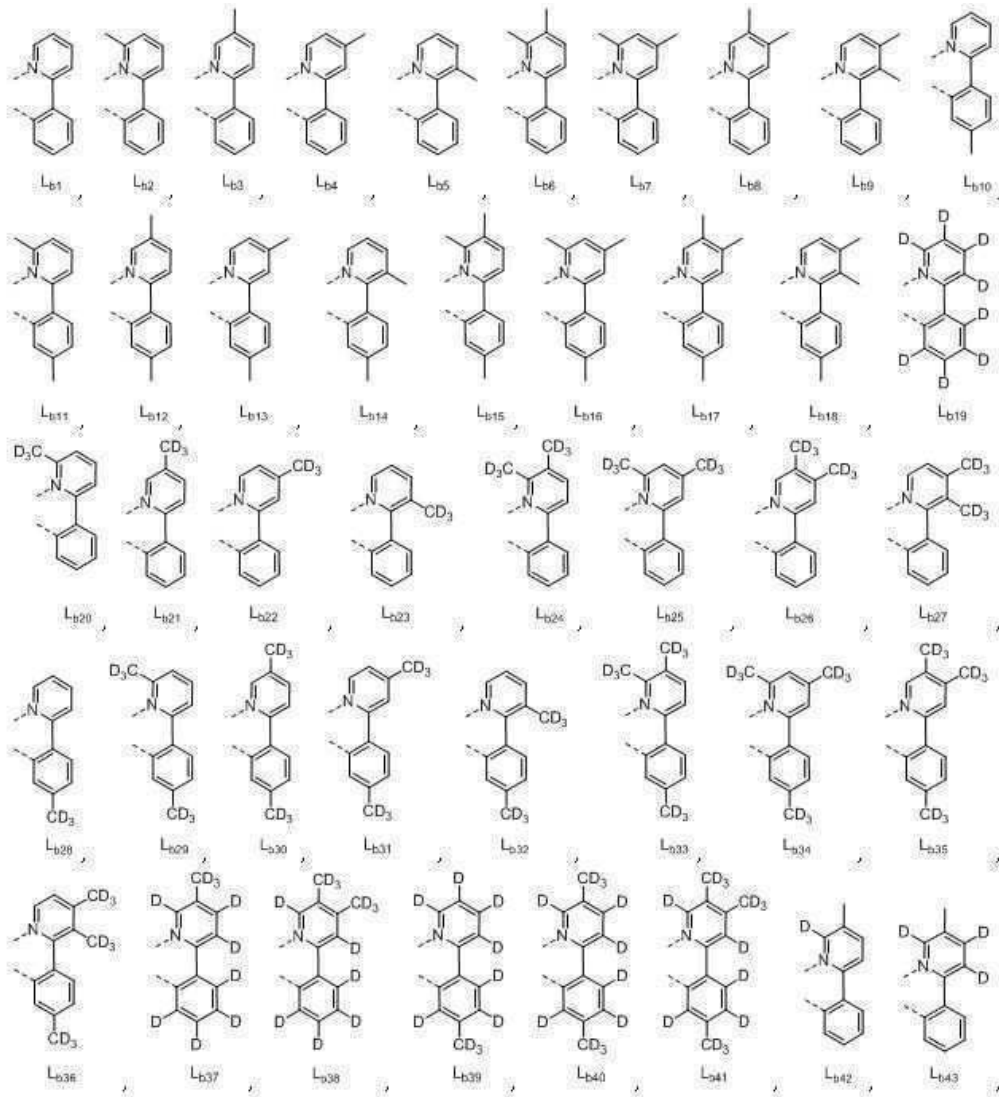
L-a727

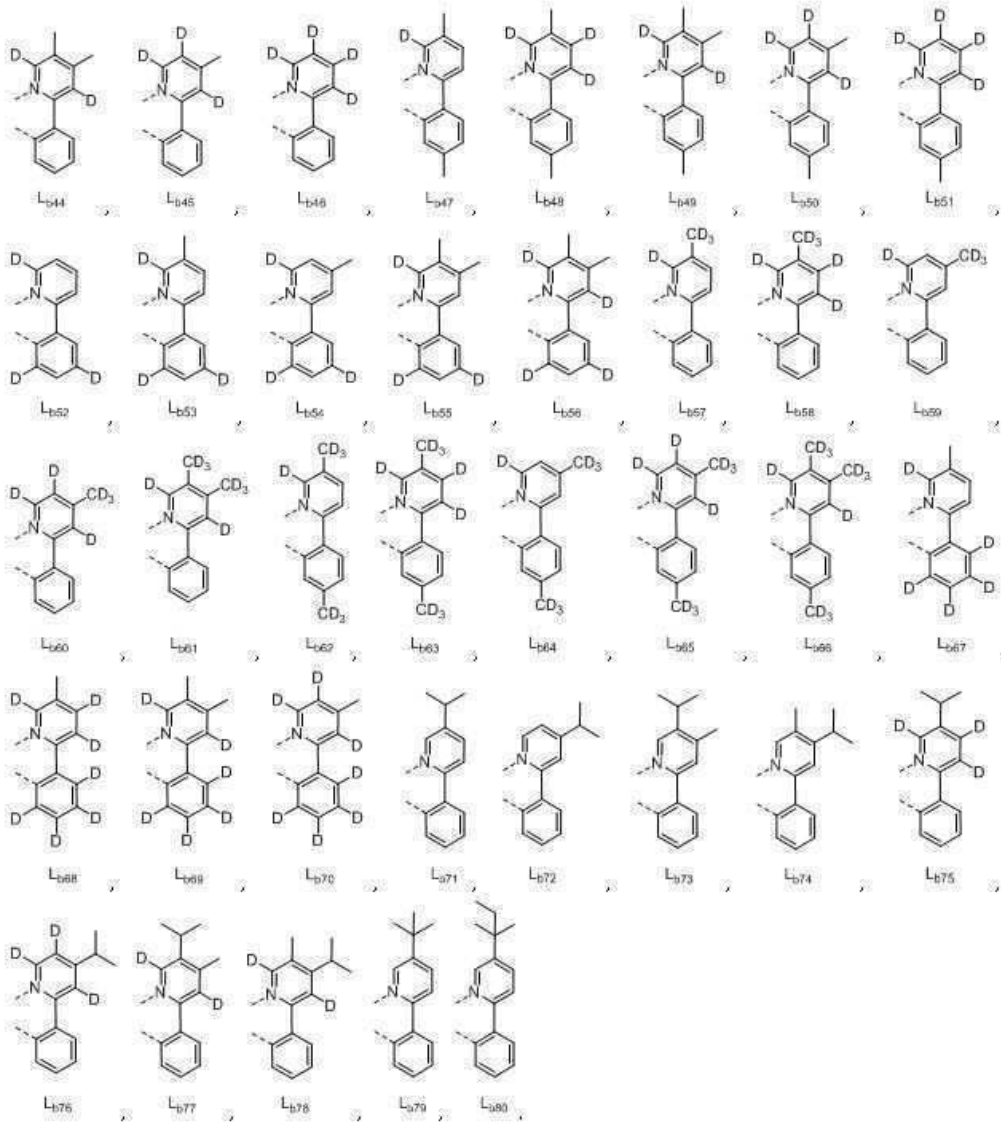


청구항 15

제 14 항에 있어서,

L_b는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 이하 구조로 이루어진 군에서 선택되는 금속 착물:





청구항 16

제 15 항에 있어서,

상기 금속 착물은 $\text{Ir}(L_a)(L_b)_2$ 의 구조로 나타내며, 여기서 L_a 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{a1} , L_{a2} , L_{a5} , L_{a6} , L_{a9} , L_{a10} , L_{a13} , L_{a14} , L_{a17} , L_{a18} , L_{a21} , L_{a22} , L_{a25} , L_{a26} , L_{a29} , L_{a30} , L_{a33} , L_{a34} , L_{a37} , L_{a38} , L_{a41} , L_{a42} , L_{a45} , L_{a46} , L_{a49} , L_{a50} , L_{a53} , L_{a54} , L_{a57} , L_{a58} , L_{a61} , L_{a62} , L_{a65} , L_{a66} , L_{a69} , L_{a70} , L_{a73} , L_{a74} , L_{a77} , L_{a78} , L_{a81} , L_{a82} , L_{a85} , L_{a86} , L_{a89} , L_{a90} , L_{a93} , L_{a94} , L_{a97} , L_{a98} , L_{a101} , L_{a102} , L_{a105} , L_{a106} , L_{a109} , L_{a110} , L_{a113} 내지 L_{a288} , L_{a381} 내지 L_{a556} , L_{a711} , L_{a712} , L_{a715} , L_{a716} , L_{a719} , L_{a720} , L_{a723} , L_{a724} , L_{a727} , L_{a728} , L_{a731} , L_{a732} , L_{a735} , L_{a736} , L_{a739} , L_{a740} , L_{a743} , L_{a744} , L_{a747} , L_{a748} 으로 이루어진 군 중 임의의 1종에서 선택되며, L_b 는 L_{b1} 내지 L_{b80} 으로 이루어진 군 중의 임의의 2종에서 선택되는 금속 착물.

청구항 17

제 15 항에 있어서,

금속 착물은 금속 착물 1 내지 금속 착물 24, 금속 착물 26 내지 금속 착물 54, 금속 착물 56 내지 금속 착물 84, 금속 착물 86 내지 금속 착물 114, 금속 착물 116 내지 금속 착물 144, 금속 착물 146 내지 금속 착물 174, 금속 착물 176 내지 금속 착물 204, 금속 착물 206 내지 금속 착물 234, 금속 착물 236 내지 금속 착물 264, 금속 착물 266 내지 금속 착물 294, 금속 착물 296 내지 금속 착물 324, 금속 착물 326 내지 금속 착물 354, 금속

착물 356 내지 금속 착물 384, 금속 착물 386 내지 금속 착물 390으로 이루어진 군에서 선택되며, 그 중 금속 착물 1 내지 금속 착물 24, 금속 착물 26 내지 금속 착물 54, 금속 착물 56 내지 금속 착물 84, 금속 착물 86 내지 금속 착물 114, 금속 착물 116 내지 금속 착물 144, 금속 착물 146 내지 금속 착물 174, 금속 착물 176 내지 금속 착물 204, 금속 착물 206 내지 금속 착물 234, 금속 착물 236 내지 금속 착물 264, 금속 착물 266 내지 금속 착물 294, 금속 착물 296 내지 금속 착물 324, 금속 착물 326 내지 금속 착물 354, 금속 착물 356 내지 금속 착물 384, 금속 착물 386 내지 금속 착물 390은 $IrL_a(L_b)_2$ 의 구조로 나타내며, 여기서 L_b 는 동일하고, 여기서 L_a 및 L_b 는 각각 아래 표에서 나타내는 구조에 대응되는 금속 착물:

금속 착물	L_a	L_b	금속 착물	L_a	L_b	금속 착물	L_a	L_b
1	L_{a1}	L_{b1}	2	L_{a2}	L_{b1}	3	L_{a13}	L_{b1}
4	L_{a14}	L_{b1}	5	L_{a17}	L_{b1}	6	L_{a18}	L_{b1}
7	L_{a25}	L_{b1}	8	L_{a26}	L_{b1}	9	L_{a57}	L_{b1}
10	L_{a58}	L_{b1}	11	L_{a65}	L_{b1}	12	L_{a66}	L_{b1}
13	L_{a69}	L_{b1}	14	L_{a70}	L_{b1}	15	L_{a73}	L_{b1}
16	L_{a74}	L_{b1}	17	L_{a81}	L_{b1}	18	L_{a82}	L_{b1}
19	L_{a121}	L_{b1}	20	L_{a129}	L_{b1}	21	L_{a165}	L_{b1}
22	L_{a209}	L_{b1}	23	L_{a210}	L_{b1}	24	L_{a253}	L_{b1}
			26	L_{a433}	L_{b1}	27	L_{a477}	L_{b1}
28	L_{a481}	L_{b1}	29	L_{a521}	L_{b1}	30	L_{a525}	L_{b1}
31	L_{a1}	L_{b3}	32	L_{a2}	L_{b3}	33	L_{a13}	L_{b3}
34	L_{a14}	L_{b3}	35	L_{a17}	L_{b3}	36	L_{a18}	L_{b3}
37	L_{a25}	L_{b3}	38	L_{a26}	L_{b3}	39	L_{a57}	L_{b3}
40	L_{a58}	L_{b3}	41	L_{a65}	L_{b3}	42	L_{a66}	L_{b3}
43	L_{a69}	L_{b3}	44	L_{a70}	L_{b3}	45	L_{a73}	L_{b3}
46	L_{a74}	L_{b3}	47	L_{a81}	L_{b3}	48	L_{a82}	L_{b3}
49	L_{a121}	L_{b3}	50	L_{a129}	L_{b3}	51	L_{a165}	L_{b3}
52	L_{a209}	L_{b3}	53	L_{a210}	L_{b3}	54	L_{a253}	L_{b3}
			56	L_{a433}	L_{b3}	57	L_{a477}	L_{b3}
58	L_{a481}	L_{b3}	59	L_{a521}	L_{b3}	60	L_{a525}	L_{b3}
61	L_{a1}	L_{b4}	62	L_{a2}	L_{b4}	63	L_{a13}	L_{b4}
64	L_{a14}	L_{b4}	65	L_{a17}	L_{b4}	66	L_{a18}	L_{b4}
67	L_{a25}	L_{b4}	68	L_{a26}	L_{b4}	69	L_{a57}	L_{b4}
70	L_{a58}	L_{b4}	71	L_{a65}	L_{b4}	72	L_{a66}	L_{b4}
73	L_{a69}	L_{b4}	74	L_{a70}	L_{b4}	75	L_{a73}	L_{b4}
76	L_{a74}	L_{b4}	77	L_{a81}	L_{b4}	78	L_{a82}	L_{b4}
79	L_{a121}	L_{b4}	80	L_{a129}	L_{b4}	81	L_{a165}	L_{b4}
82	L_{a209}	L_{b4}	83	L_{a210}	L_{b4}	84	L_{a253}	L_{b4}
			86	L_{a433}	L_{b4}	87	L_{a477}	L_{b4}
88	L_{a481}	L_{b4}	89	L_{a521}	L_{b4}	90	L_{a525}	L_{b4}
91	L_{a1}	L_{b8}	92	L_{a2}	L_{b8}	93	L_{a13}	L_{b8}
94	L_{a14}	L_{b8}	95	L_{a17}	L_{b8}	96	L_{a18}	L_{b8}
97	L_{a25}	L_{b8}	98	L_{a26}	L_{b8}	99	L_{a57}	L_{b8}
100	L_{a58}	L_{b8}	101	L_{a65}	L_{b8}	102	L_{a66}	L_{b8}

103	L _a 69	L _b 8	104	L _a 70	L _b 8	105	L _a 73	L _b 8
106	L _a 74	L _b 8	107	L _a 81	L _b 8	108	L _a 82	L _b 8
109	L _a 121	L _b 8	110	L _a 129	L _b 8	111	L _a 165	L _b 8
112	L _a 209	L _b 8	113	L _a 210	L _b 8	114	L _a 253	L _b 8
			116	L _a 433	L _b 8	117	L _a 477	L _b 8
118	L _a 481	L _b 8	119	L _a 521	L _b 8	120	L _a 525	L _b 8
121	L _a 1	L _b 19	122	L _a 2	L _b 19	123	L _a 13	L _b 19
124	L _a 14	L _b 19	125	L _a 17	L _b 19	126	L _a 18	L _b 19
127	L _a 25	L _b 19	128	L _a 26	L _b 19	129	L _a 57	L _b 19
130	L _a 58	L _b 19	131	L _a 65	L _b 19	132	L _a 66	L _b 19
133	L _a 69	L _b 19	134	L _a 70	L _b 19	135	L _a 73	L _b 19
136	L _a 74	L _b 19	137	L _a 81	L _b 19	138	L _a 82	L _b 19
139	L _a 121	L _b 19	140	L _a 129	L _b 19	141	L _a 165	L _b 19
142	L _a 209	L _b 19	143	L _a 210	L _b 19	144	L _a 253	L _b 19
			146	L _a 433	L _b 19	147	L _a 477	L _b 19
148	L _a 481	L _b 19	149	L _a 521	L _b 19	150	L _a 525	L _b 19
151	L _a 1	L _b 21	152	L _a 2	L _b 21	153	L _a 13	L _b 21
154	L _a 14	L _b 21	155	L _a 17	L _b 21	156	L _a 18	L _b 21
157	L _a 25	L _b 21	158	L _a 26	L _b 21	159	L _a 57	L _b 21
160	L _a 58	L _b 21	161	L _a 65	L _b 21	162	L _a 66	L _b 21
163	L _a 69	L _b 21	164	L _a 70	L _b 21	165	L _a 73	L _b 21
166	L _a 74	L _b 21	167	L _a 81	L _b 21	168	L _a 82	L _b 21
169	L _a 121	L _b 21	170	L _a 129	L _b 21	171	L _a 165	L _b 21
172	L _a 209	L _b 21	173	L _a 210	L _b 21	174	L _a 253	L _b 21
			176	L _a 433	L _b 21	177	L _a 477	L _b 21
178	L _a 481	L _b 21	179	L _a 521	L _b 21	180	L _a 525	L _b 21
181	L _a 1	L _b 22	182	L _a 2	L _b 22	183	L _a 13	L _b 22
184	L _a 14	L _b 22	185	L _a 17	L _b 22	186	L _a 18	L _b 22
187	L _a 25	L _b 22	188	L _a 26	L _b 22	189	L _a 57	L _b 22
190	L _a 58	L _b 22	191	L _a 65	L _b 22	192	L _a 66	L _b 22
193	L _a 69	L _b 22	194	L _a 70	L _b 22	195	L _a 73	L _b 22
196	L _a 74	L _b 22	197	L _a 81	L _b 22	198	L _a 82	L _b 22
199	L _a 121	L _b 22	200	L _a 129	L _b 22	201	L _a 165	L _b 22
202	L _a 209	L _b 22	203	L _a 210	L _b 22	204	L _a 253	L _b 22
			206	L _a 433	L _b 22	207	L _a 477	L _b 22
208	L _a 481	L _b 22	209	L _a 521	L _b 22	210	L _a 525	L _b 22

211	L _{a1}	L _{b57}	212	L _{a2}	L _{b57}	213	L _{a13}	L _{b57}
214	L _{a14}	L _{b57}	215	L _{a17}	L _{b57}	216	L _{a18}	L _{b57}
217	L _{a25}	L _{b57}	218	L _{a26}	L _{b57}	219	L _{a57}	L _{b57}
220	L _{a58}	L _{b57}	221	L _{a65}	L _{b57}	222	L _{a66}	L _{b57}
223	L _{a69}	L _{b57}	224	L _{a70}	L _{b57}	225	L _{a73}	L _{b57}
226	L _{a74}	L _{b57}	227	L _{a81}	L _{b57}	228	L _{a82}	L _{b57}
229	L _{a121}	L _{b57}	230	L _{a129}	L _{b57}	231	L _{a165}	L _{b57}
232	L _{a209}	L _{b57}	233	L _{a210}	L _{b57}	234	L _{a253}	L _{b57}
			236	L _{a433}	L _{b57}	237	L _{a477}	L _{b57}
238	L _{a481}	L _{b57}	239	L _{a521}	L _{b57}	240	L _{a525}	L _{b57}
241	L _{a1}	L _{b58}	242	L _{a2}	L _{b58}	243	L _{a13}	L _{b58}
244	L _{a14}	L _{b58}	245	L _{a17}	L _{b58}	246	L _{a18}	L _{b58}
247	L _{a25}	L _{b58}	248	L _{a26}	L _{b58}	249	L _{a57}	L _{b58}
250	L _{a58}	L _{b58}	251	L _{a65}	L _{b58}	252	L _{a66}	L _{b58}
253	L _{a69}	L _{b58}	254	L _{a70}	L _{b58}	255	L _{a73}	L _{b58}
256	L _{a74}	L _{b58}	257	L _{a81}	L _{b58}	258	L _{a82}	L _{b58}
259	L _{a121}	L _{b58}	260	L _{a129}	L _{b58}	261	L _{a165}	L _{b58}
262	L _{a209}	L _{b58}	263	L _{a210}	L _{b58}	264	L _{a253}	L _{b58}
			266	L _{a433}	L _{b58}	267	L _{a477}	L _{b58}
268	L _{a481}	L _{b58}	269	L _{a521}	L _{b58}	270	L _{a525}	L _{b58}
271	L _{a1}	L _{b459}	272	L _{a2}	L _{b459}	273	L _{a13}	L _{b459}
274	L _{a14}	L _{b459}	275	L _{a17}	L _{b459}	276	L _{a18}	L _{b459}
277	L _{a25}	L _{b459}	278	L _{a26}	L _{b459}	279	L _{a57}	L _{b459}
280	L _{a58}	L _{b459}	281	L _{a65}	L _{b459}	282	L _{a66}	L _{b459}
283	L _{a69}	L _{b459}	284	L _{a70}	L _{b459}	285	L _{a73}	L _{b459}
286	L _{a74}	L _{b459}	287	L _{a81}	L _{b459}	288	L _{a82}	L _{b459}
289	L _{a121}	L _{b459}	290	L _{a129}	L _{b459}	291	L _{a165}	L _{b459}
292	L _{a209}	L _{b459}	293	L _{a210}	L _{b459}	294	L _{a253}	L _{b459}
			296	L _{a433}	L _{b459}	297	L _{a477}	L _{b459}
298	L _{a481}	L _{b459}	299	L _{a521}	L _{b459}	300	L _{a525}	L _{b459}
301	L _{a1}	L _{b60}	302	L _{a2}	L _{b60}	303	L _{a13}	L _{b60}
304	L _{a14}	L _{b60}	305	L _{a17}	L _{b60}	306	L _{a18}	L _{b60}
307	L _{a25}	L _{b60}	308	L _{a26}	L _{b60}	309	L _{a57}	L _{b60}
310	L _{a58}	L _{b60}	311	L _{a65}	L _{b60}	312	L _{a66}	L _{b60}
313	L _{a69}	L _{b60}	314	L _{a70}	L _{b60}	315	L _{a73}	L _{b60}
316	L _{a74}	L _{b60}	317	L _{a81}	L _{b60}	318	L _{a82}	L _{b60}

319	L _a 121	L _b 60	320	L _a 129	L _b 60	321	L _a 165	L _b 60
322	L _a 209	L _b 60	323	L _a 210	L _b 60	324	L _a 253	L _b 60
			326	L _a 433	L _b 60	327	L _a 477	L _b 60
328	L _a 481	L _b 60	329	L _a 521	L _b 60	330	L _a 525	L _b 60
331	L _a 1	L _b 61	332	L _a 2	L _b 61	333	L _a 13	L _b 61
334	L _a 14	L _b 61	335	L _a 17	L _b 61	336	L _a 18	L _b 61
337	L _a 25	L _b 61	338	L _a 26	L _b 61	339	L _a 57	L _b 61
340	L _a 58	L _b 61	341	L _a 65	L _b 61	342	L _a 66	L _b 61
343	L _a 69	L _b 61	344	L _a 70	L _b 61	345	L _a 73	L _b 61
346	L _a 74	L _b 61	347	L _a 81	L _b 61	348	L _a 82	L _b 61
349	L _a 121	L _b 61	350	L _a 129	L _b 61	351	L _a 165	L _b 61
352	L _a 209	L _b 61	353	L _a 210	L _b 61	354	L _a 253	L _b 61
			356	L _a 433	L _b 61	357	L _a 477	L _b 61
358	L _a 481	L _b 61	359	L _a 521	L _b 61	360	L _a 525	L _b 61
361	L _a 1	L _b 79	362	L _a 2	L _b 79	363	L _a 13	L _b 79
364	L _a 14	L _b 79	365	L _a 17	L _b 79	366	L _a 18	L _b 79
367	L _a 25	L _b 79	368	L _a 26	L _b 79	369	L _a 57	L _b 79
370	L _a 58	L _b 79	371	L _a 65	L _b 79	372	L _a 66	L _b 79
373	L _a 69	L _b 79	374	L _a 70	L _b 79	375	L _a 73	L _b 79
376	L _a 74	L _b 79	377	L _a 81	L _b 79	378	L _a 82	L _b 79
379	L _a 121	L _b 79	380	L _a 129	L _b 79	381	L _a 165	L _b 79
382	L _a 209	L _b 79	383	L _a 210	L _b 79	384	L _a 253	L _b 79
			386	L _a 433	L _b 79	387	L _a 477	L _b 79
388	L _a 481	L _b 79	389	L _a 521	L _b 79	390	L _a 525	L _b 79

청구항 18

양극,

음극, 및

양극과 음극 사이에 배치된 유기층을 포함하며, 상기 유기층의 적어도 한 층은 제 1 항 내지 제 17 항 중 어느 한 항에 따른 금속 착물을 포함하는 전계발광소자.

청구항 19

제 18 항에 있어서,

상기 금속 착물을 포함하는 상기 유기층은 발광층인 전계발광소자.

청구항 20

제 19 항에 있어서,

상기 발광층은 녹색광을 방출하는 전계발광소자.

청구항 21

제 19 항에 있어서,

상기 발광층은 적어도 1종의 제1 호스트 화합물을 포함하는 전계발광소자.

청구항 22

제 21 항에 있어서,

발광층은 적어도 두 종의 호스트 화합물을 더 포함하는 전계발광소자.

청구항 23

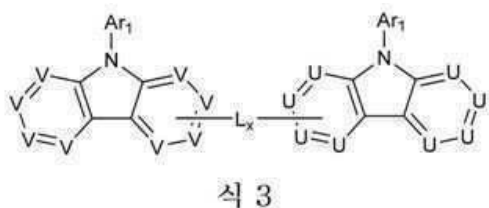
제 22 항에 있어서,

상기 호스트 화합물 중의 적어도 1종은 페닐기, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 카바졸기, 아자카바졸기, 인돌로카바졸기, 디벤조티오펜기, 아자디벤조티오펜기, 디벤조퓨란기, 아자디벤조퓨란기, 디벤조셀레노펜기, 트리페닐렌기, 아자트리페닐렌기, 플루오렌기, 실라플로오렌기(Silafluorene group), 나프탈렌기, 퀴놀린기, 이소퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 페난트렌기, 아자페난트렌기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 1종의 화학 그룹을 포함하는 전계발광소자.

청구항 24

제 21 항에 있어서,

제1 호스트 화합물은 식 3의 구조로 나타내며:



여기서,

L_x 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 단일 결합, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬렌기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합에서 선택되며;

V는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 C, CR_v 또는 N에서 선택되며; V 중 적어도 하나는 C이고, L_x 와 연결되며;

U는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 C, CR_u 또는 N에서 선택되며, U 중 적어도 하나는 C이고, L_x 와 연결되며;

R_v 및 R_u 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알케닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 카르복실산기, 시아노기, 이소시아노기, 히드록실기, 술파닐기, 포스포노기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;

Ar_1 은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합에서 선택되며;

인접한 치환기 R_v 및 R_u 는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며;

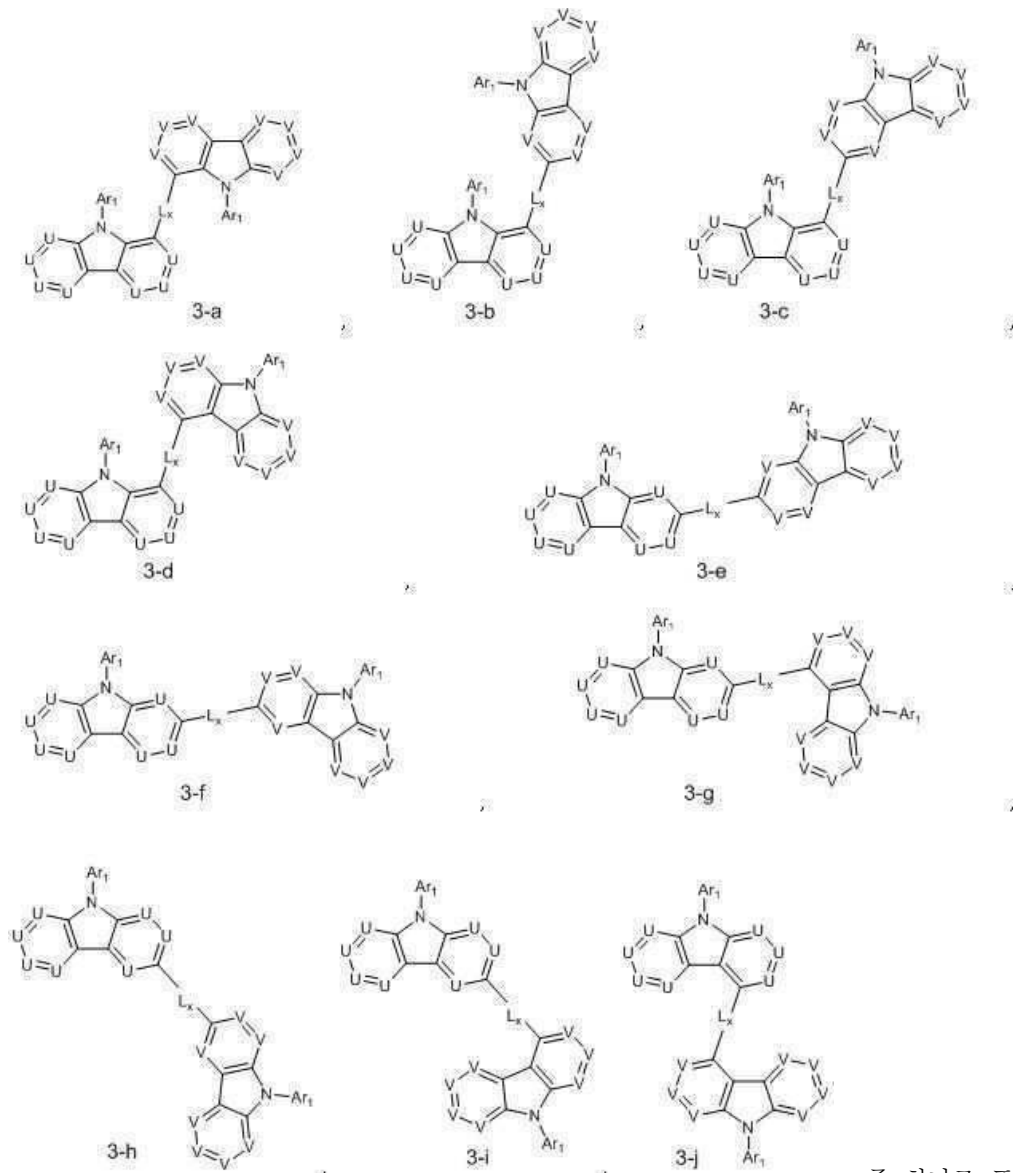
상기 치환된 알킬기, 치환된 시클로알킬기, 치환된 헤테로알킬기, 치환된 헤테로시클릭기, 치환된 아랄킬기, 치환된 알콕시기, 치환된 아릴옥시기, 치환된 알케닐기, 치환된 아릴기, 치환된 헤테로아릴기, 치환된 알킬실릴기, 치환된 아릴실릴기, 치환된 아미노기, 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로알킬기, 헤테로시클릭기, 아랄킬기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 및 아미노기 중의 임의의 하나의 그룹이, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는

비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자 수를 갖는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알케닐기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알키닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아미노기, 카르복실산기, 시아노기, 이소시아노기, 하이드록시기, 술폰닐기, 포스포노기 및 이들 조합에서 선택된 하나 또는 복수 개에 의해 치환될 수 있음을 의미하는 전계발광소자.

청구항 25

제 24 항에 있어서,

상기 제1 호스트 화합물은 식 3-a 내지 식 3-j로 표시된 구조:



중 하나로 표시된 구조를 구비하는

전계발광소자.

청구항 26

제 22 항에 있어서,

금속 착물은 상기 호스트 화합물에 도핑되어 있으며, 금속 착물의 중량은 발광층 총 중량의 1%~30%를 차지하는 전계발광소자.

청구항 27

제 1 항 내지 제 17 항 중 어느 한 항에 따른 금속 착물을 포함하는 조성물.

청구항 28

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전자소자에 사용되는 유기 전계발광소자와 같은 화합물에 관한 것이다. 특히, 식 1 구조의 L_a리간드를 포함하는 금속 착물, 및 해당 금속 착물을 포함하는 유기 전계발광소자와 화합물 조합에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 전자소자는, 유기 발광다이오드(OLEDs), 유기 전계효과트랜지스터(O-FETs), 유기 발광트랜지스터(OLETs), 유기 광전소자(OPVs), 염료감응형 태양전지(DSSCs), 유기 광학검출기, 유기 광수용체, 유기 전계효과소자(OFQDs), 발광 전기화학전지(LECs), 유기 레이저 다이오드 및 유기 플라즈마(plasma) 발광소자를 포함하되 이에 한정되지 않는다.

[0003] 1987년, Eastman Kodak의 Tang 및 Van Slyke는, 전자 수송층 및 발광층으로서 아릴아민 정공 수송층 및 트리-8-히드록시퀴놀린-알루미늄층(tris-8-hydroxyquinoline aluminum layer)을 포함하는 2 층 유기 전계 발광소자를 보도하였다(Applied Physics Letters, 1987,51(12): 913-915). 소자에 바이어스를 가하게 되면, 소자에서 녹색 빛이 방출된다. 상기 발명은 현대 유기 발광다이오드(OLEDs)의 발전에 토대를 마련하였다. 가장 선진적인 OLEDs는 전하 주입 및 수송층, 전하 및 엑시톤 차단층(exciton blocking layer), 및 캐소드(cathode)와 애노드(anode) 사이의 하나 또는 복수의 발광층과 같은 복수 층을 포함할 수 있다. OLEDs는 자가발광 고체소자이기 때문에, 디스플레이 및 조명 응용에 엄청난 잠재력을 제공해준다. 또한, 유기 자체의 고유특성(예를 들어 이들의 가요성)은 이들이 특수한 응용(예를 들어 가요성 기판상에서의 제조)에 적합하도록 한다.

[0004] OLED는 이의 발광 매커니즘에 따라 세 가지의 다른 유형으로 분류될 수 있다. Tang과 van Slyke가 발명한 OLED는 형광 OLED이다. 이는 일중항 상태(singlet state) 발광만 사용한다. 소자에서 생성된 삼중항 상태(triplet state)는 비방사성 감쇠채널을 통해 낭비된다. 따라서, 형광 OLED의 내부 양자 효율(IQE)은 25%에 불과하다. 이러한 한정은 OLED의 상업화를 방해한다. 1997년, Forrest와 Thompson은, 착물을 함유하는 중금속으로부터의 삼중항 상태 발광을 발광체로 사용하는 인광 OLED를 리포트하였다. 따라서, 일중항 상태와 삼중항 상태를 획득할 수 있어 100%의 IQE를 달성할 수 있다. 이의 효율이 높기 때문에, 인광 OLED의 발견 및 발전은 액티브 매트릭스 OLED(AMOLED)의 상업화에 직접적인 공헌을 하였다. 최근에, Adachi는 유기 화합물의 열활성화지연형광(TADF)을 통해 고효율을 달성하였다. 이러한 발광체는 엑시톤(exciton)이 삼중항 상태에서 일중항 상태로 돌아갈 수 있도록 작은 일중항-삼중항 상태의 간격(gap)을 구비한다. TADF 소자에서, 삼중항 상태 엑시톤(triplet exciton)은 역항간교차(reverse intersystem crossing)를 통해 일중항 상태 엑시톤을 생성할 수 있어 높은 IQE를 달성할 수 있다.

[0005] OLEDs는 또한 사용되는 재료의 형태에 따라 저분자 및 고분자 OLED로 나눌 수 있다. 저분자는 고분자가 아닌 임의의 유기 또는 유기 금속재료를 지칭한다. 정확한 구조를 구비한다면 저분자의 분자량은 매우 클 수 있다. 명확한 구조를 구비하는 덴드리틱 고분자(dendritic polymer)는 소분자로 간주된다. 고분자 OLED는 공액 고분자(conjugated polymer) 및 펜던트 발광기(pendant emitting groups)를 구비하는 비공액 고분자를 포함한다. 제조과정에 포스트중합(post polymerization)이 발생하면, 저분자 OLED는 고분자 OLED로 변할 수 있다.

[0006] 이미 다양한 OLED 제조방법이 존재한다. 저분자 OLED는 통상적으로 진공 열증착(vacuum thermal evaporation)을 통해 제조된다. 고분자 OLED는 용액공정, 예를 들어 스핀 코팅, 잉크젯 프린팅 및 노즐 프린팅에 의해 제조된다. 재료가 용매에 용해되거나 분산될 수 있으면 저분자 OLED도 용액공정에 의해 제조될 수 있다.

[0007] OLED의 발광색은 발광재료 구조설계에 의해 실현될 수 있다. OLED는 원하는 스펙트럼을 실현할 수 있도록 하나의 발광층 또는 복수의 발광층을 포함할 수 있다. 녹색, 황색 및 적색 OLED에서, 인광재료는 이미 상업화를 성공적으로 실현하였다. 청색 인광소자는 여전히 청색 불포화, 짧은 소자수명 및 높은 작동전압 등 문제가 존재한다.

다. 상업용 풀 컬러 OLED 디스플레이는 통상적으로 청색 형광과, 인광 황색 또는 적색과 녹색을 사용하는 혼합 전략을 사용한다. 현재, 인광 OLED의 효율이 고휘도의 경우에 급격히 감소되는 문제가 여전히 존재한다. 이 외, 보다 포화된 발광 스펙트럼, 더 높은 효율 및 더 긴 소자수명을 구비하는 것을 원한다.

[0008] 시아노-치환은 이리듐 착물과 같은 인광 금속 착물에 자주 도입되지 않는다. 본 출원의 출원인의 전 출원 US20200251666A1에서는 시아노-치환된 리간드를 함유하는 금속 착물을 개시하였으며, 이가 유기 전계발광소자에 응용됨으로써, 소자 성능 및 컬러 포화도를 향상시킬 수 있어, 업계에서 비교적 높은 수준에 도달하였지만, 여전히 향상의 여지가 있다.

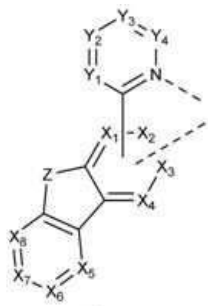
발명의 내용

해결하려는 과제

[0009] 본 발명은 상기 과제의 적어도 일부분을 해결하기 위해, 식 1 구조의 L_a 리간드를 포함하는 일련의 금속 착물을 제공하는 것을 목적으로 한다. 상기 금속 착물은 전계발광소자 중의 발광재료로 사용될 수 있다. 이러한 신규 화합물이 전계발광소자에 응용됨으로써 더욱 포화된 발광, 더욱 우수한 소자 성능을 제공하며, 예를 들어 소자 효율의 향상, 소자 전압의 감소를 제공할 수 있다.

과제의 해결 수단

[0010] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 금속 착물을 개시하며, 상기 금속 착물은 금속 M, 및 상기 금속 M와 배위되는 리간드 L_a 를 포함하며, 여기서 리간드 L_a 는 식 1로 표시된 구조를 구비하며:



식 1

- [0011]
- [0012] 식 1에서,
- [0013] 금속 M은 상대 원자 질량이 40보다 큰 금속에서 선택되며;
- [0014] Z는 O, S, Se, NR, CRR 및 SiRR로 이루어진 군에서 선택되며; 두 개의 R이 동시에 존재할 경우, 두 개의 R은 동일하거나 상이하하며;
- [0015] X_1 - X_8 은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 C, CR_x 또는 N에서 선택되며;
- [0016] Y_1 - Y_4 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 또는 N에서 선택되며;
- [0017] R, R_x , R_y 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알케닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 시아노기, 이소시아노기, 히드록실기, 술폰닐기, 술피닐기, 술폰닐기, 포스피노기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;

[0018] X_1 - X_8 중 적어도 하나는 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이며;

[0019] Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이고, 상기 R_y 는 F이며;

[0020] 인접한 치환기 R, R_x 및 R_y 는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0021] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 전계발광소자를 더 개시하였으며, 이는:

[0022] 양극,

[0023] 음극, 및

[0024] 양극과 음극 사이에 배치된 유기층을 포함하며, 상기 유기층 중 적어도 한 층은 전술한 실시예에 따른 금속 착물을 포함한다.

[0025] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 실시예에 따른 금속 착물을 포함하는 화합물 조합을 더 개시하였다.

발명의 효과

[0026] 본 발명에서 개시한 식 1 구조를 구비하는 L_a 리간드를 포함하는 금속 착물에 있어서, L_a 리간드의 특정 위치에 불소 치환기를 도입하여, 이러한 신규 화합물이 전계발광소자에 응용될 수 있고, 더욱 포화된 발광, 더욱 우수한 소자 성능을 제공하며, 예를 들어 소자 효율의 향상, 소자 전압의 감소를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0027] 도 1은 본문에 의해 개시된 금속 착물 및 화합물 조합을 함유할 수 있는 유기 발광장치의 개략도이다.

도 2는 본문에 의해 개시된 금속 착물 및 화합물 조합을 함유할 수 있는 다른 유기 발광장치의 개략도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0028] OLED는 여러 종류의 기관(예를 들어, 유리, 플라스틱 및 금속)상에서 제조될 수 있다. 도 1은 유기 발광장치(100)를 개략적으로 비 한정적으로 나타낸다. 도면은 반드시 비율에 따라 그려진 것이 아니며, 도면에서의 일부 층구조는 필요에 따라 생략될 수도 있다. 장치(100)는 기관(101), 양극(110), 정공 주입층(120), 정공 수송층(130), 전자 차단층(140), 발광층(150), 정공 차단층(160), 전자 수송층(170), 전자 주입층(180) 및 음극(190)을 포함할 수 있다. 장치(100)는 설명된 층들을 순차적으로 증착하여 제조될 수 있다. 각 층의 성질과 기능 및 예시적인 재료는 미국 특허 US7279704B2 제6-10 칼럼에서 더 구체적으로 설명하였으며, 상기 특허의 전부 내용은 본 출원에 인용되어 결합된다.

[0029] 이러한 층에서의 각 층은 더 많은 예시를 구비한다. 전문을 인용하는 방식으로 결합된 미국특허 제5844363호에 개시된 유연하고 투명한 기관-애노드 조합을 예로 들 수 있다. p-도핑된 정공 수송층의 예시로는, 전문을 인용하는 방식으로 결합된 미국특허출원공개 제2003/0230980호에 개시된 바와 같이 50:1의 몰비로 F4 -TCNQ가 도핑된 m-MTDATA이다. 전문을 인용하는 방식으로 결합된 미국특허 제6303238호(Thompson 등에게 수여됨)에서는 호스트 재료(host material)의 예시를 개시하였다. n-도핑된 전자 수송층의 예시로는, 전문을 인용하는 방식으로 결합된 미국특허출원공개 제2003/0230980호에 개시된 바와 같이 1:1의 몰비로 Li가 도핑된 BPhen이다. 전문을 인용하는 방식으로 결합된 미국특허 제5703436호 및 제5707745호에서는 음극의 예시를 개시하였으며, 이는 Mg:Ag와 같은 금속 박층, 오버라잉(overlying)된 투명하고 전도성을 가지며 스퍼터 증착(sputter-deposited)된 ITO층을 가지는 복합 음극을 포함한다. 전문을 인용하는 방식으로 결합된 미국특허 제6097147호 및 미국특허출원공개 제2003/0230980호에서는 차단층의 원리 및 사용에 대해 더 구체적으로 설명하였다. 전문을 인용하는 방식으로 결합된 미국특허출원공개 제2004/0174116호에서는 주입층의 예시를 제공하였다. 전문을 인용하는 방식으로 결합된 미국특허출원공개 제2004/0174116호에서 보호층에 대한 설명을 찾을 수 있다.

[0030] 비 한정적인 실시예를 통해 상기 계층구조를 제공한다. OLED의 기능은 상술한 여러 종류의 층을 조합함으로써 구현할 수 있고, 또는 일부 층을 완전히 생략할 수 있다. 이는 명확하게 설명되지 않은 다른 층을 더 포함할 수 있다. 각 층 내에는 단일 재료 또는 여러 종류의 재료의 혼합물을 사용함으로써 최적의 성능을 구현할 수 있다. 임의의 기능층은 여러 개의 서브 층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 발광층은 원하는 발광 스펙트럼을 구현할 수 있도록 2 층의 서로 다른 발광재료를 구비할 수 있다.

- [0031] 일 실시예에서, OLED는 음극과 양극 사이에 배치된 "유기층"을 구비하는 것으로 설명될 수 있다. 해당 유기층은 하나 또는 복수의 층을 포함할 수 있다.
- [0032] OLED도 캡슐화층이 필요하며, 도 2에서는 유기 발광장치(200)를 개략적, 비한정적으로 도시하였다. 이와 도 1의 차이점은, 음극(190) 위에는 환경으로부터 유해물질(예를 들어, 수분 및 산소)을 방지하도록 캡슐화층(Encapsulation layer)(102)을 더 포함하는 것이다. 캡슐화 기능을 제공할 수 있는 임의의 재료는 모두 캡슐화층(예를 들어, 유리 또는 유기-무기 혼합층)으로 사용될 수 있다. 캡슐화층은 OLED소자의 외부에 직접적 또는 간접적으로 배치되어야 한다. 다중박막 캡슐화는 미국특허 US7968146B2에서 기술되었으며, 그 전부내용은 본 출원에 인용되어 결합된다.
- [0033] 본 발명의 실시예에 따라 제조된 소자는 해당 소자의 하나 또는 복수의 전자부재모듈(또는 유닛)을 구비하는 여러 종류의 소비재에 통합될 수 있다. 이러한 소비재의 일부 예시는 평판 디스플레이, 모니터, 의료 모니터, 텔레비전, 광고판, 실내 또는 실외용 조명등 및/또는 신호 발사등, 헤드업 디스플레이(head-up display), 전체적으로 투명하거나 부분적으로 투명한 디스플레이, 플렉시블 디스플레이, 스마트폰, 태블릿, 태블릿 폰, 웨어러블 장치(wearable device), 스마트 시계, 랩톱 컴퓨터(laptop computer), 디지털 카메라, 캡코더, 뷰파인더(viewfinder), 마이크로 디스플레이, 3D 디스플레이, 차량 디스플레이 및 후미등을 포함한다.
- [0034] 본문에 기재된 재료 및 구조는 상기에 열거된 다른 유기 전자소자에 사용될 수도 있다.
- [0035] 본문에 사용된 "상단"은 기관과 가장 멀리 위치함을 의미하고, "하단"은 기관과 가장 가깝게 위치함을 의미한다. 제1 층이 제2 층 "상"에 "배치"된다고 설명되는 경우, 제1 층은 기관과 비교적 멀리 위치하도록 배치된다. 제1 층 "및" 제2 층이 "접촉"한다고 규정되지 않는 한, 제1 층과 제2 층 사이에는 다른 층이 존재할 수 있다. 예를 들면, 음극과 양극 사이에 여러 종류의 유기층이 존재하더라도 여전히 음극이 양극 "상"에 "배치"된다고 설명할 수 있다.
- [0036] 본문에 사용된 "용액 처리 가능"은, 용액 또는 현탁액의 형태로 액체 매질에서 용해, 분산 또는 수송될 수 있음 및/또는 액체 매질로부터 침전될 수 있음을 의미한다.
- [0037] 리간드가 발광재료의 감광성능에 직접적으로 작용한다고 사료되는 경우, 리간드는 "감광성 리간드"라 할 수 있다. 리간드가 발광재료의 감광성능에 작용하지 않는다고 사료되는 경우, 리간드는 "보조 리간드"라 할 수 있는데, 보조 리간드는 감광성 리간드의 성질을 변경할 수 있다.
- [0038] 형광 OLED의 내부 양자 효율(IQE)은 지연 형광을 통해 25%의 스핀 통계(spin statistics) 한계를 초과할 수 있는 것으로 여겨진다. 지연 형광은 일반적으로 두 가지 유형, 즉 P형 지연 형광 및 E형 지연 형광으로 나뉠 수 있다. P형 지연 형광은 삼중항-삼중항 소멸(TTA)에 의해 생성된다.
- [0039] 다른 측면으로, E형 지연 형광은 2 개의 삼중항 상태의 충돌에 의존하지 않고 삼중항 상태와 일중항 여기상태(singlet-excited state) 사이의 전이에 의존한다. E형 지연 형광을 생성할 수 있는 화합물은 에너지 상태 간의 전환을 진행할 수 있도록 매우 작은 일중항-삼중항 갭(gap)을 구비해야 한다. 열에너지는 삼중항 상태에서 일중항 상태로의 전이(transition)를 활성화할 수 있다. 이러한 유형의 지연 형광은 또한 열활성 지연 형광(TADF)이라 한다. TADF의 현저한 특징으로는 지연요소는 온도가 높아짐에 따라 증가하는 것이다. 역계간교차(reverse intersystem crossing)(RISC)의 속도가 충분히 빨라 삼중항 상태에 의한 비방사성감쇠를 최소화한다면, 백필링(back-filling)된 일중항 여기상태의 비율은 75%에 도달할 수 있다. 일중항 상태의 총 비율은 100%일 수 있으며 이는 전계가 생성한 엑시톤의 스핀 통계의 25%를 훨씬 초과한다.
- [0040] E형 지연 형광의 특징은 들뜬 복합체(exciplex system) 시스템 또는 단일 화합물에서 발견될 수 있다. 이론에 구속되지 않고, E형 지연 형광은 발광재료가 일중항-삼중항의 작은 에너지 갭(energy gap)(ΔE_{S-T})을 구비해야 한다고 여겨진다. 비금속을 함유하는 유기 공예체-수용체 발광재료는 이러한 특징을 실현할 가능성이 있다. 이러한 물질의 방출은 일반적으로 공예체-수용체 전하이동(CT)형 방출로 표징된다. 이러한 공예체-수용체형 화합물에서 HOMO와 LUMO의 공간적 분리는 일반적으로 작은 ΔE_{S-T} 을 생성한다. 이러한 상태는 CT 상태를 포함할 수 있다. 일반적으로, 공예체-수용체 발광재료는 전자 공예체부분(예를 들어, 아미노기 또는 카바졸 유도체)과 전자 수용체부분(예를 들어, N을 함유하는 6원 방향족고리)을 연결함으로써 구성된다.
- [0041] 치환기 용어의 정의에 관하여,
- [0042] 할로겐 또는 할로젠화물-은 본문에 사용된 바와 같이 불소, 염소, 브롬 및 요오드를 포함한다.

- [0043] 알킬기는 본문에 사용된 바와 같이 직쇄형 알킬기 및 분지형 알킬기를 포함한다. 알킬기는 1~20 개의 탄소원자를 갖는 알킬기일 수 있고, 바람직하게는 1~12 개의 탄소원자를 갖는 알킬기이고, 더 바람직하게는 1~6 개의 탄소원자를 갖는 알킬기이다. 알킬기의 예시는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 2차부틸기(Sec-butyl), 이소부틸기, t-부틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 1-펜틸헥실기, 1-부틸펜틸기, 1-헵틸옥틸기, 3-메틸펜틸기를 포함한다. 또한, 알킬기는 임의로 치환될 수 있다. 상기에서, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 2차부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, n-펜틸기, 네오펜틸기 및 n-헥실기가 바람직하다. 또한, 알킬기는 임의로 치환될 수 있다.
- [0044] 시클로알킬기는 본문에 사용된 바와 같이 고리형 알킬기를 포함한다. 시클로알킬기는 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 시클로알킬기일 수 있고, 바람직하게는 4~10 개의 고리탄소원자를 갖는 시클로알킬기이다. 시클로알킬기의 예시는 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4,4-디메틸시클로헥실기, 1-아다만틸기, 2-아다만틸기, 1-노르보르닐기(1-norbornyl), 2-노르보르닐기 등을 포함한다. 상기에서, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4,4-디메틸시클로헥실기가 바람직하다. 또한, 시클로알킬기는 임의로 치환될 수 있다.
- [0045] 헤테로알킬기는 본문에 사용된 바와 같이, 헤테로알킬기에 함유된 알킬기 사슬 중 하나 또는 복수의 탄소는 질소원자, 산소원자, 황원자, 셀레늄원자, 인원자, 규소원자, 게르마늄원자 및 붕소원자로 이루어진 군에서 선택된 헤테로원자로 치환되어 형성된다. 헤테로알킬기는 1~20 개의 탄소원자를 갖는 헤테로알킬기일 수 있고, 바람직하게는 1~10 개의 탄소원자를 갖는 헤테로알킬기이고, 더 바람직하게는 1~6 개의 탄소원자를 갖는 헤테로알킬기이다. 헤테로알킬기의 예시는 메톡시메틸기, 에톡시메틸기, 에톡시에틸기, 메틸티오메틸기, 에틸티오메틸기, 에틸티오에틸기, 메톡시메톡시메틸기, 에톡시메톡시메틸기, 에톡시에톡시에틸기, 히드록시메틸기, 히드록시에틸기, 히드록시프로필기, 메르캅토메틸기, 메르캅토에틸기, 메르캅토프로필기, 아미노메틸기, 아미노에틸기, 아미노프로필기, 디메틸아미노메틸기, 트리메틸실릴기, 디메틸에틸실릴기, 디메틸이소프로필실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 트리에틸실릴기, 트라이소프로필실릴기, 트리메틸실릴메틸기, 트리메틸실릴에틸기, 트리메틸실릴이소프로필기를 포함한다. 또한, 헤테로알킬기는 임의로 치환될 수 있다.
- [0046] 알케닐기는 본문에 사용된 바와 같이 직쇄형 올레핀기, 분지형 올레핀기 및 고리형 올레핀기를 포함한다. 알케닐기는 2~20 개의 탄소원자를 함유하는 알케닐기일 수 있고, 바람직하게는 2~10 개의 탄소원자를 함유하는 알케닐기이다. 알케닐기의 예시는 비닐기, 프로페닐기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1,3-부타디에닐기(1,3-butadienyl), 1-메틸비닐기, 스티릴기, 2,2-디페닐비닐기, 1,2-디페닐비닐기, 1-메틸알릴기, 1,1-디메틸알릴기, 2-메틸알릴기, 1-페닐알릴기, 2-페닐알릴기, 3-페닐알릴기, 3,3-디페닐알릴기, 1,2-디메틸알릴기, 1-페닐-1-부테닐기, 3-페닐-1-부테닐기, 사이클로펜테닐기(cyclopentenyl group), 사이클로펜타디에닐기(cyclopentadienyl group), 사이클로헥세닐기(cyclohexenyl group), 사이클로헵테닐기(cycloheptenyl group), 사이클로헵타트리아에닐기(cycloheptatrienyl group), 사이클로옥테닐기(cyclooctenyl group), 사이클로옥타테트라에닐기(cyclooctatetraenyl group) 및 노르보르네닐기(norbornenyl group)을 포함한다. 또한, 알케닐기는 임의로 치환될 수 있다.
- [0047] 알키닐기는 본문에 사용된 바와 같이 직쇄형 알키닐기를 포함한다. 알키닐기는 2~20 개의 탄소원자를 함유하는 알키닐기이고, 바람직하게는 2~10 개의 탄소원자를 갖는 알키닐기이다. 알키닐기의 예시는 에티닐기, 프로피닐기, 프로파르길기, 1-부티닐기, 2-부티닐기, 3-부티닐기, 1-펜티닐기, 2-펜티닐기, 3,3-디메틸-1-부티닐기, 3-에틸-3-메틸-1-펜티닐기, 3,3-다이소프로필-1-펜티닐기, 페닐에티닐기, 페닐프로피닐기 등을 포함한다. 상기에서, 에티닐기, 프로피닐기, 프로파르길기, 1-부티닐기, 2-부티닐기, 3-부티닐기, 1-펜티닐기, 페닐에티닐기가 바람직하다. 또한, 알키닐기는 임의로 치환될 수 있다.
- [0048] 아릴기 또는 방향족기는 본문에 사용된 바와 같이 융합 시스템(condensed systems)과 비융합 시스템을 포함한다. 아릴기는 6~30 개의 탄소원자를 갖는 아릴기일 수 있고, 바람직하게는 6~20 개의 탄소원자를 갖는 아릴기이며, 더 바람직하게는 6~12 개의 탄소원자를 갖는 아릴기이다. 아릴기의 예시는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 트리페닐렌(triphenylene group)기, 테트라페닐렌기, 나프탈렌기, 안트라센기, 페날렌기(phenalene group), 페난트렌기, 플루오렌기, 피렌기(Pyrene), 크라이센기(chrysene group), 페릴렌기(perylene group) 및 아줄렌(azulene group)기를 포함하고, 바람직하게는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 트리페닐렌기, 플루오렌기 및 나프탈렌기를 포함한다. 또한, 아릴기는 임의로 치환될 수 있다. 비융합 아릴기의 예시는 페닐기, 비페닐-2-일기(biphenyl-2-yl), 비페닐-3-일기, 비페닐-4-일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-

터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 4'-메틸비페닐릴기, 4"-터트부틸기-p-터페닐-4-일기, o-쿠메닐기(o-cumenyl), m-쿠메닐기, p-쿠메닐기, 2,3-크실릴기, 3,4-크실릴기, 2,5-크실릴기, 메시틸기(mesityl) 및 m-쿼테르페닐기(m-quaterphenyl)를 포함한다. 또한, 아릴기는 임의로 치환될 수 있다.

[0049] 헤테로시클릭기 또는 헤테로시클릭은 본문에 사용된 바와 같이 비방향족 고리형 그룹을 포함한다. 비방향족헤테로시클릭기는 3~20 개의 고리원자를 갖는 포화 헤테로시클릭기 및 3~20 개의 고리원자를 갖는 불포화 비방향족헤테로시클릭기를 함유한다. 여기서, 적어도 하나의 고리원자는 질소원자, 산소원자, 황원자, 셀레늄원자, 규소원자, 인원자, 게르마늄원자 및 붕소원자로 이루어진 군에서 선택되며, 바람직한 비방향족헤테로시클릭기는 3~7 개의 고리원자를 갖는 것으로, 질소, 산소, 규소 또는 황과 같은 적어도 하나의 헤테로원자를 포함한다. 비방향족헤테로시클릭기의 예는옥시라닐기(oxiranyl group), 옥세타닐기(oxetanyl group), 테트라하이드로퓨란이기(tetrahydrofuran group), 테트라하이드로피란기(tetrahydropyran group), 디옥솔란기(dioxolane group), 다이옥산기(dioxane group), 아지리디닐기(aziridinyl group), 디히드로피롤기(dihydropyrrole group), 테트라히드로피롤기(Tetrahydropyrrole group), 피페리딘기(piperidine group), 옥사졸리디닐기(oxazolidinyl group), 모르폴리노기(morpholino group), 피페라지닐기(piperazinyl group), 옥세핀기(oxepine group), 티에핀기(thiepine group), 아제핀기(azepine group) 및 테트라히드로실롤기(tetrahydrosilole group)를 포함한다. 또한, 헤테로시클릭기는 임의로 치환될 수 있다.

[0050] 헤테로아릴기는 본문에 사용된 바와 같이, 1~5 개의 헤테로원자를 함유할 수 있는 비융합 및 융합된 헤테로방향족 그룹을 포함한다. 여기서, 적어도 하나의 헤테로원자는 질소원자, 산소원자, 황원자, 셀레늄원자, 규소원자, 인원자, 게르마늄원자 및 붕소원자로 이루어진 군에서 선택된다. 이소아릴기도 헤테로아릴기를 의미한다. 헤테로아릴기는 3~30 개의 탄소원자를 갖는 헤테로아릴기일 수 있고, 바람직하게는 3~20 개의 탄소원자를 갖는 헤테로아릴기이며, 더 바람직하게는 3~12 개의 탄소원자를 갖는 헤테로아릴기이다. 적합한 헤테로아릴기는 디벤조티오펜기(dibenzothiophene group), 디벤조퓨란이기(dibenzofuran group), 디벤조셀레노펜기(dibenzoselenophene group), 퓨란이기, 티오펜기, 벤조퓨란이기, 벤조티오펜기, 벤조셀레노펜기(benzoselenophene group), 카바졸기(carbazole group), 인돌로카르바졸기(indolocarbazole group), 피리딘인돌로기(pyridine indole group), 피롤로피리딘기(Pyrolopyridine group), 피라졸기, 이미다졸기, 트리아졸기(Triazole group), 옥사졸기(oxazole group), 티아졸기, 옥사디아졸기, 옥사트리아졸기, 디옥사졸기, 티아디아졸기, 피리딘기, 피리다진기(pyridazine group), 피리미딘기, 피라진기(pyrazine group), 트리아진기(triazine group), 옥사진기(oxazine group), 옥사티아진기(oxathiazine group), 옥사디아진기(oxadiazine group), 인돌기(Indole group), 벤즈이미다졸기(benzimidazole group), 인다졸기, 인데옥사진기(indeoxazine group), 벤조옥사졸기, 벤지스옥사졸기(benzisoxazole group), 벤조티아졸기, 퀴놀린기(quinoline group), 이소퀴놀린기, 신놀린기(Cinnoline group), 퀴놀라진기, 퀴놀살린기, 나프티리딘기, 프탈라진기(phthalazine group), 프테리딘기(pteridine group), 크산텐기(xanthene group), 아크리딘기, 페나진기, 페노티아진기, 벤조푸라노피리딘기(Benzofuranopyridine group), 푸라노디피리딘기(Furanodipyridine group), 벤조티에노피리딘기(Benzothienopyridine group), 티에노디피리딘기(Thienodipyridine group), 벤조셀레노페노피리딘기(benzoselenophenopyridine group), 셀레노페노디피리딘기(selenophenodipyridine group)를 포함하고, 바람직하게는 디벤조티오펜기, 디벤조퓨란이기, 디벤조셀레노펜기, 카바졸기, 인돌로카르바졸기, 이미다졸기, 피리딘기, 트리아진기, 벤즈이미다졸기, 1,2-아자보란기(1,2-azaborane group), 1,3-아자보란기, 1,4-아자보란기, 보라진기(borazine group) 및 이들의 아자 유사체를 포함한다. 또한, 헤테로아릴기는 임의로 치환될 수 있다.

[0051] 알콕시기-는 본문에 사용된 바와 같이 -O-알킬기, -O-시클로알킬기, -O-헤테로알킬기 또는 -O-헤테로시클릭기로 표시된다. 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로알킬기 및 헤테로시클릭기의 예시와 바람직한 예시는 상술한 바와 같다. 알콕시기는 1~20 개의 탄소원자를 갖는 알콕시기일 수 있고, 바람직하게는 1~6 개의 탄소원자를 갖는 알콕시기이다. 알콕시기의 예시는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜틸옥시기, 헥실옥시기, 시클로프로필옥시기, 시클로부틸옥시기, 시클로펜틸옥시기, 시클로헥실옥시기, 테트라하이드로퓨란옥시기(tetrahydrofuranoxy group), 테트라하이드로피란옥시기(tetrahydropyranoxy group), 메톡시프로필옥시기, 에톡시에틸옥시기, 메톡시메틸옥시기 및 에톡시메틸옥시기를 포함한다. 또한, 알콕시기는 임의로 치환될 수 있다.

[0052] 아릴옥시기-는 본문에 사용된 바와 같이 -O-아릴기 또는 -O-헤테로아릴기로 표시된다. 아릴기 및 헤테로아릴기의 예시와 바람직한 예시는 상술한 바와 같다. 아릴옥시기는 6~30 개의 탄소원자를 갖는 아릴옥시기일 수 있고, 바람직하게는 6~20 개의 탄소원자를 갖는 아릴옥시기이다. 아릴옥시기의 예시는 페녹시기 및 비페닐옥시기를 포함한다. 또한, 아릴옥시기는 임의로 치환될 수 있다.

- [0053] 아랄킬기(Arylalkyl group)는 본문에 사용된 바와 같이 아릴 치환된 알킬기를 포함한다. 아랄킬기는 7~30 개의 탄소원자를 갖는 아랄킬기일 수 있고, 바람직하게는 7~20 개의 탄소원자를 갖는 아랄킬기이고, 더 바람직하게는 7~13 개의 탄소원자를 갖는 아랄킬기이다. 아랄킬기의 예시는 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐이소프로필기, 2-페닐이소프로필기, 페닐-t-부틸기, α -나프틸메틸기, 1- α -나프틸-에틸기, 2- α -나프틸에틸기, 1- α -나프틸이소프로필기, 2- α -나프틸이소프로필기, β -나프틸메틸기, 1- β -나프틸-에틸기, 2- β -나프틸-에틸기, 1- β -나프틸이소프로필기, 2- β -나프틸이소프로필기, p-메틸벤질기, m-메틸벤질기, o-메틸벤질기, p-클로로벤질기(p-chlorobenzyl), m-클로로벤질기, o-클로로벤질기, p-브로모벤질기(p-bromobenzyl), m-브로모벤질기, o-브로모벤질기, p-요오드벤질기(p-iodobenzyl), m-요오드벤질기, o-요오드벤질기, p-하이드록시벤질기(p-hydroxybenzyl), m-하이드록시벤질기, o-하이드록시벤질기, p-아미노벤질기, m-아미노벤질기, o-아미노벤질기, p-니트로벤질기, m-니트로벤질기, o-니트로벤질기, p-시아노벤질기, m-시아노벤질기, o-시아노벤질기, 1-하이드록시-2-페닐이소프로필기 및 1-클로로-2-페닐이소프로필기를 포함한다. 상기에서, 벤질기, p-시아노벤질기, m-시아노벤질기, o-시아노벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐이소프로필기 및 2-페닐이소프로필기가 바람직하다. 또한, 아랄킬기는 임의로 치환될 수 있다.
- [0054] 알킬실릴기(alkylsilyl group)는 본문에 사용된 바와 같이 알킬로 치환된 실릴기를 포함한다. 알킬실릴기는 3~20 개의 탄소원자를 갖는 알킬실릴기일 수 있고, 바람직하게는 3~10 개의 탄소원자를 갖는 알킬실릴기이다. 알킬실릴기의 예시는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, 메틸디에틸실릴기, 에틸디메틸실릴기, 트리프로필실릴기, 트리부틸실릴기, 트리아이소프로필실릴기, 메틸다이소프로필실릴기, 디메틸이소프로필실릴기, 트리-t-부틸실릴기, 트리아소부틸실릴기, 디메틸-t-부틸실릴기, 메틸-di-t-부틸실릴기를 포함한다. 또한, 알킬실릴기는 임의로 치환될 수 있다.
- [0055] 아릴실릴기(arylsilyl group)는 본문에 사용된 바와 같이 적어도 하나의 아릴로 치환된 실릴기를 포함한다. 아릴실릴기는 6~30 개의 탄소원자를 갖는 아릴실릴기일 수 있고, 바람직하게는 8~20 개의 탄소원자를 갖는 아릴실릴기이다. 아릴실릴기의 예시는 트리페닐실릴기, 페닐디비페닐실릴기(phenyldibiphenylsilyl group), 디페닐비페닐실릴기, 페닐디에틸실릴기, 디페닐에틸실릴기, 페닐디메틸실릴기, 디페닐메틸실릴기, 페닐다이소프로필실릴기, 디페닐이소프로필실릴기, 디페닐부틸실릴기, 디페닐이소부틸실릴기, 디페닐-t-부틸실릴기를 포함한다. 또한, 아릴실릴기는 임의로 치환될 수 있다.
- [0056] 아자디벤조퓨란(azadibenzofuran), 아자디벤조티오펜 등에서의 용어 "아자"는 상응하는 방향족 단편에서의 하나 또는 복수의 C-H 그룹이 질소원자로 대체됨을 의미한다. 예를 들어, 아자트리페닐렌(azatriphenylene)은 디벤조[f, h]퀴놀살린, 디벤조[f, h]퀴놀린 및 고리계에 2 개 또는 그 이상의 질소를 갖는 기타 유사체를 포함한다. 본 분야 당업자는 상술한 아자 유도체의 기타 질소 유사체를 쉽게 생각해낼 수 있으며, 이러한 모든 유사체는 본문에 기재된 용어에 포함되는 것으로 확정된다.
- [0057] 본 발명에서, 달리 정의되지 않는 한, 치환된 알킬기, 치환된 시클로알킬기, 치환된 헤테로알킬기, 치환된 헤테로시클릭기, 치환된 아랄킬기, 치환된 알콕시기, 치환된 아릴옥시기, 치환된 알케닐기, 치환된 알키닐기, 치환된 아릴기, 치환된 헤테로아릴기, 치환된 알킬실릴기, 치환된 아릴실릴기, 치환된 아미노기, 치환된 아실기, 치환된 카르보닐기, 치환된 카르복실산기, 치환된 에스테르기, 치환된 술피닐기, 치환된 술포닐기, 치환된 포스포노기로 이루어진 군 중의 임의의 하나의 용어가 사용되는 경우, 이는 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로알킬기, 헤테로시클릭기, 아랄킬기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 술피닐기, 술포닐기 및 포스포노기 중의 임의의 하나의 그룹이, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자(ring carbon atoms)를 갖는 비치환된 시클로알킬기(cycloalkyl group), 1~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자 수를 갖는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알케닐기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알키닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 알킬실릴기(alkylsilyl group), 6~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아릴실릴기(arylsilyl group), 0~20 개의 탄소원자를 갖는 비치환된 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 시아노기, 이소시아노기, 하이드록시기, 메르캅토기(mercapto group), 술피닐기, 술포닐기, 포스포노기 및 이들 조합에서 선택된 하나 또는 복수 개에 의해 치환될 수 있음을 의미한다.
- [0058] 이해해야 할 것은, 분자 단편이 치환기로 설명되거나 기타 형태로 기타 부분에 연결되는 경우, 그것이 단편(예를 들어, 페닐기, 페닐렌기, 나프틸기, 디벤조퓨란이)인지 또는 그것이 전체 분자(예를 들어, 벤젠, 나프탈렌

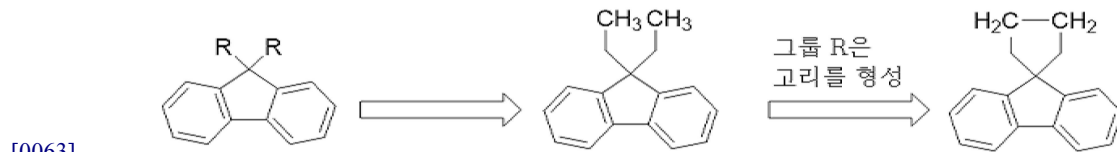
기(naphthalene group), 디벤조퓨란이기)인지에 따라 명명된다. 본문에 사용된 바와 같이, 치환기 또는 단편연결을 지정하는 이러한 상이한 방식은 동일한 것으로 간주한다.

[0059] 본 출원에 언급된 화합물에서, 수소원자는 부분적 또는 전체적으로 듀테륨으로 대체될 수 있다. 탄소 및 질소와 같은 다른 원소도 이들의 기타 안정적인 동위원소로 대체될 수 있다. 이는 소자의 효율 및 안정성을 향상시키므로, 화합물에서 기타 안정적인 동위원소를 대체하는 것은 바람직할 수 있다.

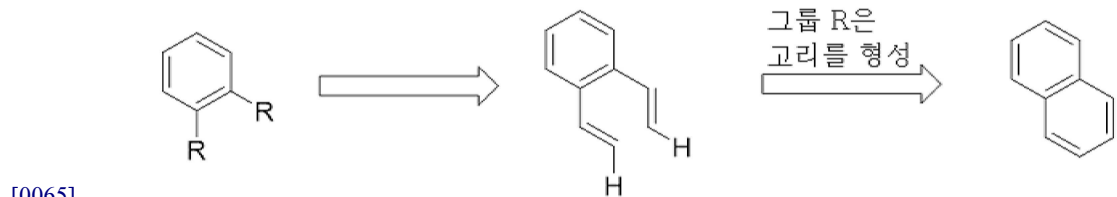
[0060] 본 출원에 언급된 화합물에서, 다중치환은 이중치환을 포함한 최대 사용가능한 치환까지의 범위를 나타낸다. 본 출원에서 언급된 화합물에서, 어느 치환기가 다중치환(이치환, 삼치환, 사치환 등을 포함)을 나타낼 경우, 해당 치환기가 그 연결 구조에서의 복수의 사용가능한 치환 위치에 존재할 수 있음을 나타내고, 복수의 사용가능한 치환 위치에 존재하는 치환기는 동일한 구조일 수 있고 부동한 구조일 수도 있다.

[0061] 본 발명에 언급된 화합물에서, 예를 들어 인접한 치환기는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다고 명확하게 한정하지 않는 한, 상기 화합물에서 인접한 치환기는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 없다. 본 발명에 언급된 화합물에서, 인접한 치환기는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다는 것은, 인접한 치환기가 연결되어 고리를 형성할 수 있는 경우를 포함하고, 또한 인접한 치환기가 연결되지 않아 고리를 형성하지 않는 경우도 포함한다. 인접한 치환기가 임의로 연결되어 고리를 연결할 수 있는 경우, 형성된 고리는 단환식 고리, 다환식 고리, 지환식(alicyclic) 고리, 헤테로지환식(heteroalicyclic) 고리, 방향족 고리 또는 헤테로방향족 고리일 수 있다. 이러한 표현에서, 인접한 치환기는 동일한 원자에 결합된 치환기, 서로 직접 결합된 탄소원자에 결합된 치환기, 또는 더 멀리 떨어진 탄소원자에 결합된 치환기를 지칭할 수 있다. 바람직하게는, 인접한 치환기는 동일한 탄소원자에 결합된 치환기 및 서로 직접 결합된 탄소원자에 결합된 치환기를 지칭한다.

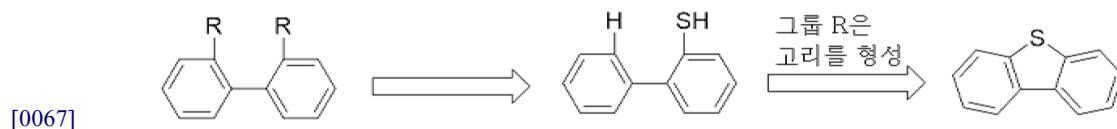
[0062] 인접한 치환기는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다는 표현의 의도는 또한 동일한 탄소원자에 결합된 2 개의 치환기가 화학결합에 의해 서로 연결되어 고리를 형성하였음을 간주하려는 것이며, 이는 하기 식을 통해 예시된다:



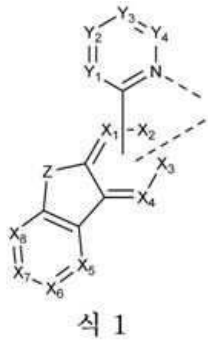
[0064] 인접한 치환기는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다는 표현의 의도는 또한 서로 직접 결합된 탄소원자에 결합된 2 개의 치환기가 화학결합에 의해 서로 연결되어 고리를 형성하였음을 간주하려는 것이며, 이는 하기 식을 통해 예시된다:



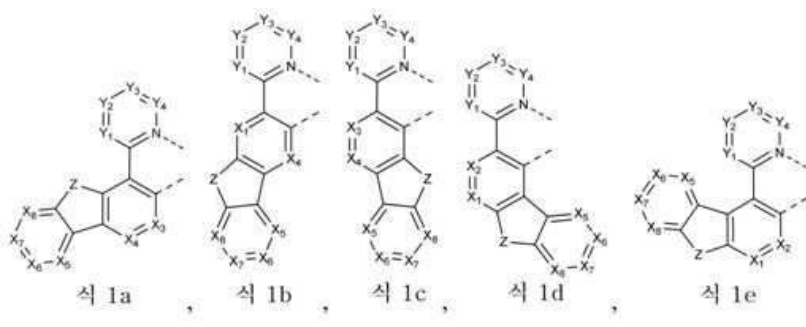
[0066] 이외, 인접한 치환기는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다는 표현의 의도는 또한 서로 직접 결합된 탄소원자에 결합된 2 개의 치환기 중 하나가 수소를 나타낼 경우, 두 번째 치환기는 수소원자가 결합된 위치 측에 결합되어 고리를 형성하였음을 간주하려는 것이다. 이는 하기 식을 통해 예시된다:



[0068] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 금속 착물을 개시하였으며, 상기 금속 착물은 금속 M, 및 상기 금속 M와 배위되는 리간드 L_a를 포함하며, 여기서 L_a는 식 1로 표시된 구조를 구비하며:

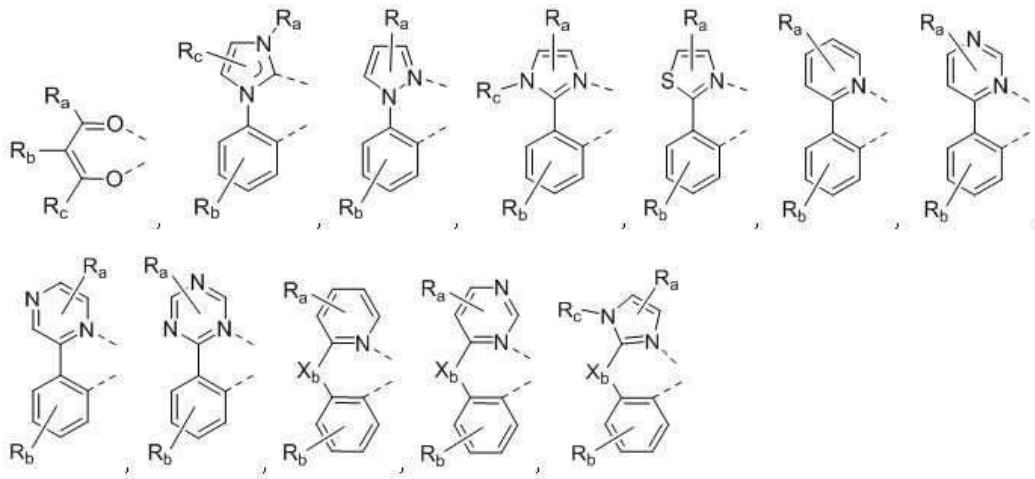


- [0069]
- [0070] 식 1에서,
- [0071] 금속 M은 상대 원자 질량이 40보다 큰 금속에서 선택되며;
- [0072] Z는 O, S, Se, NR, CRR 및 SiRR로 이루어진 군에서 선택되며; 두 개의 R이 동시에 존재할 경우, 두 개의 R은 동일하거나 상이하하며;
- [0073] X₁-X₈은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 C, CR_x 또는 N에서 선택되며;
- [0074] Y₁- Y₄는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 또는 N에서 선택되며;
- [0075] R, R_x, R_y는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알케닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 시아노기, 이소시아노기, 히드록실기, 술폰닐기, 술피닐기, 술폰닐기, 포스피노기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0076] X₁-X₈ 중 적어도 하나는 CR_x이고, 상기 R_x는 시아노기이며;
- [0077] Y₂ 및 Y₃ 중 적어도 하나는 CR_y이고, 상기 R_y는 F이며;
- [0078] 인접한 치환기 R, R_x 및 R_y는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.
- [0079] 본 문에서, "인접한 치환기 R, R_x, R_y가 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다"는 것은, 그 중 인접한 치환기 군에 있어서, 예를 들어, 두 개의 치환기 R 사이, 두 개의 치환기 R_x 사이, 두 개의 치환기 R_y 사이, 치환기 R_y와 R_x 사이, 이러한 치환기 군 중 임의의 하나 또는 복수 개는 연결되어 고리를 형성할 수 있음을 나타내는 의미이다. 자명한 것은, 이러한 치환기 사이는 모두 연결되지 않아 고리를 형성하지 않을 수도 있다.
- [0080] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, L_a는 식 1a-식 1e 중의 하나로 나타낸 구조를 구비하며:



[0081]

- [0082] Z는 O, S, Se, NR, CRR 및 SiRR로 이루어진 군에서 선택되며; 두 개의 R이 동시에 존재할 경우, 두 개의 R은 동일하거나 상이하하며;
- [0083] 식 1a 및 식 1c에서, X₃-X₈은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_x 또는 N에서 선택되며;
- [0084] 식 1b에서, X₁ 및 X₄-X₈은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_x 또는 N에서 선택되며;
- [0085] 식 1d 및 식 1e에서, X₁-X₂ 및 X₅-X₈은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_x 또는 N에서 선택되며;
- [0086] Y₁- Y₄는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 또는 N에서 선택되며;
- [0087] R, R_x, R_y는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알케닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 시아노기, 이소시아노기, 히드록실기, 술폰기, 술폰닐기, 술폰노기, 포스포노기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0088] 식 1a 및 식 1c에서, X₃-X₈ 중 적어도 하나는 CR_x이고, 상기 R_x는 시아노기이며;
- [0089] 식 1b에서, X₁ 및 X₄-X₈ 중 적어도 하나는 CR_x이고, 상기 R_x는 시아노기이며;
- [0090] 식 1d 및 식 1e에서, X₁-X₂ 및 X₅-X₈ 중 적어도 하나는 CR_x이고, 상기 R_x는 시아노기이며;
- [0091] Y₂ 및 Y₃ 중 적어도 하나는 CR_y이고, 상기 R_y는 F이며;
- [0092] 인접한 치환기 R, R_x, R_y는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.
- [0093] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, 금속 착물은 M(L_a)_m(L_b)_n(L_c)_q의 일반식을 구비하며;
- [0094] 여기서,
- [0095] 금속 M은 상대 원자 질량이 40보다 큰 금속에서 선택되며; 바람직하게, M은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 Cu, Ag, Au, Ru, Rh, Pd, Os, Ir 및 Pt로 이루어진 군에서 선택되며; 더욱 바람직하게, M은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 Pt 또는 Ir에서 선택되며;
- [0096] L_a, L_b 및 L_c는 각각 상기 금속 M와 배위되는 제1 리간드, 제2 리간드 및 제3 리간드이며; L_c는 상기 L_a 또는 L_b와 동일하거나 상이하하며; 여기서, L_a, L_b 및 L_c는 임의로 연결되어 여러자리 리간드를 형성할 수 있으며; 예를 들어, L_a, L_b 및 L_c 중의 임의의 두 개는 연결되어 4자리 리간드를 형성할 수 있고; 또 예를 들어, L_a, L_b 및 L_c는 서로 연결되어 6자리 리간드를 형성할 수 있으며; 또는 예를 들어, L_a, L_b, L_c는 모두 연결되지 않아 여러자리 리간드를 형성하지 않으며;
- [0097] m=1, 2 또는 3이고, n=0, 1 또는 2이며, q=0, 1 또는 2이고, m+n+q의 합은 금속 M의 산화 상태와 같으며; m가 2보다 크거나 같을 경우, 복수 개의 L_a는 동일하거나 상이하하며, n이 2와 같을 경우, 두 개의 L_b는 동일하거나 상이하하며; q가 2와 같을 경우, 두 개의 L_c는 동일하거나 상이하하며;
- [0098] L_b 및 L_c는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 하기로 이루어진 군에서 선택되는 임의의 1종으로 표시된 구조이며;



[0099]

[0100] 여기서,

[0101] Ra, Rb 및 Rc는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 단일 치환, 다중 치환 또는 비치환을 나타내며;

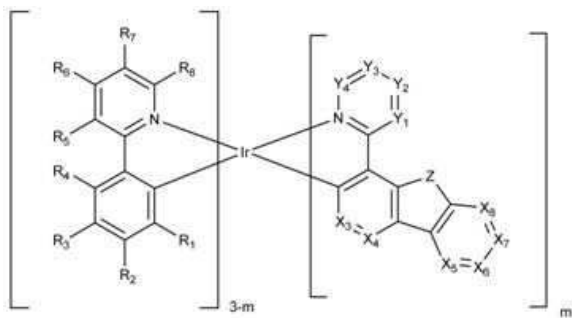
[0102] Xb는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 O, S, Se, NR_{N1} 및 CR_{C1}R_{C2}로 이루어진 군에서 선택되며;

[0103] Ra, Rb, Rc, R_{N1}, R_{C1} 및 R_{C2}는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알록시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알케닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아틸기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아틸기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 시아노기, 이소시아노기, 히드록실기, 술폰닐기, 술피닐기, 술포닐기, 포스포노기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;

[0104] 인접한 치환기 Ra, Rb, Rc, R_{N1}, R_{C1} 및 R_{C2}는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0105] 본 문에서, "인접한 치환기 Ra, Rb, Rc, R_{N1}, R_{C1} 및 R_{C2}가 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다"는 것은, 그 중 인접한 치환기 군에 있어서, 예를 들어, 두 개의 치환기 Ra 사이, 두 개의 치환기 Rb 사이, 두 개의 치환기 Rc 사이, 치환기 Ra와 Rb 사이, 치환기 Ra와 Rc 사이, 치환기 Rb와 Rc 사이, 치환기 Ra와 R_{N1} 사이, 치환기 Rb와 R_{N1} 사이, 치환기 Ra와 R_{C1} 사이, 치환기 Ra와 R_{C2} 사이, 치환기 Rb와 R_{C1} 사이, 치환기 Rb와 R_{C2} 사이, 및 치환기 R_{C1}과 R_{C2} 사이, 이러한 치환기 군 중 임의의 하나 또는 복수 개는 연결되어 고리를 형성할 수 있음을 나타내는 의미이다. 자명한 것은, 이러한 치환기 사이는 모두 연결되지 않아 고리를 형성하지 않을 수도 있다.

[0106] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 금속 착물은 식 2로 나타낸 구조를 구비하며:



식 2

[0107]

- [0108] 여기서,
- [0109] m 은 1, 2 또는 3에서 선택되며; $m=1$ 일 경우, 두 개의 L_b 는 동일하거나 상이하고; $m=2$ 또는 3일 경우, 복수 개의 L_a 는 동일하거나 상이하며;
- [0110] Z 는 0, S, Se, NR, CRR 및 SiRR로 이루어진 군에서 선택되며; 두 개의 R이 동시에 존재할 경우, 두 개의 R은 동일하거나 상이하며;
- [0111] X_3 - X_8 은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_x 또는 N에서 선택되며;
- [0112] Y_1 - Y_4 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 또는 N에서 선택되며;
- [0113] R, R_x , R_y , R_1 - R_8 은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알케닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 시아노기, 이소시아노기, 히드록실기, 술폰닐기, 술피닐기, 술폰닐기, 포스포닐기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0114] X_3 - X_8 중 적어도 하나는 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이며;
- [0115] Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이고, 상기 R_y 는 F이며;
- [0116] 인접한 치환기 R, R_x , R_y , R_1 - R_8 은 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.
- [0117] 해당 실시예에서, "인접한 치환기 R, R_x , R_y , R_1 - R_8 이 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다"는 것은, 그 중 인접한 치환기 군에 있어서, 예를 들어, 두 개의 치환기 R 사이, 두 개의 치환기 R_x 사이, 두 개의 치환기 R_y 사이, R_1 - R_8 중 두 개의 치환기 사이, 이러한 치환기 군 중 임의의 하나 또는 복수 개는 연결되어 고리를 형성할 수 있음을 나타내는 의미이다. 자명한 것은, 이러한 치환기 사이는 모두 연결되지 않아 고리를 형성하지 않을 수도 있다.
- [0118] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Z 는 0 및 S에서 선택된다.
- [0119] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Z 는 0이다.
- [0120] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Y_1 - Y_4 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 로부터 선택되며, Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이다.
- [0121] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Y_1 - Y_4 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 CR_y 또는 N에서 선택되며, Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이다.
- [0122] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이고; Y_1 - Y_4 중 나머지는 CR_y 로부터 선택될 경우, R_y 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0123] 본 문서에서, " Y_1 - Y_4 중 나머지"는 다음과 같은 상황을 의미한다: Y_2 가 CR_y 이고 상기 R_y 가 F일 경우, " Y_1 - Y_4 중 나머지"는 Y_1 및 Y_3 - Y_4 를 의미하고; Y_3 이 CR_y 이고 상기 R_y 가 F일 경우, " Y_1 - Y_4 중 나머지"는 Y_4 및 Y_1 - Y_2 를 의미하며; Y_2 및 Y_3 이 모두 CR_y 이고, 상기 R_y 가 F일 경우, " Y_1 - Y_4 중 나머지"는 Y_1 및 Y_4 를 의미한다.

- [0124] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이고; Y_1 - Y_4 중 나머지는 CR_y 로부터 선택될 경우, R_y 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0125] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이고; Y_1 - Y_4 중 나머지는 CR_y 로부터 선택될 경우, R_y 는 수소, 듀테륨, 메틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, tert-부틸기, 이소부틸기, 펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 또는 이들의 조합에서 선택되며; 선택적으로, 상기 그룹 중의 수소는 듀테륨에 의해 부분적으로 또는 완전히 치환된다.
- [0126] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Y_2 및 Y_3 중 적어도 하나는 CR_y 이며, 상기 R_y 는 F이고; Y_1 - Y_4 중 적어도 또 하나는 CR_y 로부터 선택되며, 적어도 하나의 R_y 는 듀테륨, 할로젠, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0127] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Y_2 는 CR_y 이고, 상기 R_y 는 불소이며; Y_3 은 CR_y 이고, R_y 는 듀테륨, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0128] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, Y_3 은 CR_y 이고, 상기 R_y 는 불소이며; Y_2 는 CR_y 이고, R_y 는 듀테륨, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0129] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, X_1 - X_8 은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 C 또는 CR_x 에서 선택된다.
- [0130] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, X_1 - X_8 중 적어도 두 개는 CR_x 이고, 하나의 상기 R_x 는 시아노기이고, 또한 적어도 하나의 R_x 는 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알케닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기(alkylsilyl group), 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 시아노기, 이소시아노기, 히드록실기, 술폰닐기, 술피닐기, 술포닐기, 포스포노기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0131] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, X_1 - X_8 중 적어도 두 개는 CR_x 이고, 하나의 상기 R_x 는 시아노기이고, 또한 적어도 하나의 R_x 는 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 시아노기, 히드록실기, 술폰닐기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0132] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, X_1 - X_8 중 적어도 두 개는 CR_x 이고, 하나의 상기 R_x 는 시아노기이고, 또한 적어도 하나의 R_x 는 듀테륨, 할로젠, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~10 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.

- [0133] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, X_7 및 X_8 은 각각 CR_x 로부터 선택되고, 하나의 상기 R_x 는 시아노기이며, 또 하나의 상기 R_x 는 듀테륨, 할로젠, 1~10 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~10 개의 고리 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~15 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0134] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, X_5 - X_8 중 적어도 하나는 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이다.
- [0135] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, X_7 은 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이다.
- [0136] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, X_8 은 CR_x 이고, 상기 R_x 는 시아노기이다.
- [0137] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서 R_2 , R_3 , R_6 , R_7 중 적어도 하나 또는 적어도 두 개 또는 적어도 세 개 또는 전부는 듀테륨, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0138] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, R_2 , R_3 , R_6 , R_7 중 적어도 하나 또는 적어도 두 개 또는 적어도 세 개 또는 전부는 듀테륨, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0139] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, R_2 , R_3 , R_6 , R_7 중 적어도 하나 또는 적어도 두 개 또는 적어도 세 개 또는 전부는 듀테륨, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며; 선택적으로 상기 그룹 중의 수소는 듀테륨에 의해 부분적으로 또는 완전히 치환된다.
- [0140] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, R은 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 혹은 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기에서 선택된다.
- [0141] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, R은 메틸기 및 듀테로화된 메틸기이다.
- [0142] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, L_a 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{a1} - L_{a766} 으로 이루어진 군에서 선택되며, 그 중 L_{a1} - L_{a766} 의 구체적인 구조는 청구항 14를 참조한다.
- [0143] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, L_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{b1} - L_{b78} 로 이루어진 군에서 선택되며, 그 중 L_{b1} - L_{b78} 의 구체적인 구조는 청구항 15를 참조한다.
- [0144] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, L_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{b1} - L_{b80} 으로 이루어진 군에서 선택되며, 그 중 L_{b1} - L_{b80} 의 구체적인 구조는 청구항 15를 참조한다.
- [0145] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, 금속 착물은 $Ir(L_a)_2(L_b)$ 의 구조를 구비하며, L_a 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{a1} 내지 L_{a766} 으로 이루어진 군 중의 임의의 1종 또는 임의의 2종에서 선택되며, L_b 는 L_{b1} 내지 L_{b78} 로 이루어진 군 중의 임의의 1종에서 선택되며, 그 중 L_{a1} - L_{a766} 의 구체적인 구조는 청구항 14를 참조하고, L_{b1} - L_{b78} 의 구체적인 구조는 청구항 15를 참조한다.
- [0146] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, 금속 착물은 $Ir(L_a)_2(L_b)$ 의 구조를 구비하며, L_a 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{a1} 내지 L_{a766} 으로 이루어진 군 중의 임의의 1종 또는 임의의 2종에서 선택되며, L_b 는 L_{b1} 내지 L_{b80} 으로 이루어진 군 중의 임의의 1종에서 선택되며, 그 중 L_{a1} - L_{a766} 의 구체적인 구조는 청구항 14를 참조하고, L_{b1} - L_{b80} 의 구체적인 구조는 청구항 15를 참조한다.
- [0147] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, 금속 착물은 $Ir(L_a)(L_b)_2$ 의 구조를 구비하며, L_a 는 L_{a1} 내지 L_{a766} 으로 이루어진 군 중의 임의의 1종에서 선택되며, L_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{b1} 내지 L_{b78} 로 이루어진 군 중의 임의의 1종 또는 임의의 2종에서 선택되며, 그 중 L_{a1} - L_{a766} 의 구체적인 구조는 청구항 14를 참조하고, L_{b1} -

L_{b78} 의 구체적인 구조는 청구항 15를 참조한다.

[0148] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, 금속 착물은 $Ir(L_a)(L_b)_2$ 의 구조를 구비하며, L_a 는 L_{a1} 내지 L_{a766} 으로 이루어진 군 중의 임의의 1종에서 선택되며, L_b 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{b1} 내지 L_{b80} 로 이루어진 군 중의 임의의 1종 또는 임의의 2종에서 선택되며, 그 중 L_{a1} - L_{a766} 의 구체적인 구조는 청구항 14를 참조하고, L_{b1} - L_{b80} 의 구체적인 구조는 청구항 15를 참조한다.

[0149] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, 금속 착물은 $Ir(L_a)_3$ 의 구조를 구비하며, L_a 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 L_{a1} 내지 L_{a766} 으로 이루어진 군 중의 임의의 1종 또는 임의의 2종 또는 임의의 3종에서 선택되며, 그 중 L_{a1} - L_{a766} 의 구체적인 구조는 청구항 14를 참조한다.

[0150] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, 금속 착물은 금속 착물 1 내지 금속 착물 360으로 이루어진 군에서 선택되며; 그 중 금속 착물 1 내지 금속 착물 360의 구체적인 구조는 청구항 16를 참조한다.

[0151] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서, 금속 착물은 금속 착물 1 내지 금속 착물 390으로 이루어진 군에서 선택되며; 그 중 금속 착물 1 내지 금속 착물 390의 구체적인 구조는 청구항 16를 참조한다.

[0152] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 전계발광소자를 개시하였으며, 이는:

[0153] 양극,

[0154] 음극, 및

[0155] 양극과 음극 사이에 배치된 유기층을 포함하며, 상기 유기층 중 적어도 한 층은 상기 임의의 하나 실시예에 따른 금속 착물을 포함한다.

[0156] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 전계발광소자에서 상기 금속 착물을 포함하는 상기 유기층은 발광층이다.

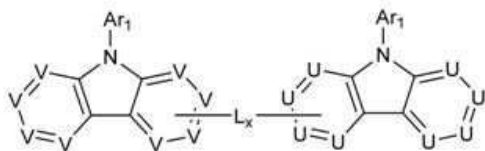
[0157] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 전계발광소자의 상기 발광층은 녹색광을 방출한다.

[0158] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 전계발광소자의 상기 발광층은 적어도 1종의 제1 호스트 화합물을 포함한다.

[0159] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 전계발광소자의 상기 발광층은 적어도 2종의 호스트 화합물을 더 포함한다.

[0160] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 여기서 상기 전계발광소자에서 호스트 화합물 중의 적어도 1종은 페닐기, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 카바졸기, 아자카바졸기, 인돌로카바졸기(indolocarbazole group), 디벤조티오펜기, 아자디벤조티오펜기, 디벤조퓨란기, 아자디벤조퓨란기, 디벤조셀레노펜기(dibenzoselenophene group), 트리페닐렌기(triphenylene group), 아자트리페닐렌기, 플루오렌기, 실라플루오렌기(Silafluorene group), 나프탈렌기, 퀴놀린기(quinoline group), 이소퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴놀살린기, 페난트렌기, 아자페난트렌기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 1종의 화학 그룹을 포함한다.

[0161] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 전계방광소자에서 제1 호스트 화합물은 식 3으로 표시된 구조를 구비한다:

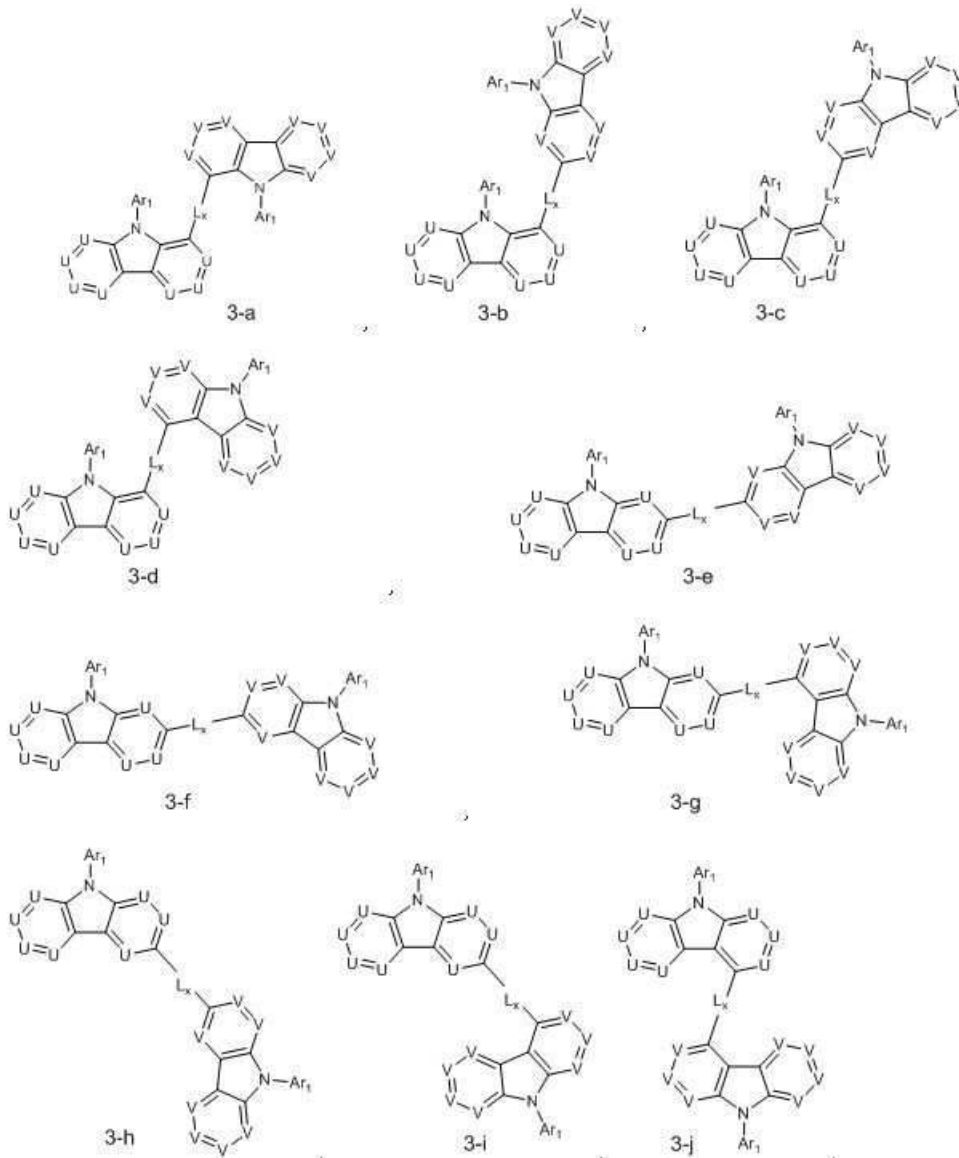


식 3

[0162] 여기서,

[0164] L_x 는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 단일 결합, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬렌기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합에서 선택되며;

- [0165] V는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 C, CR_v 또는 N에서 선택되며; V 중 적어도 하나는 C이고, L_x와 연결되며;
- [0166] U는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 C, CR_u 또는 N에서 선택되며, U 중 적어도 하나는 C이고, L_x와 연결되며;
- [0167] R_v 및 R_u는 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 수소, 듀테륨, 할로젠, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬기, 3~20 개의 고리탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로알킬기, 3~20 개의 고리원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로시클릭기, 7~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아랄킬기, 1~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알콕시기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 2~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알케닐기, 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 3~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 알킬실릴기, 6~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴실릴기, 0~20 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아미노기, 아실기, 카르보닐기, 카르복실산기, 에스테르기, 시아노기, 이소시아노기, 히드록실기, 술폰닐기, 술피닐기, 술폰닐기, 포스포노기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0168] Ar₁은 나타날 때마다 동일하거나 상이하게 6~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴기, 3~30 개의 탄소원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합에서 선택되며;
- [0169] 인접한 치환기 R_v 및 R_u는 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.
- [0170] 해당 실시예에서, "인접한 치환기 R_v 및 R_u가 임의로 연결되어 고리를 형성할 수 있다"는 것은, 그 중 인접한 치환기 군에 있어서, 예를 들어, 두 개의 치환기 R_v 사이, 두 개의 치환기 R_u 사이, 치환기 R_v 및 R_u 사이, 이러한 치환기 군 중 임의의 하나 또는 복수 개는 연결되어 고리를 형성할 수 있다. 자명한 것은, 이러한 치환기 사이는 모두 연결되지 않아 고리를 형성하지 않을 수도 있다.
- [0171] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 전계방광소자에서 제1 호스트 화합물은 식 3-a 내지 식 3-j 중 하나로 표시된 구조를 구비한다:



[0172]

[0173] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 전계발광소자에서, 금속 착물은 상기 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물에 도핑되어 있으며, 금속 착물의 중량은 발광층 총 중량의 1%~30%를 차지한다.

[0174] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 전계발광소자에서, 금속 착물은 상기 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물에 도핑되어 있으며, 금속 착물의 중량은 발광층 총 중량의 3%~13%를 차지한다.

[0175] 본 발명의 다른 일 실시예에 따르면, 화합물 조합을 개시하였으며, 해당 화합물 조합은 상기 임의의 실시예에 따른 금속 착물을 포함한다.

[0176] 기타 재료와의 조합

[0177] 본 발명에 기재된 유기 발광소자에서의 특정층에 사용되는 재료는, 소자에 존재하는 다양한 기타 재료와 조합되어 사용될 수 있다. 이러한 재료의 조합은 미국특허출원 US2016/0359122A1의 제0132~0161 단락에 상세하게 기술되었으며, 그 전부 내용은 본문에 인용되어 결합된다. 여기서, 기술되거나 언급된 재료는, 본문에 개시된 화합물과 조합되어 사용될 수 있는 재료의 비한정적인 예시이고, 본 분야 당업자는 조합 및 사용가능한 기타 재료를 식별할 수 있도록 문헌을 용이하게 참고할 수 있다.

[0178] 본문에서는, 유기 발광소자에서의 구체적인 층에 사용가능한 재료는 상기 소자에 존재하는 여러 종류의 기타 재료와 조합되어 사용될 수 있는 것으로 설명된다. 예를 들어, 본문에 개시된 발광 도판트(dopant)는 여러 종류의 호스트, 수송층, 차단층, 주입층, 전극 및 존재할 수 있는 기타 층과 결합되어 사용될 수 있다. 이러한 재료의 조합은 특허출원 US2015/0349273A1의 제0080~0101 단락에 상세하게 기술되었으며, 그 전부 내용은 본문에 인용되어 결합된다. 여기서, 기술되거나 언급된 재료는, 본문에 개시된 화합물과 조합되어 사용될 수 있는 재료의

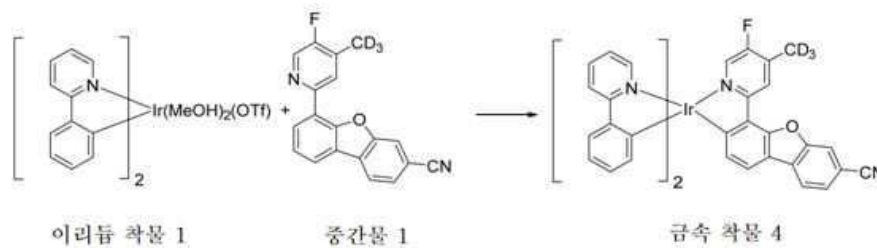
비한정적인 예시이고, 본 분야 당업자는 조합 및 사용가능한 기타 재료를 식별할 수 있도록 문헌을 용이하게 참고할 수 있다.

[0179] 재료합성의 실시예에서, 별도로 언급되지 않는 한 모든 반응은 질소 보호하에서 진행된다. 모든 반응용매는 무수(anhydrous)이고 상업적 공급원으로부터 받은 그대로 사용된다. 합성된 생성물은 본 분야 상규적인 하나 또는 여러 종류의 설비(BRUKER의 핵자기공명분광기, SHIMADZU의 액체 크로마토그래피(liquid chromatography), 크로마토그래프 질량 분석계(liquid chromatograph-mass spectrometry), 가스 크로마토그래프 질량 분석계(gas chromatograph-mass spectrometry), 시차주사 열량계(differential scanning calorimeter), 상해 LENGGUANG TECH.의 형광분광광도계, 우한 CORRETEST의 전기화학 워크스테이션 및 안후이 BEQ의 승화장치(sublimation apparatus) 등을 포함하나 이에 한정되지 않음)를 사용하여, 본 분야 당업자에게 잘 알려진 방법에 의해 구조가 확인되고 특성이 테스트된다. 소자의 실시예에서, 소자의 특성도 본 분야 상규적인 설비(ANGSTROM ENGINEERING에서 생산한 증착기, 소주 FATAR에서 생산한 광학 테스트시스템 및 수명테스트 시스템, 북경 ELLITOP에서 생산한 타원계측기(ellipsometer) 등을 포함하나 이에 한정되지 않음)를 사용하여, 본 분야 당업자에게 잘 알려진 방법에 의해 테스트된다. 본 분야 당업자는 상기 설비의 사용, 테스트 방법 등 관련내용을 잘 알고 있어 시료의 고유 데이터를 확실하면서도 영향을 받지 않고 얻을 수 있으므로, 본원에서 상기 관련내용을 더이상 설명하지 않는다.

[0180] 재료 합성 실시예:

[0181] 본 발명의 화합물의 제조방법은 한정하지 않으며, 전형적인 예시로는 하기 화합물이 있으나, 이에 한정되지 않으며, 그 합성경로 및 제조방법은 아래와 같다:

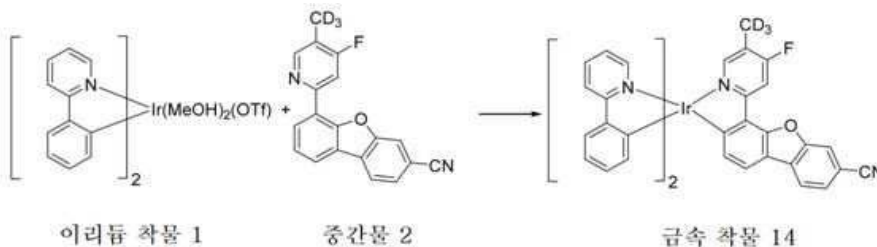
[0182] 합성 실시예 1: 금속 착물 4의 합성



[0183]

[0184] 250mL의 건조한 둥근바닥플라스크에 중간물 1(2.2g, 7.2mmol), 이리듐 착물 1(3.5g, 5.2mmol), 2-에톡시에탄올(30mL) 및 DMF(30mL)를 순차적으로 첨가하고, N₂ 보호 하에, 110℃로 가열하여 120h 동안 반응시킨다. 반응이 냉각된 후, 셀라이트(Celite)로 여과한다. 메탄올, n-헥산으로 각각 2회 세척하고, 디클로로메탄으로 셀라이트 상의 황색고체를 용해시키고, 유기상을 수집하여, 감압 농축시킨 후, 컬럼크로마토그래피법으로 정제하여, 황색고체인 금속 착물 4(0.94g, 수율 22.4%)을 얻는다. 해당 생성물은 분자량이 805.2인 목표 생성물로 확인되었다.

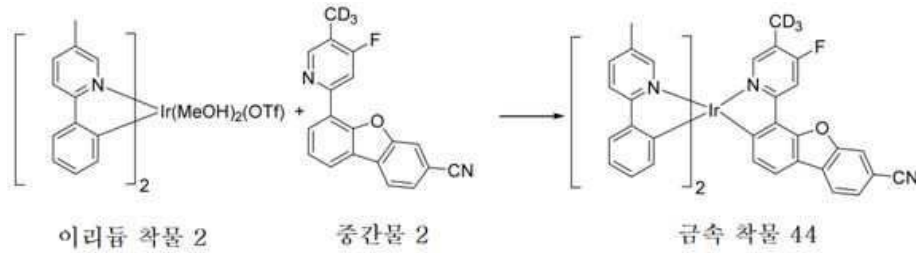
[0185] 합성 실시예 2: 금속 착물 14의 합성



[0186]

[0187] 250mL의 건조한 둥근바닥플라스크에 중간물 2(1.5g, 4.9mmol), 이리듐 착물 1(2.9g, 4.0mmol), 2-에톡시에탄올(30mL) 및 DMF(30mL)를 순차적으로 첨가하고, N₂ 보호 하에, 90℃로 가열하여 144h 동안 반응시킨다. 반응이 냉각된 후, 셀라이트로 여과한다. 메탄올, n-헥산으로 각각 2회 세척하고, 디클로로메탄으로 셀라이트 상의 황색고체를 용해시키고, 유기상을 수집하여, 감압 농축시킨 후, 컬럼크로마토그래피법으로 정제하여, 황색고체인 금속 착물 14(0.70g, 수율 21.8%)을 얻는다. 해당 생성물은 분자량이 805.2인 목표 생성물로 확인되었다.

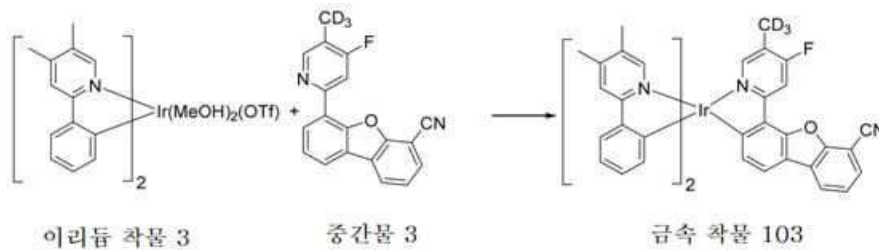
[0188] 합성 실시예 3: 금속 착물 44의 합성



[0189]

250mL의 건조한 둥근바닥플라스크에 중간물 2(1.6g, 5.2mmol), 이리듐 착물 2(3.1g, 4.0mmol), 2-에톡시에탄올 (25mL) 및 DMF(25mL)를 순차적으로 첨가하고, N₂ 보호 하에, 90°C로 가열하여 144h 동안 반응시킨다. 반응이 냉각된 후, 셀라이트로 여과한다. 메탄올, n-헥산으로 각각 2회 세척하고, 디클로로메탄으로 셀라이트 상의 황색 고체를 용해시키고, 유기상을 수집하여, 감압 농축시킨 후, 컬럼크로마토그래피법으로 정제하여, 황색고체인 금속 착물 44(0.58g, 수율 17.5%)을 얻는다. 해당 생성물은 분자량이 833.2인 목표 생성물로 확인되었다.

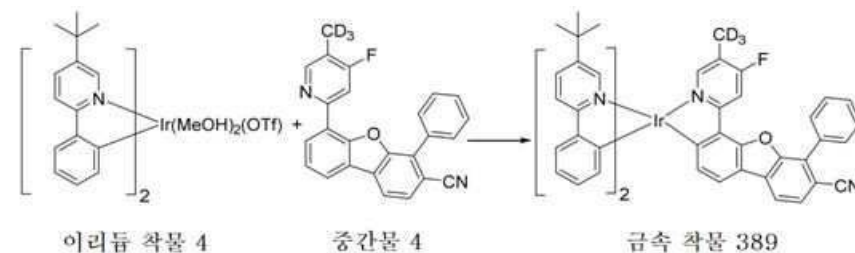
[0191] 합성 실시예 4: 금속 착물 103의 합성



[0192]

250mL의 건조한 둥근바닥플라스크에 중간물 3(1.2g, 3.9mmol), 이리듐 착물 3(2.5g, 3.2mmol), 2-에톡시에탄올 (20mL) 및 DMF(20mL)를 순차적으로 첨가하고, N₂ 보호 하에, 90°C로 가열하여 144h 동안 반응시킨다. 반응이 냉각된 후, 셀라이트로 여과한다. 메탄올, n-헥산으로 각각 2회 세척하고, 디클로로메탄으로 셀라이트 상의 황색 고체를 용해시키고, 유기상을 수집하여, 감압 농축시킨 후, 컬럼크로마토그래피법으로 정제하여, 황색고체인 금속 착물 103(0.85g, 수율 30.9%)을 얻는다. 해당 생성물은 분자량이 861.2인 목표 생성물로 확인되었다.

[0194] 합성 실시예 5: 금속 착물 389의 합성



[0195]

250mL의 건조한 둥근바닥플라스크에 중간물 4(1.6g, 4.2mmol), 이리듐 착물 4(2.6g, 3.2mmol), 2-에톡시에탄올 (25mL) 및 DMF(25mL)를 순차적으로 첨가하고, N₂ 보호 하에, 90°C로 가열하여 144h 동안 반응시킨다. 반응이 냉각된 후, 셀라이트로 여과한다. 메탄올, n-헥산으로 각각 2회 세척하고, 디클로로메탄으로 셀라이트 상의 황색 고체를 용해시키고, 유기상을 수집하여, 감압 농축시킨 후, 컬럼크로마토그래피법으로 정제하여, 황색고체인 금속 착물 389(0.48g, 수율 15.1%)을 얻는다. 해당 생성물은 분자량이 993.3인 목표 생성물로 확인되었다.

[0197] 본 분야 당업자에 있어서, 상기 제조 방법은 단지 하나의 예시적인 예일뿐이라는 것을 알 수 있을 것이며, 본 분야 당업자는 이를 개진함으로써 본 발명의 기타 화합물의 구조를 얻을 수 있음을 알 수 있을 것이다.

[0198] 소자 실시예 1

[0199] 먼저, 80nm 두께의 인듐주석산화물(ITO) 양극을 구비하는 유리기관을 세정한 다음, 산소 플라즈마 및 UV 오존을 사용하여 처리한다. 처리 후, 기관을 글로브 박스에서 드라이하여 수분을 제거한다. 다음, 기관을 기관 홀더에

장착하고 진공실에 넣는다. 아래에서 지정된 유기층을 약 10^{-8} 토르(Torr)의 진공도에서 0.02-2 옹스트롬(angstrom)/초의 속도로 열진공 증착을 통해 ITO 양극 상에서 순차적으로 증착시킨다. 정공 주입층(HIL)으로서 화합물 HI를 사용한다. 정공 수송층(HTL)으로서 화합물 HT를 사용한다. 전자 차단층(EBL)으로서 화합물 H1를 사용한다. 그리고, 본 발명의 금속 착물 4을 화합물 H1 및 화합물 H2에 도핑하여 공증착시킴으로써 발광층(EML)으로 사용한다. EML에서, 화합물 H3을 정공 차단층(HBL)으로 사용한다. HBL 상에, 화합물 ET와 8-히드록시 퀴놀린-리튬(Liq)을 공증착시켜 전자 수송층(ETL)으로 사용한다. 마지막으로, 1nm 두께의 8-히드록시 퀴놀린-리튬(Liq)을 증착시켜 전자 주입층으로 하며, 120nm의 알루미늄을 증착시켜 음극으로 한다. 다음, 해당 소자를 글로브 박스로 다시 옮기고 유리 뚜껑(glass lid) 및 흡습계를 사용하여 봉입(encapsulate)함으로써 해당 소자를 완성한다.

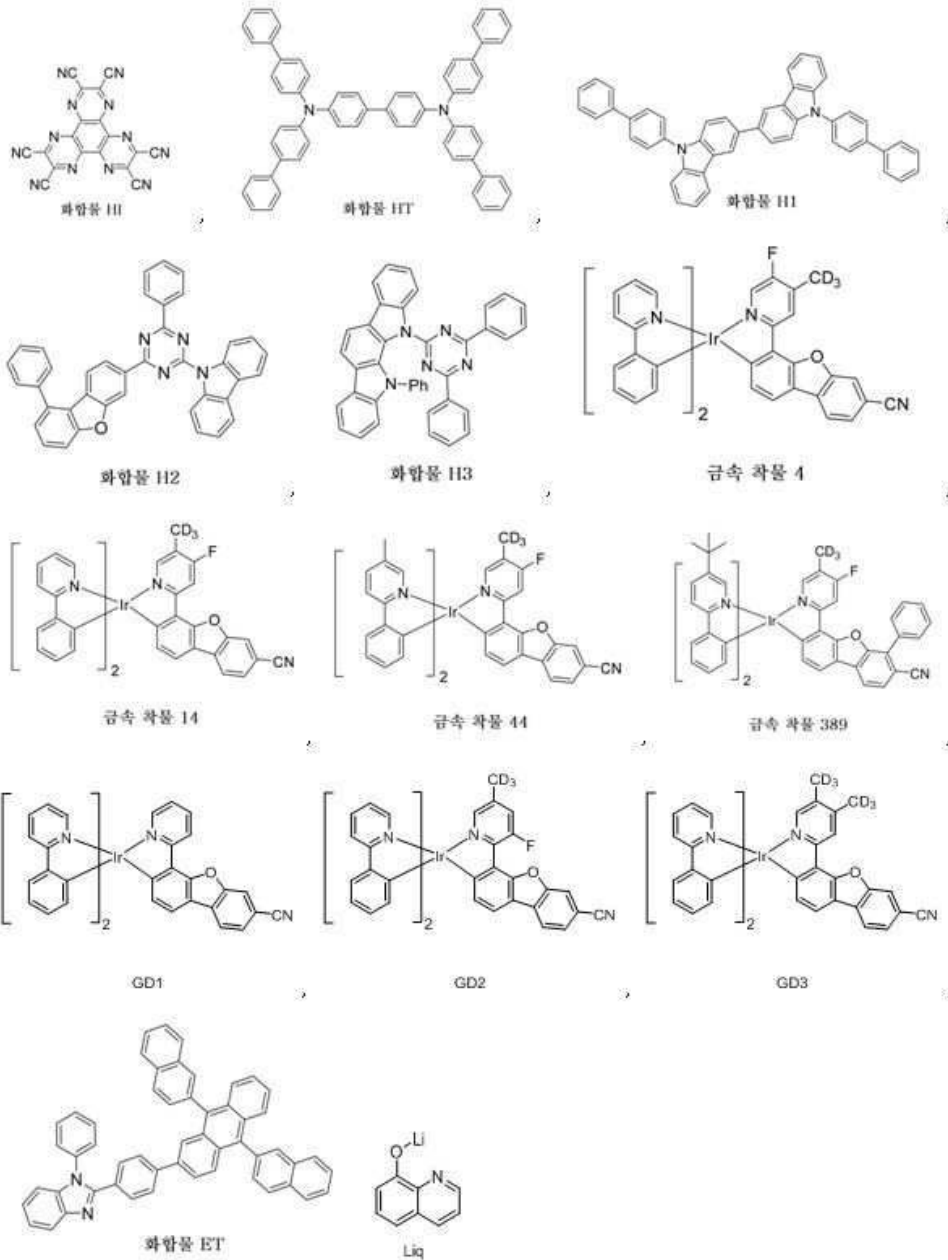
- [0200] 소자 실시예 2
- [0201] 발광층(EML)에서 본 발명의 금속 착물 4 대신 본 발명의 금속 착물 14를 사용하는 것 외에는, 소자 실시예 2의 실시형태는 소자 실시예 1과 동일하다.
- [0202] 소자 실시예 3
- [0203] 발광층(EML)에서 본 발명의 금속 착물 4 대신 본 발명의 금속 착물 44를 사용하는 것 외에는, 소자 실시예 3의 실시형태는 소자 실시예 1과 동일하다.
- [0204] 소자 실시예 4
- [0205] 발광층(EML)에서 본 발명의 금속 착물 4 대신 본 발명의 금속 착물 389를 사용하는 것 외에는, 소자 실시예 4의 실시형태는 소자 실시예 1과 동일하다.
- [0206] 소자 비교예 1
- [0207] 발광층(EML)에서 본 발명의 금속 착물 4 대신 화합물 GD1을 사용하는 것 외에는, 소자 비교예 1의 실시형태는 소자 실시예 1과 동일하다.
- [0208] 소자 비교예 2
- [0209] 발광층(EML)에서 본 발명의 금속 착물 4 대신 화합물 GD2를 사용하는 것 외에는, 소자 비교예 2의 실시형태는 소자 실시예 1과 동일하다.
- [0210] 소자 비교예 3
- [0211] 발광층(EML)에서 본 발명의 금속 착물 4 대신 화합물 GD3을 사용하는 것 외에는, 소자 비교예 3의 실시형태는 소자 실시예 1과 동일하다.
- [0212] 상세한 소자 층 구조와 두께는 하기 표 1과 같다. 여기서 사용된 재료는 2종 이상의 층이 되, 상이한 화합물층에 기재된 중량비로 도핑함으로써 얻어진다.

[0213] 표 1 소자 실시예의 소자 구조

소자 ID	HIL	HTL	EBL	EML	HBL	ETL
실시예 1	화합물 HI (100Å)	화합물 HT (350Å)	화합물 H1 (50Å)	화합물 H1:화합물 H2:금속 착물 4 (47:47:6)(400Å)	화합물 H3 (50Å)	화합물 ET:Liq(40:60)(350Å)
실시예 2	화합물 HI (100Å)	화합물 HT (350Å)	화합물 H1 (50Å)	화합물 H1:화합물 H2:금속 착물 14 (47:47:6)(400Å)	화합물 H3 (50Å)	화합물 ET:Liq(40:60)(350Å)
실시예 3	화합물 HI (100Å)	화합물 HT (350Å)	화합물 H1 (50Å)	화합물 H1:화합물 H2:금속 착물 44 (47:47:6)(400Å)	화합물 H3 (50Å)	화합물 ET:Liq(40:60)(350Å)
실시예 4	화합물 HI (100Å)	화합물 HT (350Å)	화합물 H1 (50Å)	화합물 H1:화합물 H2:금속 착물 389 (47:47:6)(400Å)	화합물 H3 (50Å)	화합물 ET:Liq(40:60)(350Å)
비교예 1	화합물 HI (100Å)	화합물 HT (350Å)	화합물 H1 (50Å)	화합물 H1:화합물 H2:화합물 GD1 (47:47:6)(400Å)	화합물 H3 (50Å)	화합물 ET:Liq(40:60)(350Å)
비교예 2	화합물 HI (100Å)	화합물 HT (350Å)	화합물 H1 (50Å)	화합물 H1:화합물 H2:화합물 GD2 (47:47:6)(400Å)	화합물 H3 (50Å)	화합물 ET:Liq(40:60)(350Å)
비교예 3	화합물 HI (100Å)	화합물 HT (350Å)	화합물 H1 (50Å)	화합물 H1:화합물 H2:화합물 GD3 (47:47:6)(400Å)	화합물 H3 (50Å)	화합물 ET:Liq(40:60)(350Å)

[0214]

[0215] 소자에 사용되는 재료 구조는 아래와 같다:



[0216]

[0217] 소자의 IVL 특성을 측정한다. 1000cd/m²의 조건에서 소자의 CIE 데이터, 최대 방출 파장 λ_{max}, 반치폭(FWHM), 전압(V) 및 외부 양자 효율(EQE)을 측정하였다. 이러한 데이터는 표 2에 기록되어 표시된다.

[0218] 표 2 소자 데이터

소자 ID	CIE(x, y)	λ_{max} (nm)	FWHM(nm)	Voltage(V)	EQE(%)
실시예 1	(0.300, 0.655)	520	41.2	2.84	24.37
실시예 2	(0.300, 0.654)	521	35.8	2.83	24.65
실시예 3	(0.319, 0.645)	524	41.2	2.69	24.14
실시예 4	(0.318, 0.649)	525	32.3	2.80	26.52
비교예 1	(0.321, 0.646)	525	37.8	3.19	23.39
비교예 2	(0.399, 0.589)	540	59.7	2.91	23.02
비교예 3	(0.298, 0.653)	519	36.3	2.92	23.13

[0219]

[0220]

토론:

[0221]

표 2에서는 실시예 및 비교예의 소자 성능을 표시하였다. 표 2의 데이터로부터 볼 수 있다시피, L_a 리간드에 치환이 없는 비교예 1에 비해, 실시예 1과 실시예 2의 방출 파장은 4-5nm 청색 이동되었으며, 더욱 포화된 녹색 발광을 구비한다. 그리고, 실시예 1 및 실시예 2의 소자 EQE는 각각 24.37% 및 24.65%에 도달하는바, 모두 비교예 1의 23.39%보다 높기 때문에, 업계에서 이미 비교적 높은 수준에 있는 비교예 1의 기초상 추가적인 향상을 가져다준다. 이외에, 실시예 1 및 실시예 2의 소자 전압은 모두 비교예 1에 비해 0.35V 정도의 감소를 가져온다.

[0222]

L_a 리간드의 Y_2 및 Y_3 위치가 모두 듀테로화된 메틸기로 치환된 비교예 3의 스펙트럼은 실시예 1 및 실시예 2와 유사하지만, 비교예 3의 EQE는 실시예 1 및 실시예 2에 비해 모두 상이한 정도의 감소를 가져오며, 소자 전압도 실시예 1 및 실시예 2보다 높다.

[0223]

L_a 리간드의 Y_1 위치에 불소 치환을 갖는 비교예 2의 최대 방출 파장은 실시예 1 및 실시예 2에 비해 거의 20nm 적색 이동되었고, 반치폭은 각각 18.5nm 및 23.9nm 넓어지기 때문에, 비교예 2의 발광색은 불포화된다. 이외, 비교예 2의 EQE는 실시예 1 및 실시예 2에 비해 모두 어느 정도 감소되었으며, 비교예 2의 소자 전압도 실시예 1 및 실시예 2보다 약간 높다.

[0224]

상기 결과로부터 알 수 있는바, 특정 위치에 F 치환이 있는 리간드를 구비하는 본 발명의 금속 착물은, L_a 리간드의 동일한 위치에 치환이 없거나 기타 알킬기 치환이 있는 것 또는 기타 위치에 불소 치환이 있는 금속 착물에 비해, 소자 성능은 향상되었는바, 특히는 소자 전압의 감소와 EQE의 향상, 및 발광색 포화도의 향상이 있다.

[0225]

실시예 3 및 실시예 4는 비교예 1-3에 비해 모두 대폭적인 향상을 가져오며, 모두 더욱 높은 EQE, 및 더욱 낮은 구동 전압을 나타낸다. 여기서, 실시예 3의 구동 전압은 비교예 1 내지 비교예 3에 비해 각각 0.5V, 0.22V 및 0.21V 감소되었다. 실시예 4에서 사용한 본 발명의 특징인 금속 착물의 EQE는 26.52%에 도달되며, 비교예 1 내지 비교예 3에 비해 각각 13.4%, 15.2% 및 14.6% 향상되었으며, 마찬가지로 실시예 4의 반치폭은 단지 32.3nm로 아주 좁으며, 이는 업계에서 아주 높은 수준에 처해 있다.

[0226]

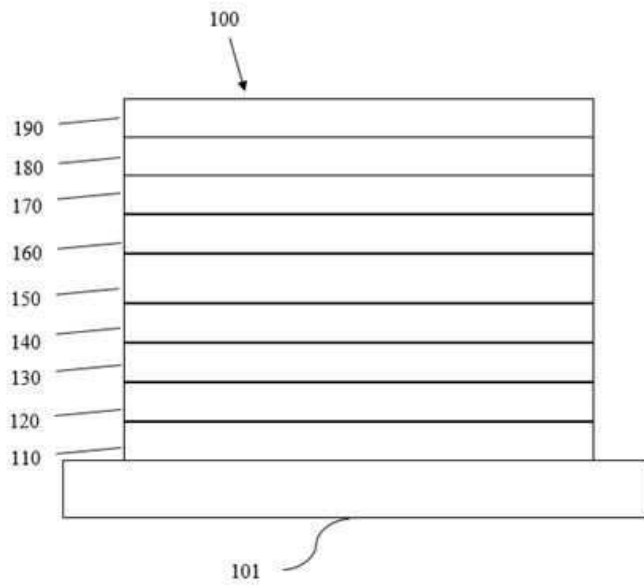
상기 결과로부터 알 수 있는바, 특정 위치에 F 치환이 있는 리간드를 구비하는 본 발명의 금속 착물은, 리간드의 기타 위치에 불소 치환이 있는 금속 착물에 비해, 특히는 발광색 포화도의 향상, 좁아진 반치폭, EQE의 향상 및 전압의 감소와 같은 소자 성능이 향상되었다.

[0227]

본문에 기재된 다양한 실시예는 단지 예시일뿐이며 본 발명의 범위를 한정하려는 의도가 아님을 이해해야 한다. 따라서, 본 분야 당업자에게 자명한 것과 같이, 청구하려는 본 발명은 본문에 기재된 구체적인 실시예 및 바람직한 실시예의 변경을 포함할 수 있다. 본문에 기재된 재료 및 구조에서의 다수는 본 발명의 사상을 벗어나지 않는 한, 기타 재료 및 구조로 대체하여 사용할 수 있다. 본 발명이 작용되는 이유에 대한 다양한 이론은 한정하려는 의도가 아님을 이해해야 한다.

도면

도면1



도면2

