(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0143610
(43) 공개일자 2024년10월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 1/12 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
H10K 50/11 (2023.01) *H10K 50/15* (2023.01)
H10K 50/16 (2023.01) *H10K 85/30* (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07F 1/12 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
(21) 출원번호 10-2023-0057262
(22) 출원일자 2023년05월02일
심사청구일자 없음
(30) 우선권주장
1020230039109 2023년03월24일 대한민국(KR)

(71) 출원인
삼성전자주식회사
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)
이화여자대학교 산학협력단
서울특별시 서대문구 이화여대길 52 (대현동, 이화여자대학교)
(72) 발명자
김황석
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 ,연구1동3층 (매탄동,전자소재연구단지)
유영민
서울특별시 서초구 남부순환로 2343-10, 505동 404호 (서초동, 서초3차대림이편한세상)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

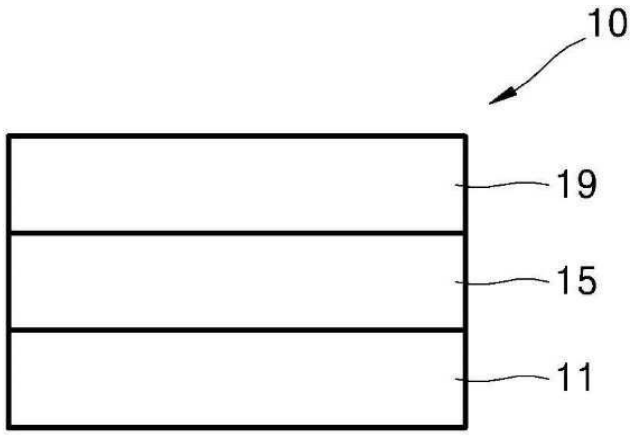
(54) 발명의 명칭 **유기금속 금 착화합물을 포함하는 유기발광소자**

(57) 요 약

하기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 유기 발광 소자를 포함한 전자 장치가

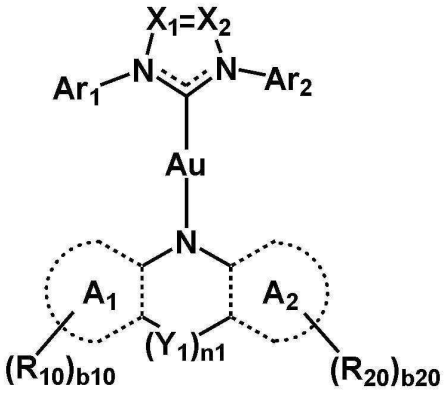
(뒷면에 계속)

대 표 도 - 도1



개시된다:

<화학식 1>



상기 화학식 1에 대한 설명은 발명의 설명을 참조한다.

(52) CPC특허분류
H10K 50/11 (2023.02)
H10K 50/15 (2023.02)
H10K 50/16 (2023.02)
H10K 85/371 (2023.02)

(72) 발명자
팸 중탄
서울특별시 서대문구 봉원사2길 34, 107호 (봉원동)
아불라 스리니바스
서울특별시 서대문구 봉원사2길 34, 305호 (봉원동)
김중혁
서울특별시 서초구 신반포로15길 4, 101동 201호 (반포동, 반포푸르지오아파트)

정용식
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동560삼성전자소재연구단지)
최현호
경기도 수원시 영통구 삼성로 130(매탄동)

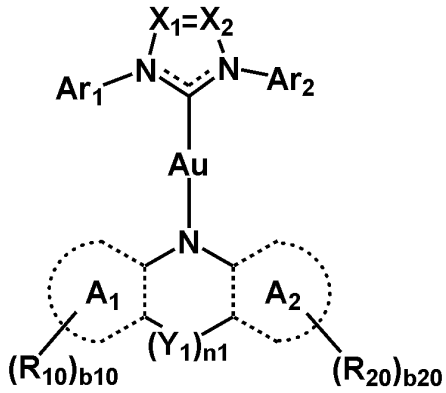
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

X_1은 N 또는 $C(R_1)$이고, X_2는 N 또는 $C(R_2)$이고,

X_1 및 X_2 중 적어도 하나가 N이고,

Y_1은 단일 결합, O, S, Se, $N(R_3)$, $C(R_3)(R_4)$, $Si(R_3)(R_4)$, $Ge(R_3)(R_4)$, $B(R_3)$, $P(R_3)$, $P(=O)(R_3)$, $S(=O)_2$ 또는 $C(=O)$이고,

n1은 0, 1 또는 2이고,

A_1 및 A_2는 서로 독립적으로, C_5-C_{30}카보시클릭 그룹 또는 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹이고,

Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이고,

R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-Ge(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-C(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 또는 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$이고,

R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20} 중 이웃한 2 이상이 선택적으로(optionally) 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}카

보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹을 형성하고,

b10 및 b20은 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 또는 10이고,

상기 치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환된 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-Ge(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{14})(Q_{15})$, $-B(Q_{16})(Q_{17})$, $-P(=O)(Q_{18})(Q_{19})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-Ge(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{24})(Q_{25})$, $-B(Q_{26})(Q_{27})$, $-P(=O)(Q_{28})(Q_{29})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-Ge(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{34})(Q_{35})$, $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 또는 $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$;이고,

상기 Q_1 내지 Q_9, Q_{11} 내지 Q_{19}, Q_{21} 내지 Q_{29} 및 Q_{31} 내지 Q_{39}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족

헤테로축합다환 그룹이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

A_1 및 A_2는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 시클로펜텐 그룹, 실롤 그룹, 저몰 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저몰 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저몰 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹 또는 피라진 그룹인, 유기 발광 소자.

청구항 3

제1항에 있어서,

Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로,

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기 또는 아자디벤조티오페닐기; 또는

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, 중수소-함유 C_1-C_{20}알킬기, 불화 C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥실기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)아다만타닐기, (C_1-C_{20}알킬)노르보네닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜테닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥세닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵테닐기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[1.1.1]펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.1.1]헥실기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.1]헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기,

피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기 또는 아자디벤조티오페닐기; 인, 유기금속 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20}은 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, $-SF_5$, C_1-C_{20}알킬기 또는 C_1-C_{20}알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, 중수소-함유 C_1-C_{20}알킬기, 불화 C_1-C_{20}알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기(노르보나닐기), 비시클로[2.2.2]옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥실기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)아다만타닐기, (C_1-C_{20}알킬)노르보네닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜테닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥세닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵테닐기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[1.1.1]펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.1.1]헥실기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.1]헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기(silolanyl), 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{20}알킬기 또는 C_1-C_{20}알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, 중수소-함유 C_1-C_{20}알킬기, 불화 C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥실기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)아다만타닐기, (C_1-C_{20}알킬)노르보네닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜테닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥세닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵테닐기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[1.1.1]펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.1.1]헥실기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.1]헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-

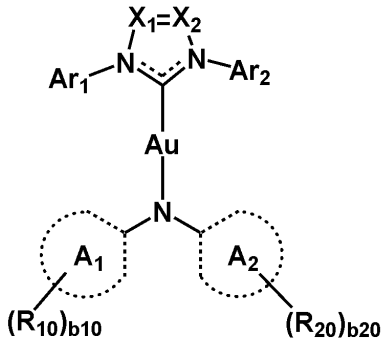
C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기 또는 아자디벤조티오페닐기; 또는

$-N(Q_1)(Q_2)$, $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$, $-Ge(Q_3)(Q_4)(Q_5)$, $-B(Q_6)(Q_7)$, $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$ 또는 $-P(Q_8)(Q_9)$;인, 유기금속 화합물.

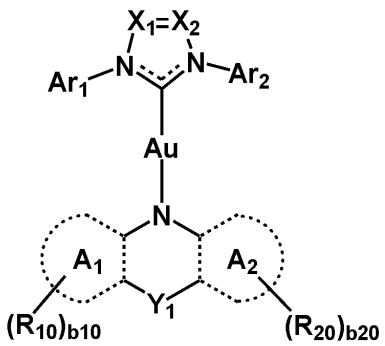
청구항 5

제1항에 있어서,

하기 화학식 11-1 또는 11-2로 표시된, 유기금속 화합물:



11-1



11-2

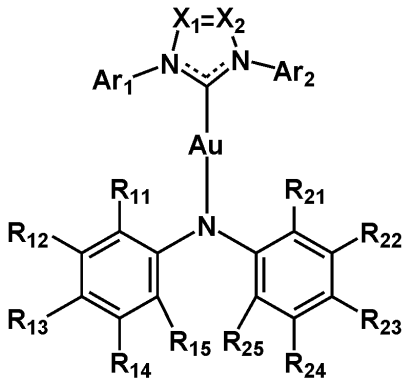
상기 화학식 11-1 및 11-2 중,

X_1, X_2, Y_1, A_1, A_2, Ar_1, Ar_2, R_{10}, R_{20}, b10 및 b20에 대한 설명은 각각 제1항을 참조한다.

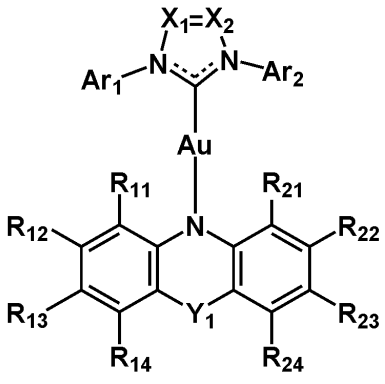
청구항 6

제1항에 있어서,

하기 화학식 21-1 또는 21-2로 표시된, 유기금속 화합물:



21-1



21-2

상기 화학식 21-1 및 21-2 중,

X_1, X_2, Y_1, Ar_1 및 Ar_2에 대한 설명은 각각 제1항을 참조하고,

R_{11} 내지 R_{15}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R_{10}에 대한 설명을 참조하고,

R_{21} 내지 R_{25}에 대한 설명은 서로 독립적으로, 제1항 중 R_{20}에 대한 설명을 참조한다.

청구항 7

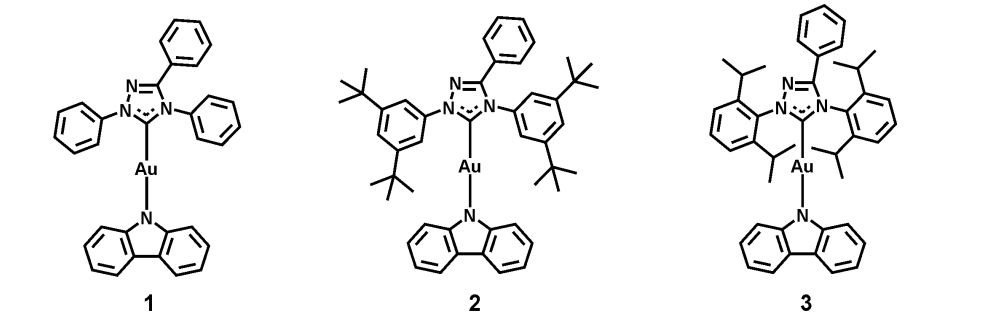
제1항에 있어서,

상기 유기금속 화합물이 상기 화학식 1 중 Au 이외의 금속 원자를 포함하지 않는, 유기금속 화합물.

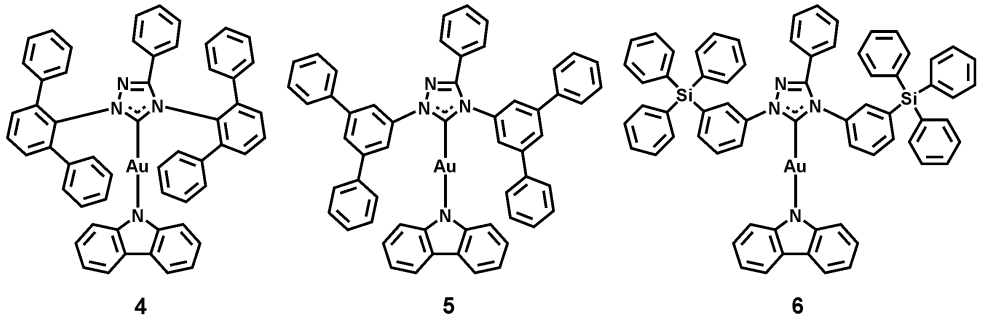
청구항 8

제1항에 있어서,

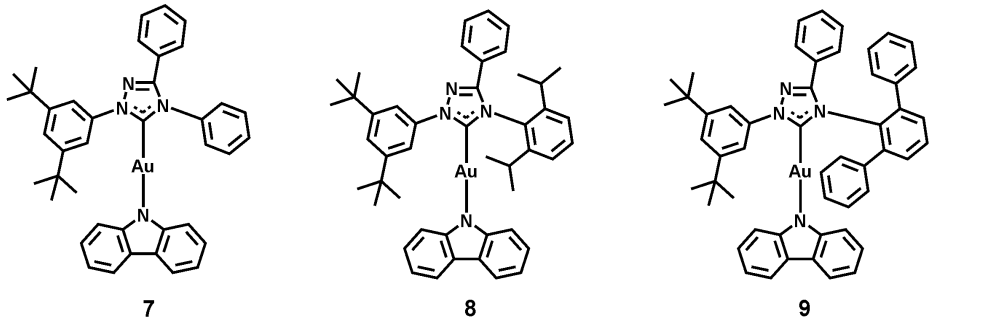
하기 화합물 1 내지 131 중 어느 하나인, 유기금속 화합물:



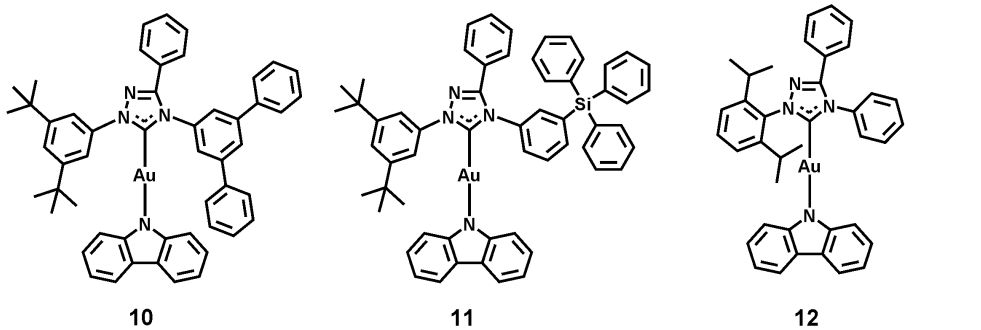
1 2 3



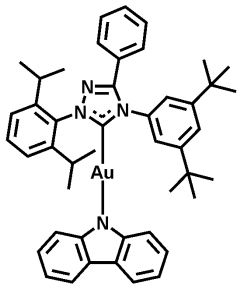
4 5 6



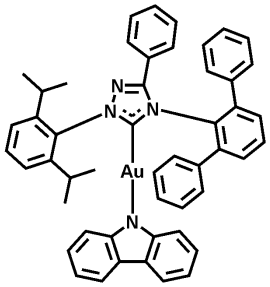
7 8 9



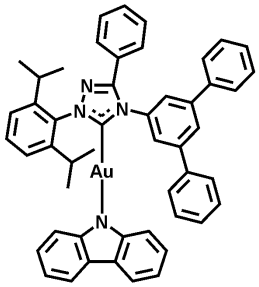
10 11 12



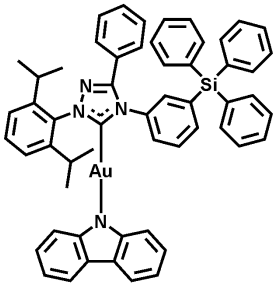
13



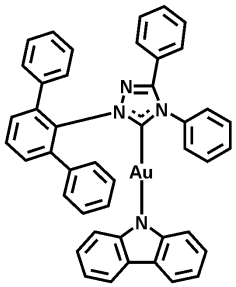
14



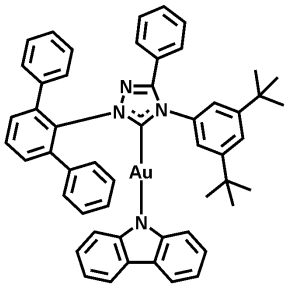
15



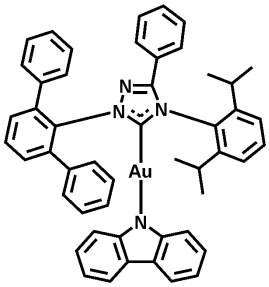
16



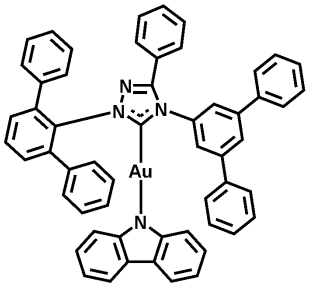
17



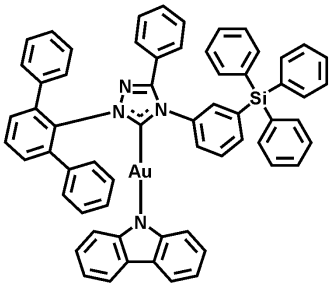
18



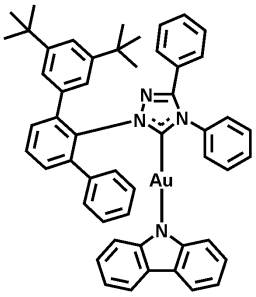
19



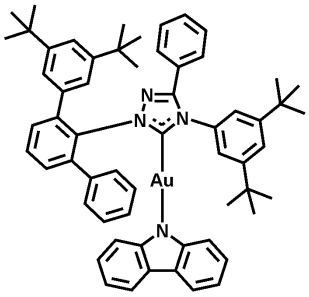
20



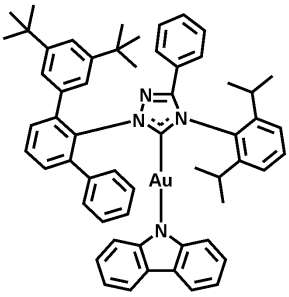
21



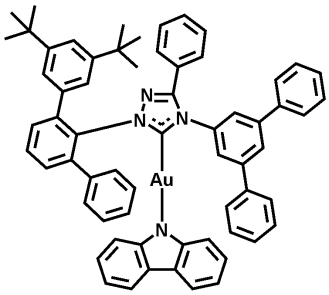
22



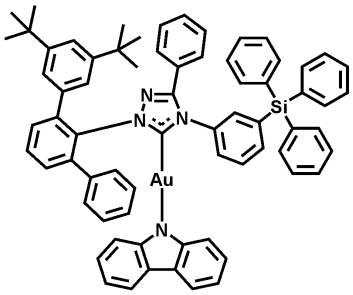
23



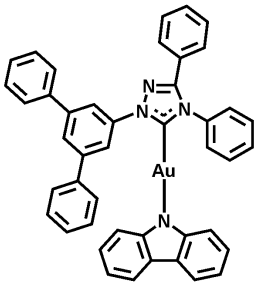
24



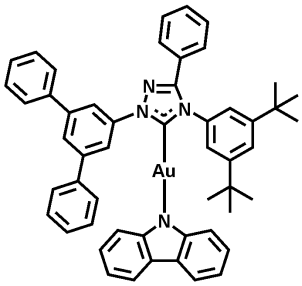
25



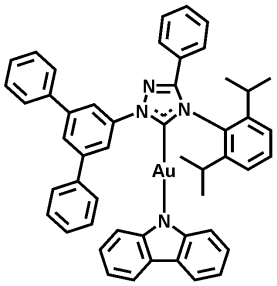
26



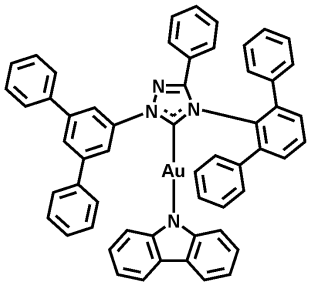
27



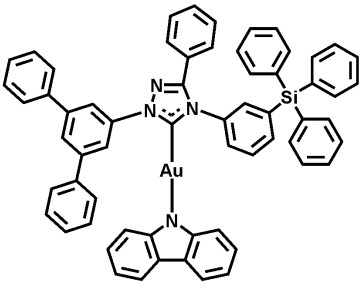
28



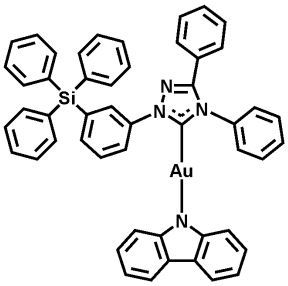
29



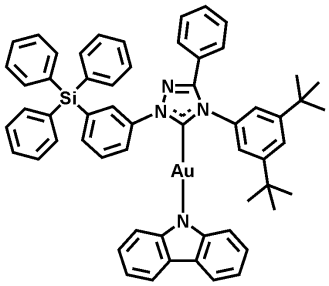
30



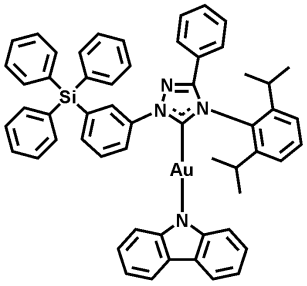
31



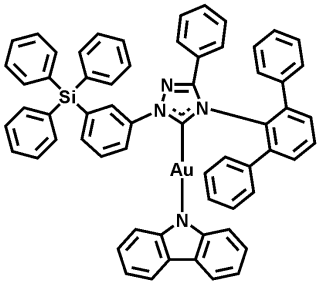
32



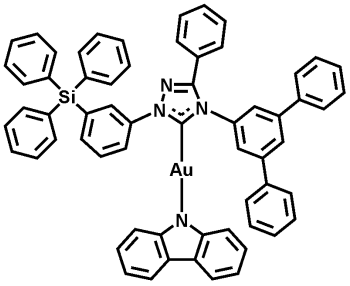
33



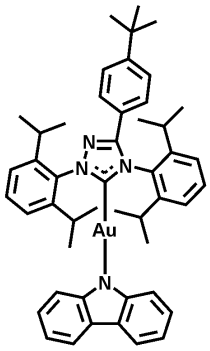
34



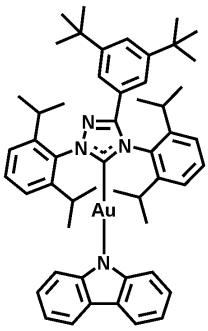
35



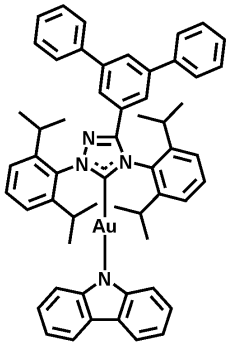
36



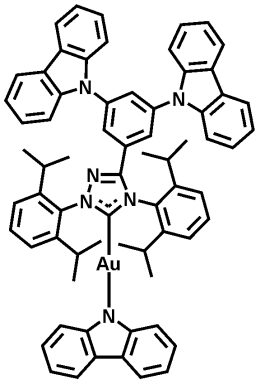
37



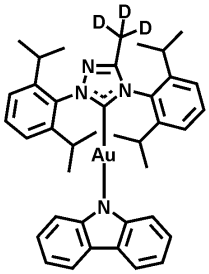
38



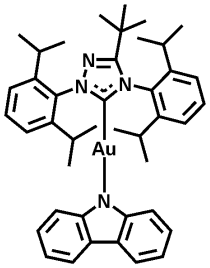
39



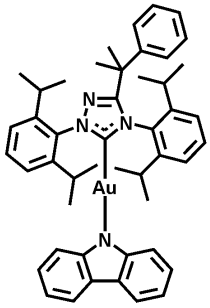
40



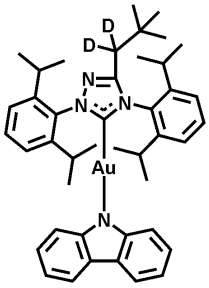
41



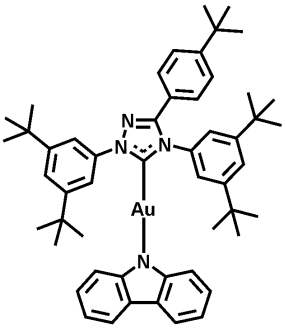
42



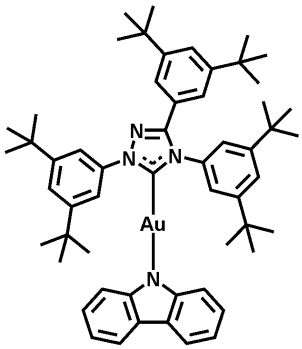
43



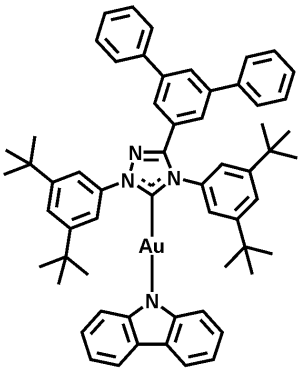
44



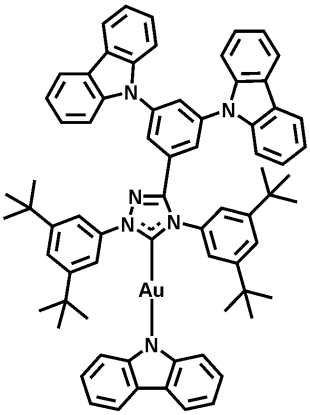
45



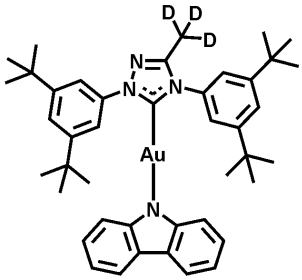
46



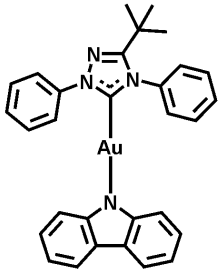
47



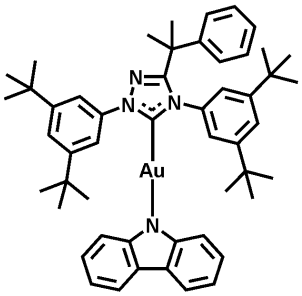
48



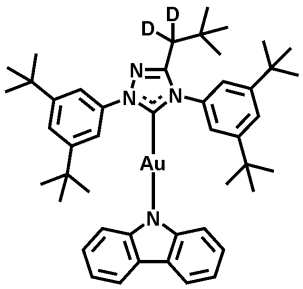
49



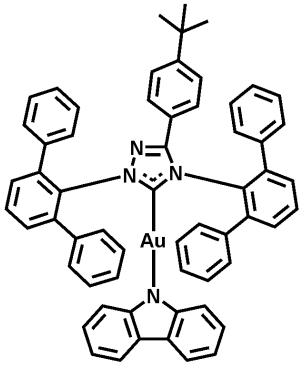
50



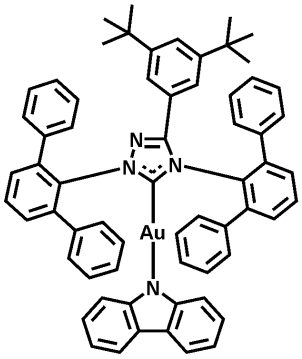
51



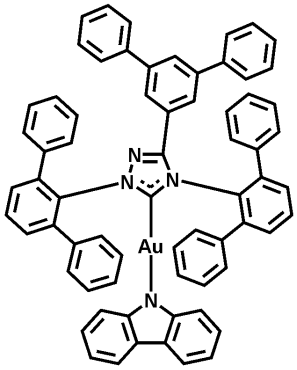
52



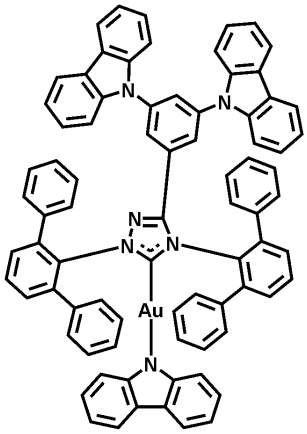
53



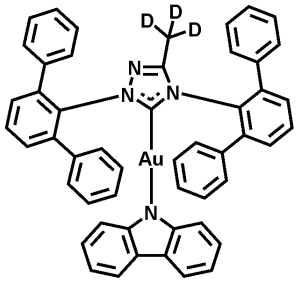
54



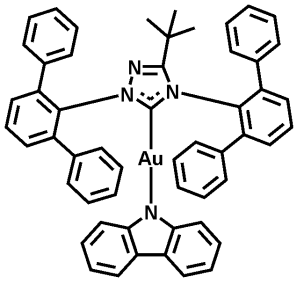
55



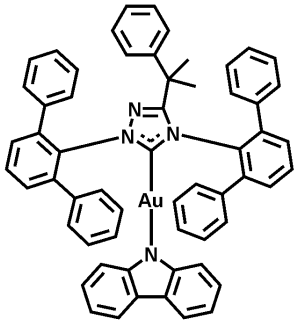
56



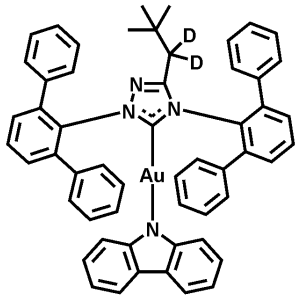
57



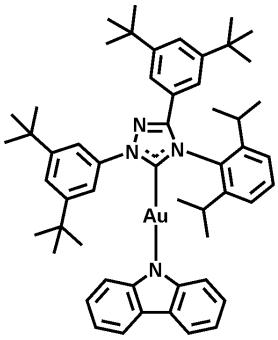
58



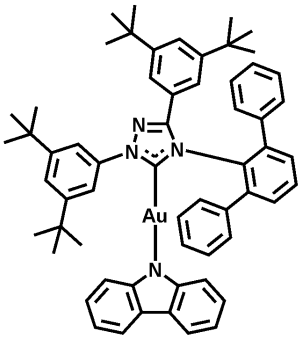
59



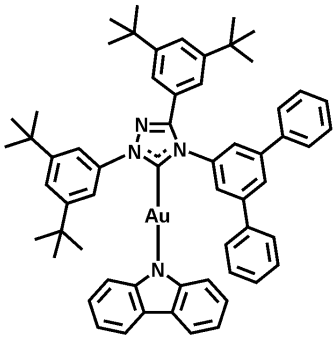
60



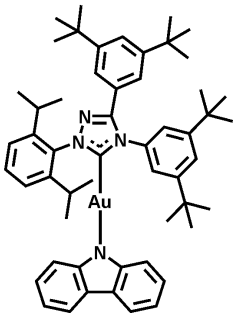
61



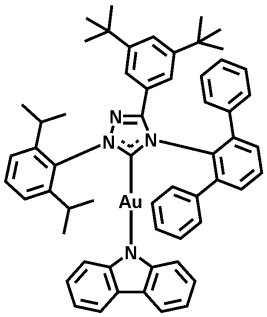
62



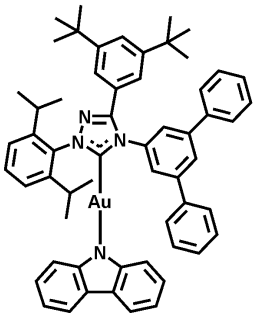
63



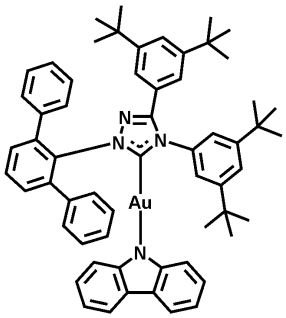
64



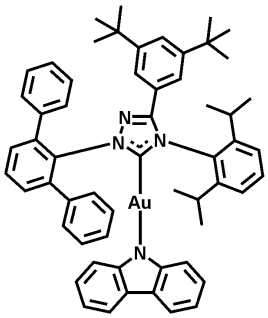
65



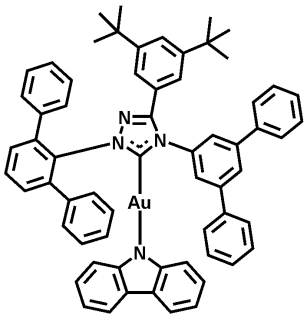
66



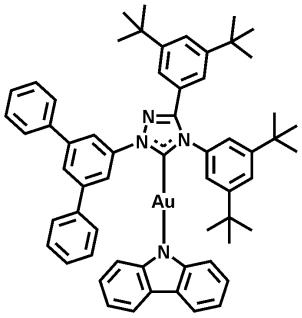
67



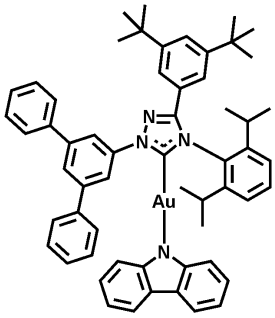
68



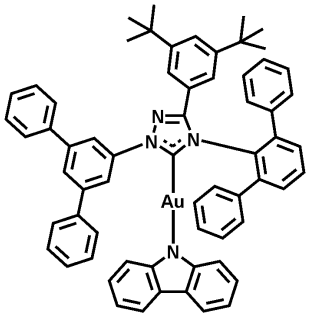
69



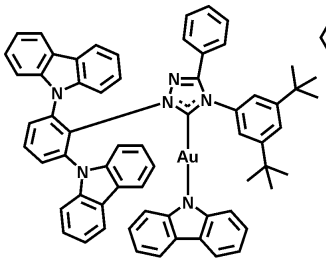
70



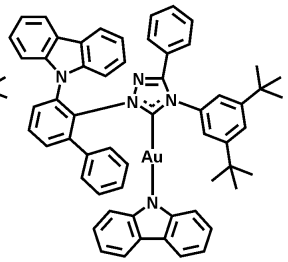
71



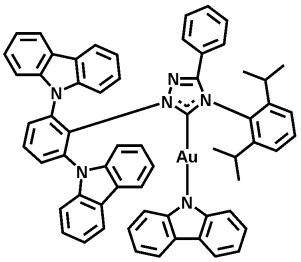
72



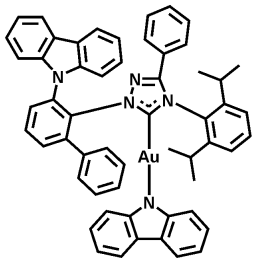
73



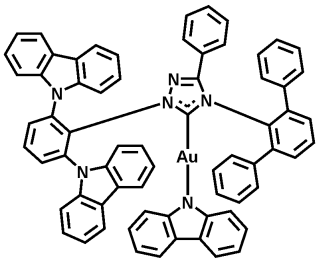
74



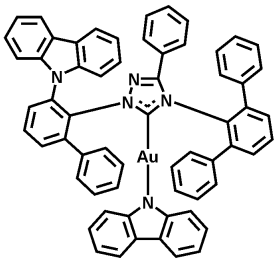
75



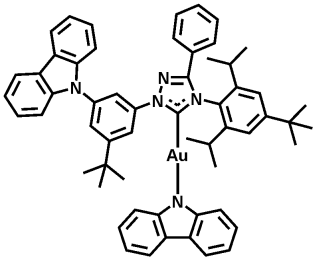
76



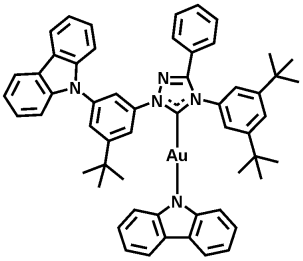
77



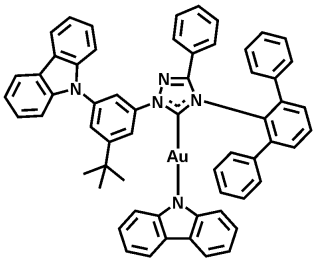
78



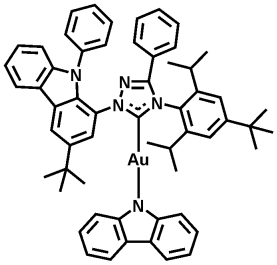
79



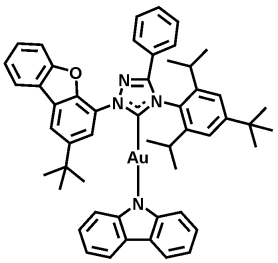
80



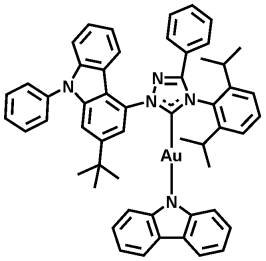
81



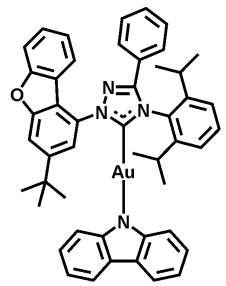
82



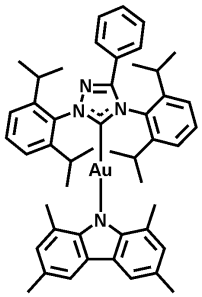
83



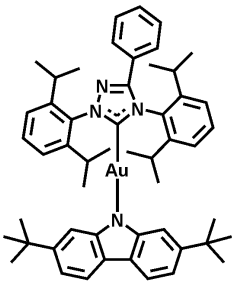
84



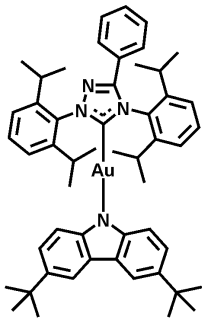
85



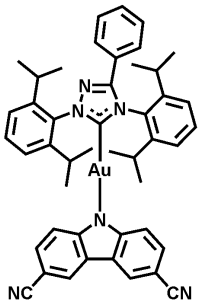
86



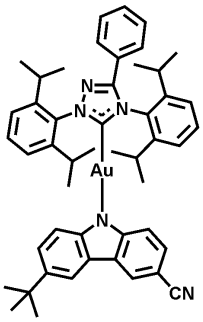
87



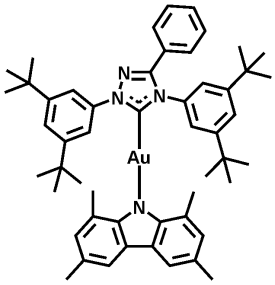
88



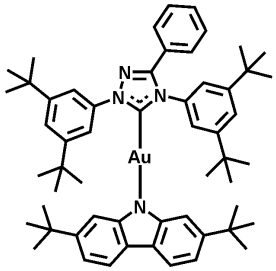
89



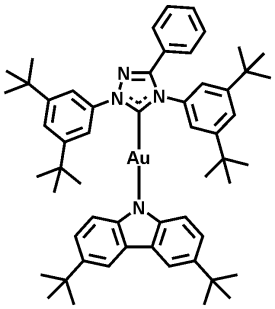
90



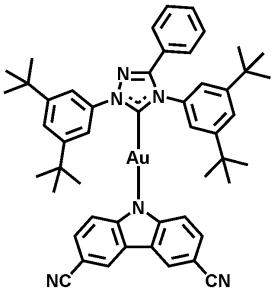
91



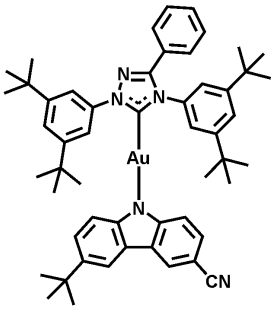
92



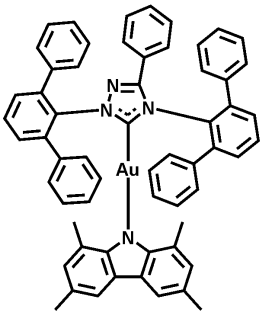
93



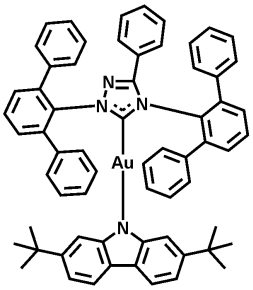
94



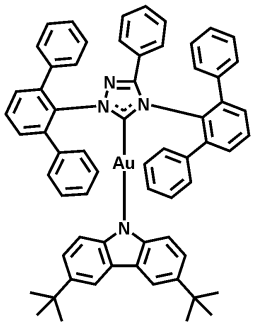
95



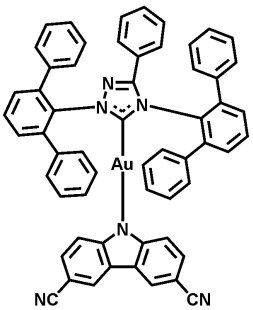
96



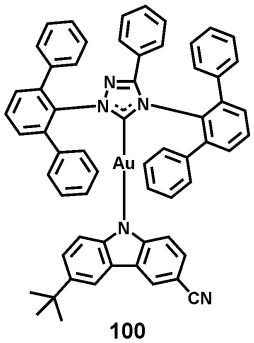
97



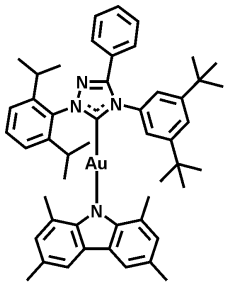
98



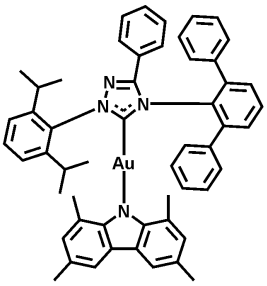
99



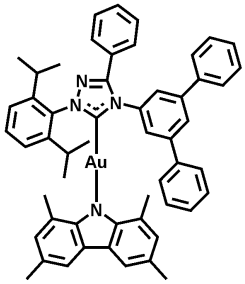
100



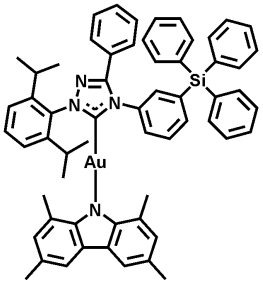
101



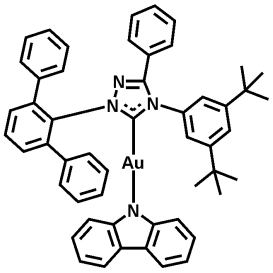
102



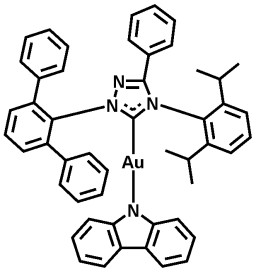
103



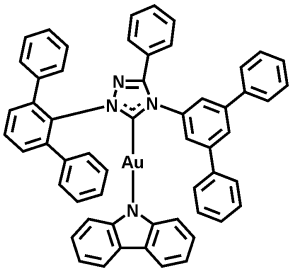
104



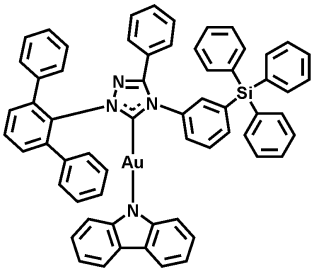
105



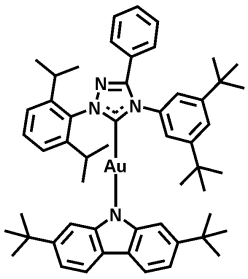
106



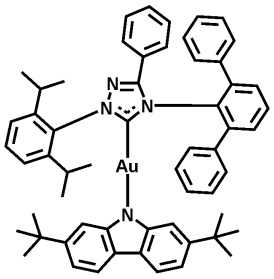
107



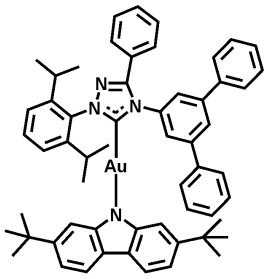
108



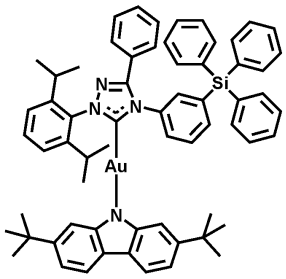
109



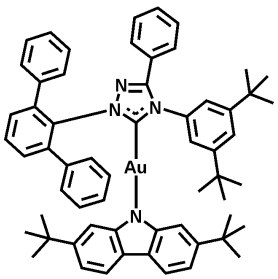
110



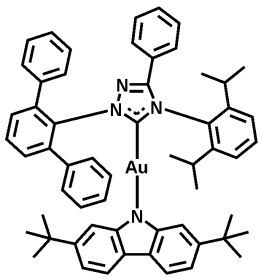
111



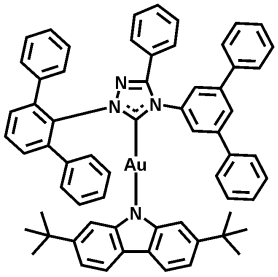
112



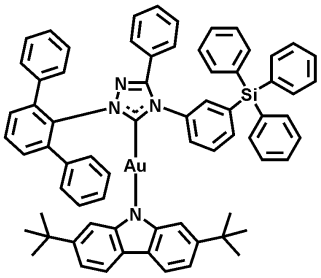
113



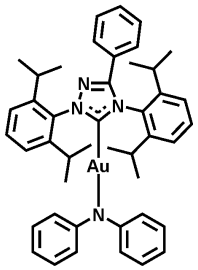
114



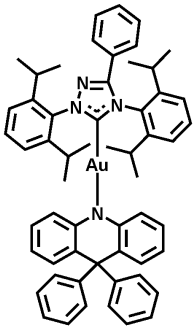
115



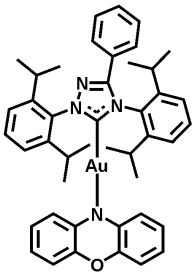
116



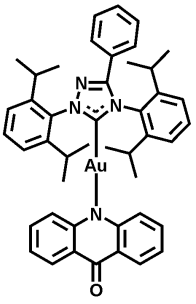
117



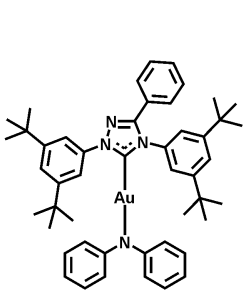
118



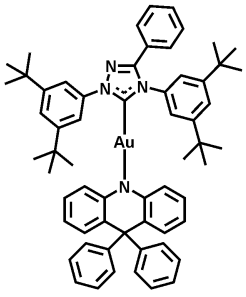
119



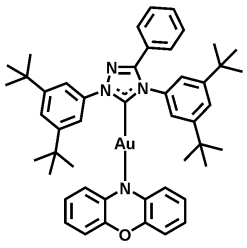
120



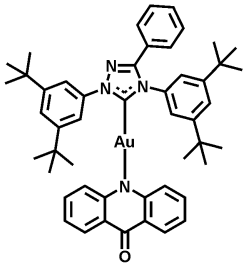
121



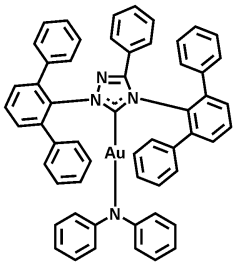
122



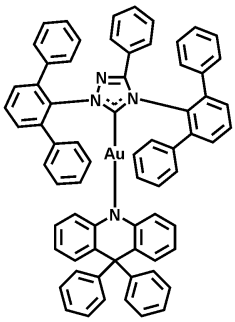
123



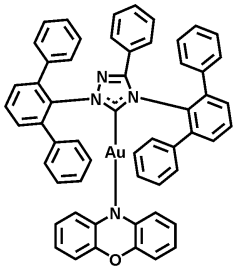
124



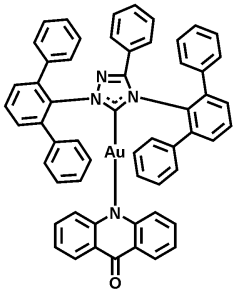
125



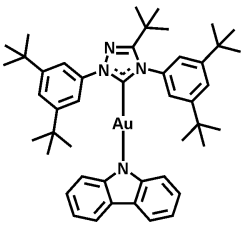
126



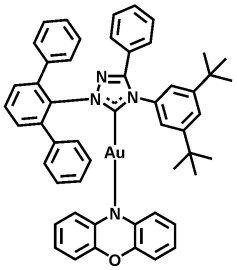
127



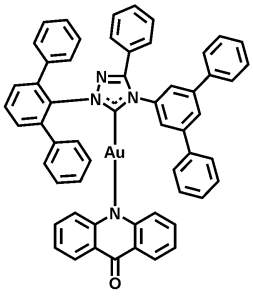
128



129



130



131

.

청구항 9

제1전극;

제2전극; 및

상기 제1전극 및 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고,

상기 유기층이 제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 유기금속 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 유기층은 발광층을 포함하고,

상기 발광층이 상기 유기금속 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 11

제9항에 있어서,

상기 발광층은 최대 발광 파장이 400 nm 내지 490 nm인 청색광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 12

제9항에 있어서,

상기 발광층은 호스트, 센서타이저 및 에미터를 포함하고,

상기 센서타이저가 상기 유기금속 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 호스트가 정공 수송성 호스트, 전자 수송성 호스트, 바이폴라(bipolar) 호스트 또는 이들의 조합을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 14

제12항에 있어서,

상기 에미터가 형광 에미터 또는 지연 형광 에미터인, 유기 발광 소자.

청구항 15

제12항에 있어서,

상기 에미터는 4환 이상의 카보시클릭 그룹 또는 4환 이상의 헤테로시클릭 그룹을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 16

제12항에 있어서,

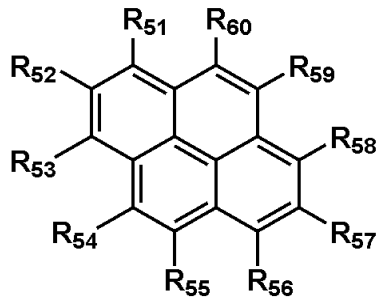
상기 에미터는 금속을 포함하지 않은 유기 화합물인, 유기 발광 소자.

청구항 17

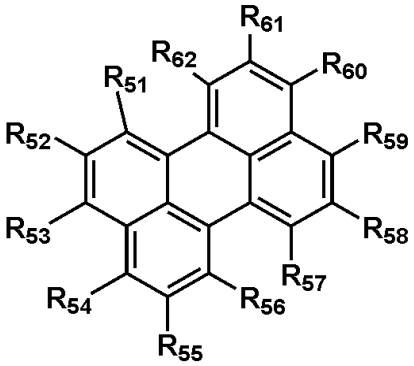
제12항에 있어서,

상기 에미터는 하기 화학식 51 내지 54 중 어느 하나로 표시된 화합물인, 유기 발광 소자:

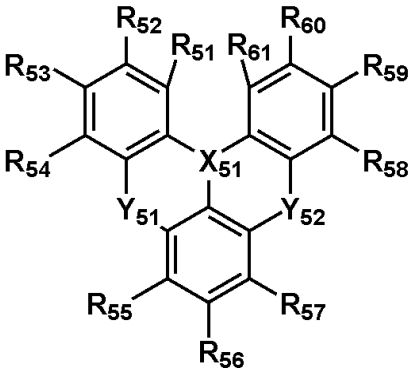
<화학식 51>



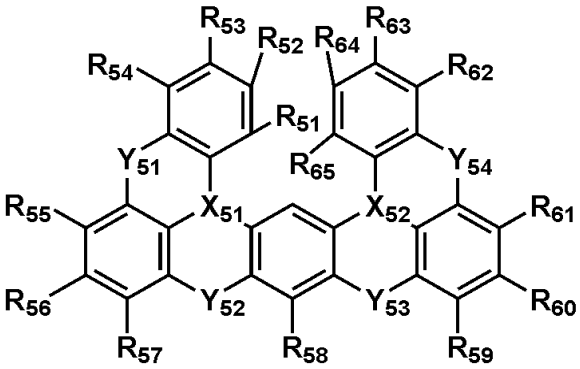
<화학식 52>



<화학식 53>



<화학식 54>



상기 화학식 51 내지 54 중,

X_{51} 및 X_{52}는 서로 독립적으로, N 또는 B이고,

Y_{51}은 단일 결합, O, S, Se, $N(R_{501})$, $B(R_{501})$, $C(R_{501})(R_{502})$ 또는 $Si(R_{501})(R_{502})$이고,

Y_{52}는 단일 결합, O, S, Se, $N(R_{503})$, $B(R_{503})$, $C(R_{503})(R_{504})$ 또는 $Si(R_{503})(R_{504})$이고,

Y_{53}은 단일 결합, O, S, Se, $N(R_{505})$, $B(R_{505})$, $C(R_{505})(R_{506})$ 또는 $Si(R_{505})(R_{506})$이고,

Y_{54}는 단일 결합, O, S, Se, $N(R_{507})$, $B(R_{507})$, $C(R_{507})(R_{508})$ 또는 $Si(R_{507})(R_{508})$이고,

R_{51} 내지 R_{65} 및 R_{501} 내지 R_{508}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시

클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-Ge(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-C(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 또는 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$이고,

R_{51} 내지 R_{65} 및 R_{501} 내지 R_{508} 중 이웃한 2 이상이 선택적으로(optionally) 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_5로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_5로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹을 형성하고,

상기 치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환된 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-Ge(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{14})(Q_{15})$, $-B(Q_{16})(Q_{17})$, $-P(=O)(Q_{18})(Q_{19})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-Ge(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{24})(Q_{25})$, $-B(Q_{26})(Q_{27})$, $-P(=O)(Q_{28})(Q_{29})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-Ge(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{34})(Q_{35})$, $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 또는 $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$;이고,

상기 Q_1 내지 Q_9, Q_{11} 내지 Q_{19}, Q_{21} 내지 Q_{29} 및 Q_{31} 내지 Q_{39}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

청구항 18

제12항에 있어서,

상기 호스트 및 상기 센서타이저는 실질적으로 발광하지 않고, 상기 에미터가 광을 방출하는, 유기 발광 소자.

청구항 19

제9항에 있어서,

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

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

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

상기 정공 수송 영역 및 상기 전자 수송 영역 중 적어도 하나가 상기 유기금속 화합물을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 20

제9항의 유기 발광 소자를 포함한 전자 장치.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 유기 발광 소자를 포함한 전자 장치가 제시된다.

배 경 기 술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서, 시야각, 응답 시간, 휘도, 구동 전압 및 응답 속도 등이 우수하고, 다색화가 가능하다.

[0003] 일예에 따르면, 유기 발광 소자는, 애노드, 캐소드 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층 포함할 수 있다. 상기 애노드와 발광층 사이에는 정공 수송 영역이 구비될 수 있고, 상기 발광층과 캐소드 사이에는 전자 수송 영역이 구비될 수 있다. 상기 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자는 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

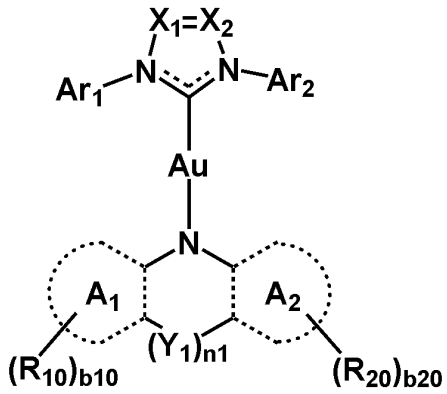
해결하려는 과제

[0004] 유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함한 전자 장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

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

[0006] <화학식 1>

[0007] 

[0008] 상기 화학식 1 중,

[0009] X_1은 N 또는 $C(R_1)$이고, X_2는 N 또는 $C(R_2)$이고,

[0010] X_1 및 X_2 중 적어도 하나가 N이고,

[0011] Y_1은 단일 결합, O, S, Se, $N(R_3)$, $C(R_3)(R_4)$, $Si(R_3)(R_4)$, $Ge(R_3)(R_4)$, $B(R_3)$, $P(R_3)$, $P(=O)(R_3)$, $S(=O)_2$ 또는 $C(=O)$이고,

[0012] n1은 0, 1 또는 2이고,

[0013] A_1 및 A_2는 서로 독립적으로, C_5-C_{30}카보시클릭 그룹 또는 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹이고,

[0014] Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이고,

[0015] R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-Ge(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-C(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 또는 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$이고,

[0016] R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20} 중 이웃한 2 이상이 선택적으로(optionally) 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹을 형성하고,

[0017] b10 및 b20은 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 또는 10이고,

[0018] 상기 치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환된 C_2-C_{60}알케닐

기, 치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환된 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0019] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

[0020] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-Ge(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{14})(Q_{15})$, $-B(Q_{16})(Q_{17})$, $-P(=O)(Q_{18})(Q_{19})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

[0021] C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0022] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-Ge(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{24})(Q_{25})$, $-B(Q_{26})(Q_{27})$, $-P(=O)(Q_{28})(Q_{29})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

[0023] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-Ge(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{34})(Q_{35})$, $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 또는 $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$;이고,

[0024] 상기 Q_1 내지 Q_9, Q_{11} 내지 Q_{19}, Q_{21} 내지 Q_{29} 및 Q_{31} 내지 Q_{39}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

[0025] 다른 측면에 따르면, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

[0026] 다른 측면에 따르면, 상기 유기 발광 소자를 포함한 전자 장치가 제공된다.

발명의 효과

[0027] 상기 유기금속 화합물은 우수한 발광 특성 및 전하 이동 특성을 가지므로, 상기 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 저구동전압, 고효율, 및 장수명의 특성을 가질 수 있다. 따라서, 상기 유기금속 화합물을 이용하여 고품위의 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.

[0028] 또한, 상기 유기 발광 소자를 포함하여 고품위의 전자 장치를 제공할 수 있다.

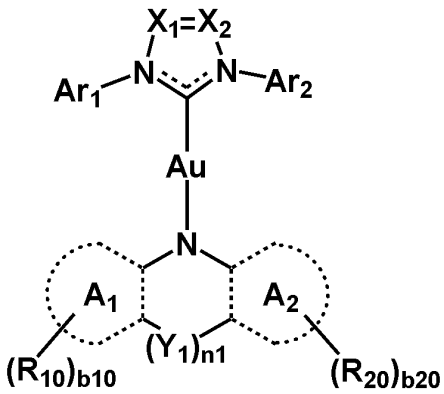
도면의 간단한 설명

[0029] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0030] 일 구현예에 따른 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0031] <화학식 1>

[0032] 

[0033] 상기 화학식 1 중, X_1은 N 또는 C(R_1)이고, X_2는 N 또는 C(R_2)이고, X_1 및 X_2 중 적어도 하나가 N이다.

[0034] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중 X_1이 N일 수 있다.

[0035] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중 X_2이 N일 수 있다.

[0036] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 1 중 X_1 및 X_2 각각이 N일 수 있다.

[0037] 상기 화학식 1 중, Y_1은 단일 결합, O, S, Se, N(R_3), C(R_3)(R_4), Si(R_3)(R_4), Ge(R_3)(R_4), B(R_3), P(R_3), P(=O)(R_3), S(=O)$_2$ 또는 C(=O)이다.

[0038] 일 구현예를 따르면, Y_1은 단일 결합, O, S, N(R_3), C(R_3)(R_4) 또는 C(=O)이다.

[0039] 상기 화학식 1 중, n1은 0, 1 또는 2이다.

[0040] 일 구현예를 따르면, n1은 0 또는 1이다. 상기 n1이 0일 때, 상기 화학식 1 중 Y_1이 존재하지 않는다.

[0041] 상기 화학식 1 중, A_1 및 A_2는 서로 독립적으로, C_5-C_{30}카보시클릭 그룹 또는 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹이다.

[0042] 일 구현예를 따르면, A_1 및 A_2는 서로 독립적으로, (i) 제1고리, (ii) 제2고리, (iii) 2 이상의 제1고리가 서로 축합된 축합환, (iv) 2 이상의 제2고리가 서로 축합된 축합환, (v) 1 이상의 제1고리와 1 이상의 제2고리가 서로 축합된 축합환, 또는 (vi) 상기 화학식 1A로 표시된 그룹이고,

[0043] 상기 제1고리는 시클로펜탄 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 인덴 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 이속사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 이소티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹 또는 트리아자실롤 그룹이고,

[0044] 상기 제2고리는 아다만탄(adamantane) 그룹, 노르보르넨 그룹, 비시클로[1.1.1]펜탄 그룹, 비시클로[2.1.1]헥산 그룹, 비시클로[2.2.1]헵탄 그룹(노르보르난(norbornane) 그룹), 비시클로[2.2.2]옥탄 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헥센 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹 또는 트리아진 그룹일 수 있다.

[0045] 일 구현예를 따르면, A_1 및 A_2는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조저몰 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조저몰 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자인돌 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조저몰 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조저몰 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린 그룹, 아다만탄 그룹, 노르보르난 그룹 또는 노르보르넨 그룹일 수 있다.

[0046] 일 구현예를 따르면, A_1 및 A_2는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 페난트렌 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 시클로펜텐 그룹, 실롤 그룹, 저몰 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저몰 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 카바졸 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저몰 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그룹 또는 피라진 그룹일 수 있다.

[0047] 상기 화학식 1 중, Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

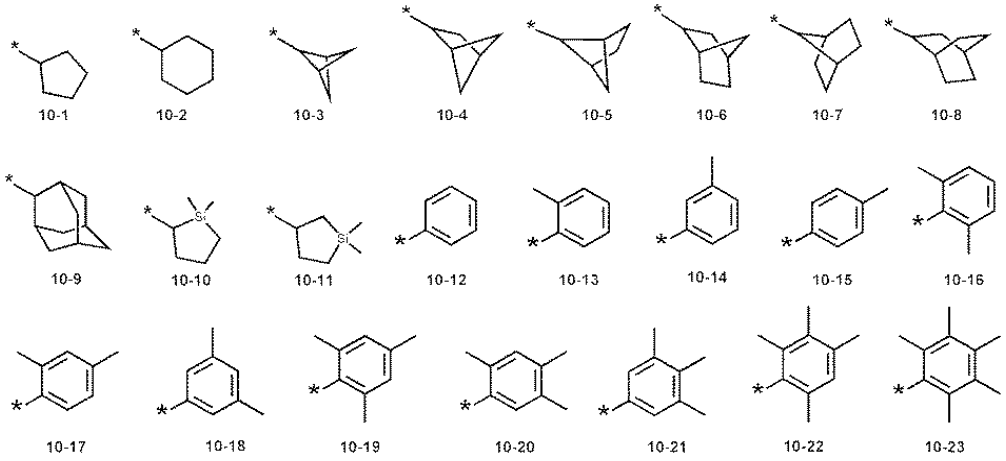
[0048] 일 구현예를 따르면, Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기 또는 아자디벤조티오페닐기; 또는

[0049] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, 중수소-함유 C_1-C_{20}알킬기, 불화 C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥실기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)아다만타닐기, (C_1-C_{20}알킬)노르보네닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜테닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥세닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵테닐기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[1.1.1]펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로

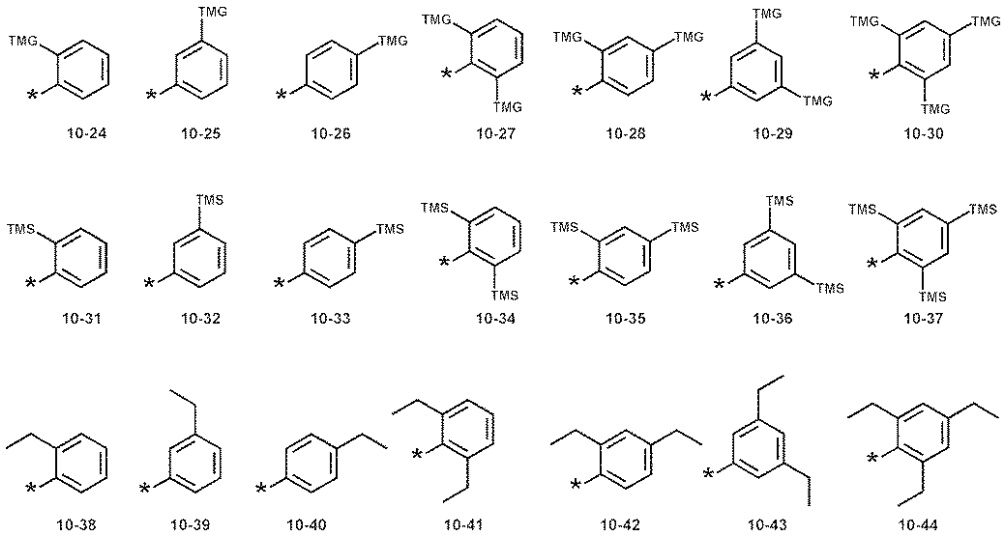
[2.1.1]헥실기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.1]헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기, 아자디벤조티오페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기 또는 아자디벤조티오페닐기; 일 수 있다.

[0050] 일 구현예를 따르면, Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로, 10-1 내지 10-154 및 10-201 내지 10-350 중 어느 하나로 표시되는 그룹일 수 있다:

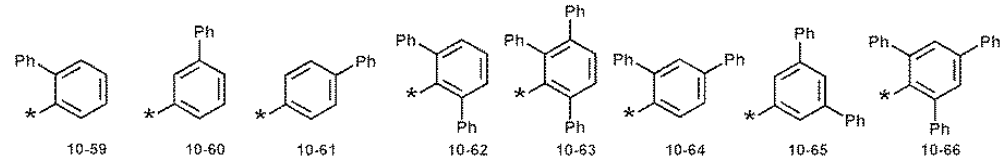
[0051]

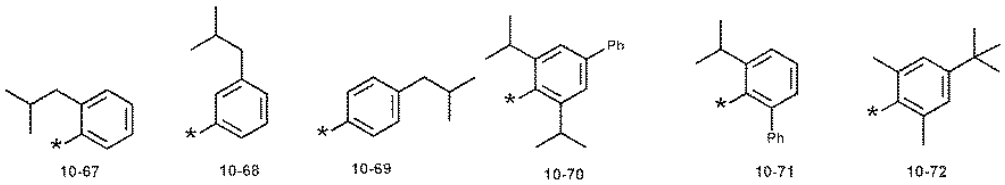


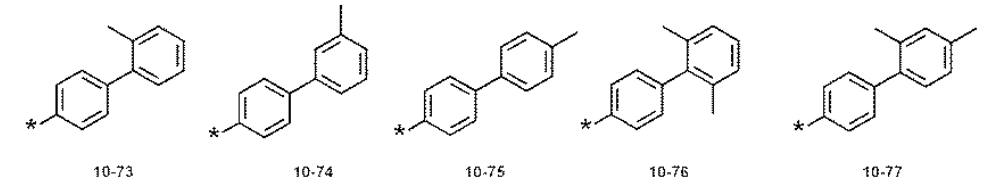
[0052]



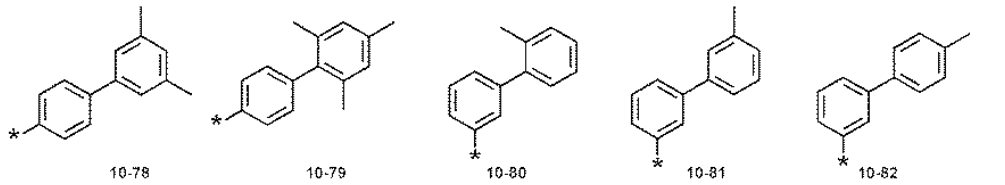
[0053]



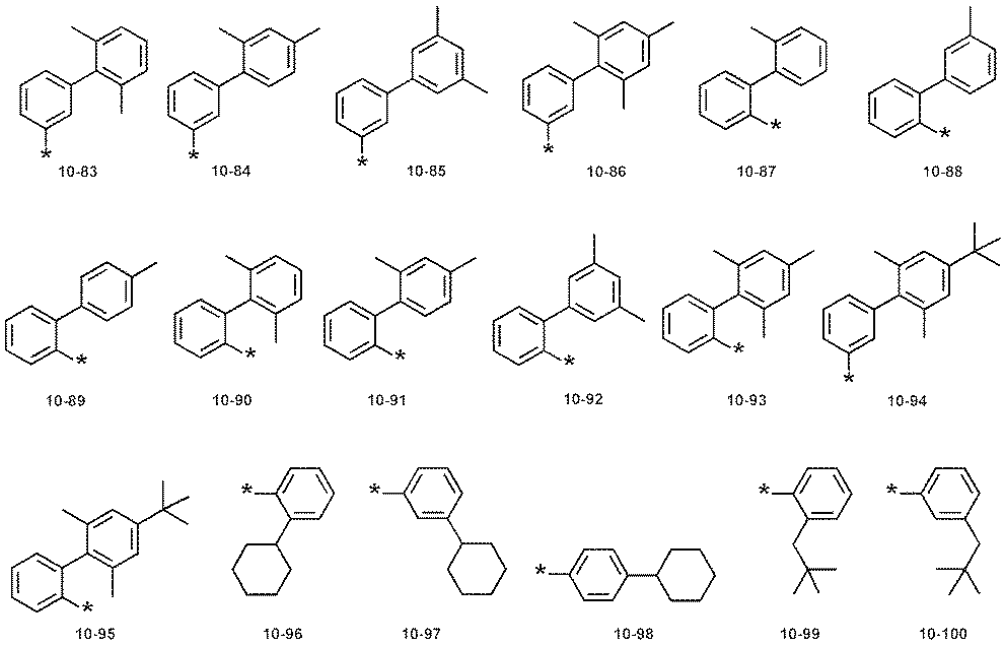




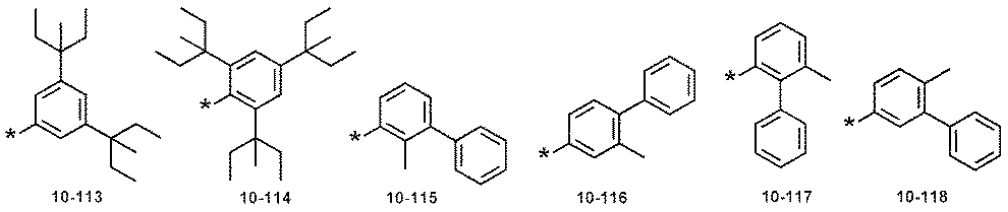
[0054]

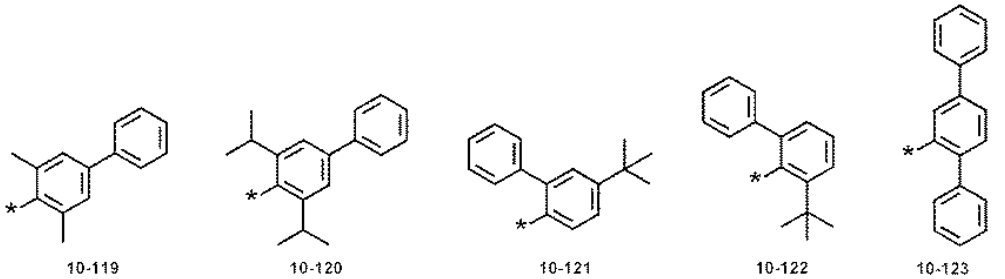


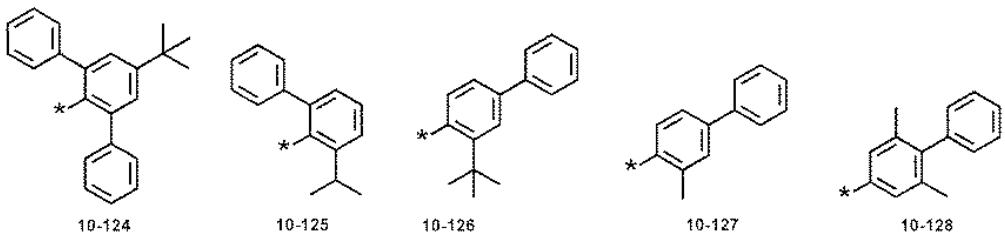
[0055]

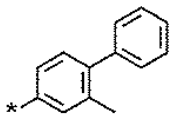

10-83
10-84
10-85
10-86
10-87
10-88
10-89
10-90
10-91
10-92
10-93
10-94
10-95
10-96
10-97
10-98
10-99
10-100
10-101
10-102
10-103
10-104
10-105
10-106
10-107
10-108
10-109
10-110
10-111
10-112

[0056]

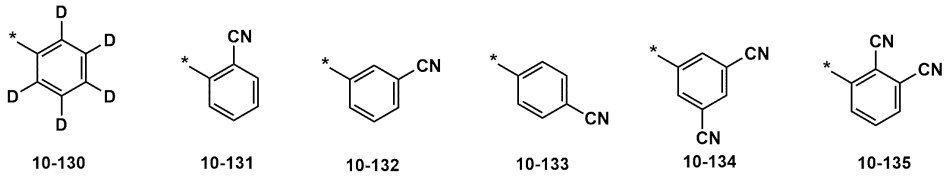

10-113
10-114
10-115
10-116
10-117
10-118

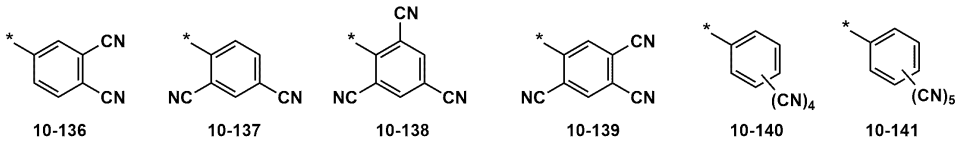


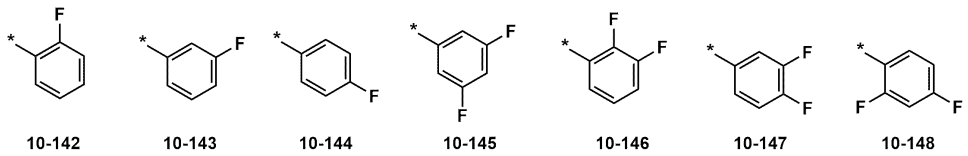


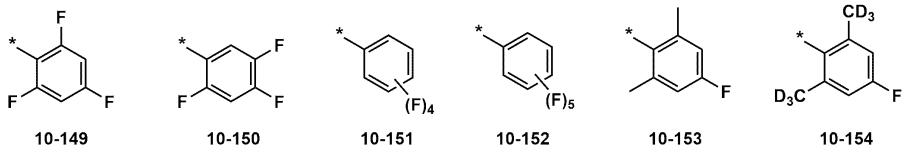


[0057]

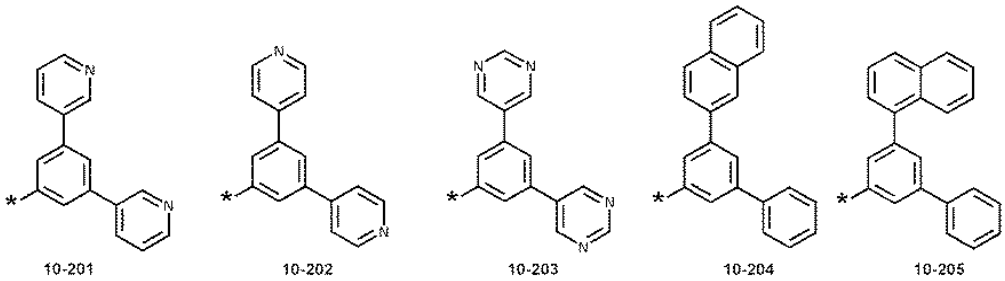


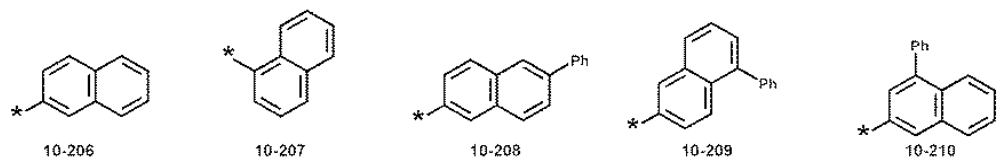




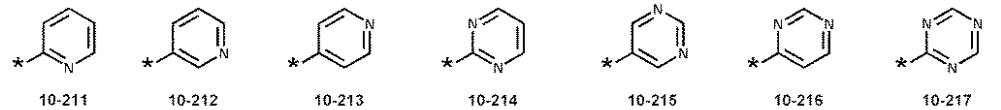


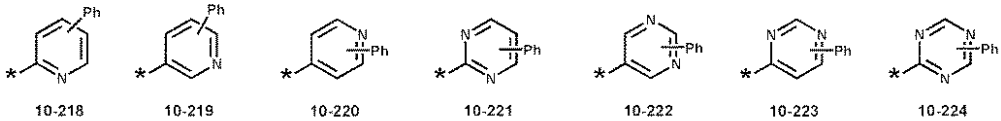
[0058]

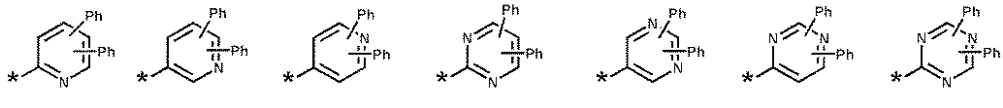


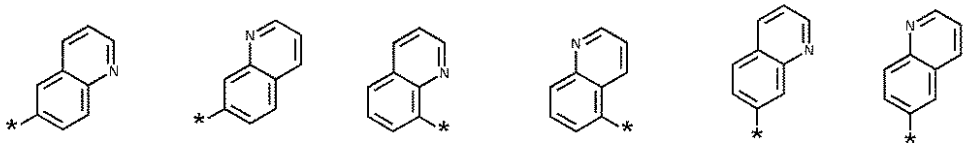


[0059]

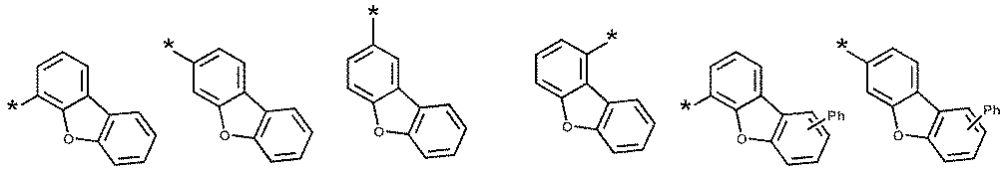

10-211 10-212 10-213 10-214 10-215 10-216 10-217

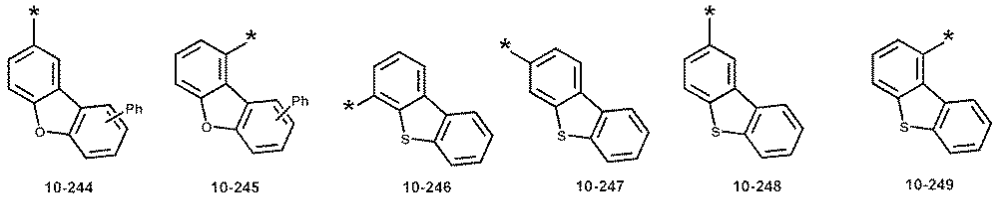

10-218 10-219 10-220 10-221 10-222 10-223 10-224

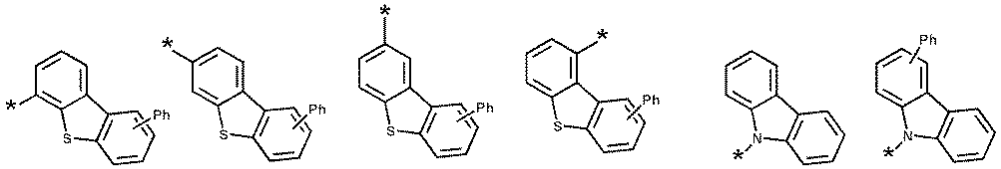

10-225 10-226 10-227 10-228 10-229 10-230 10-231


10-232 10-233 10-234 10-235 10-236 10-237

[0060]

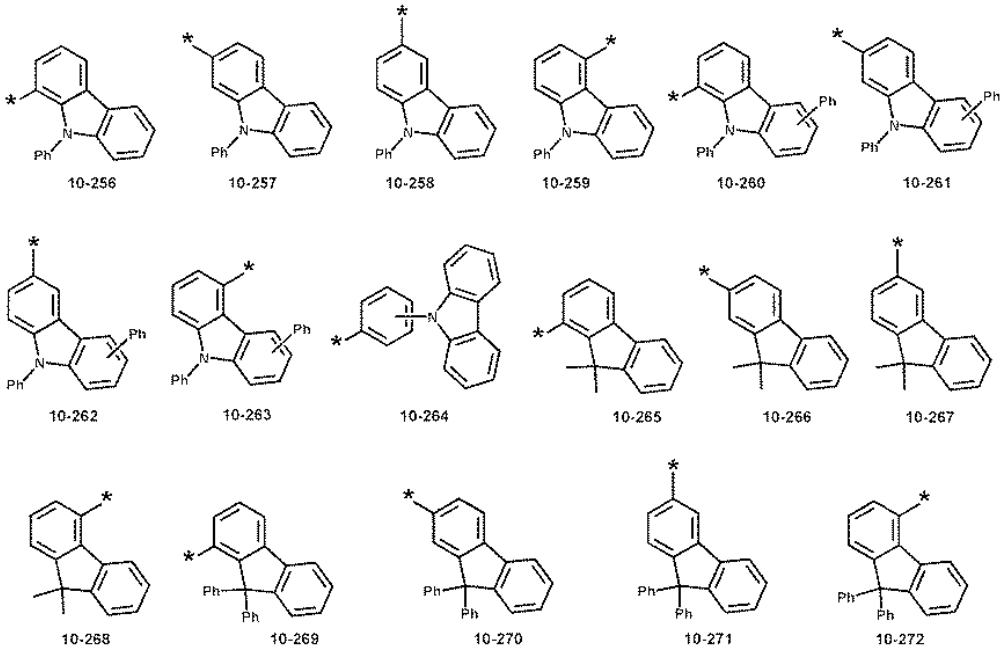

10-238 10-239 10-240 10-241 10-242 10-243


10-244 10-245 10-246 10-247 10-248 10-249

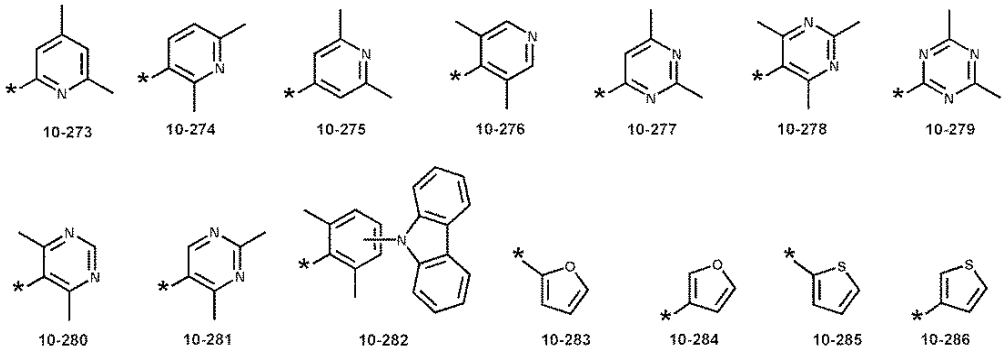

10-250 10-251 10-252 10-253 10-254 10-255

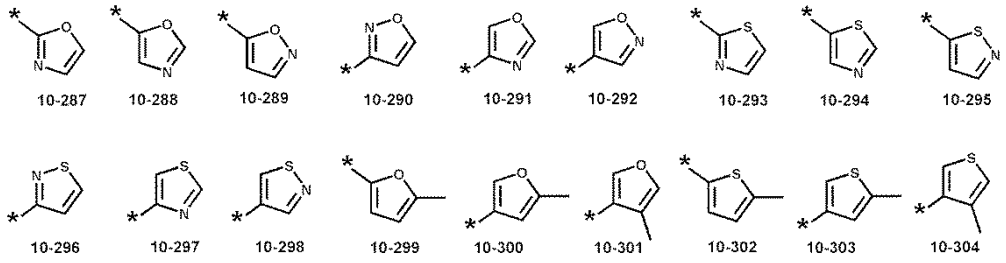
[0061]

[0062]

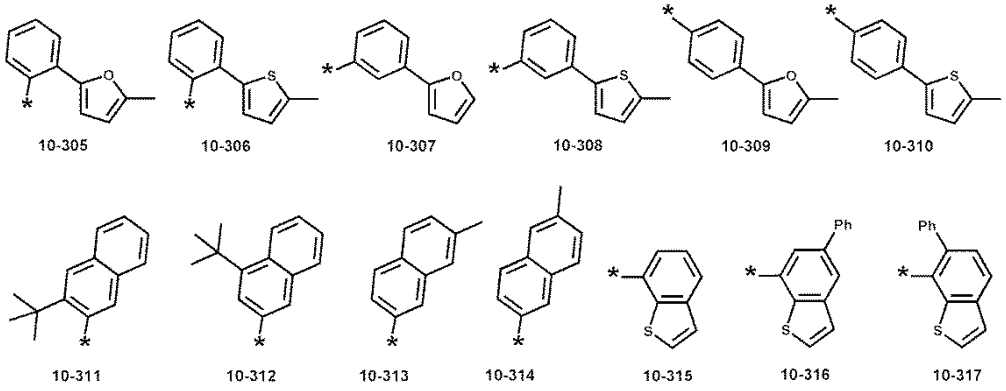


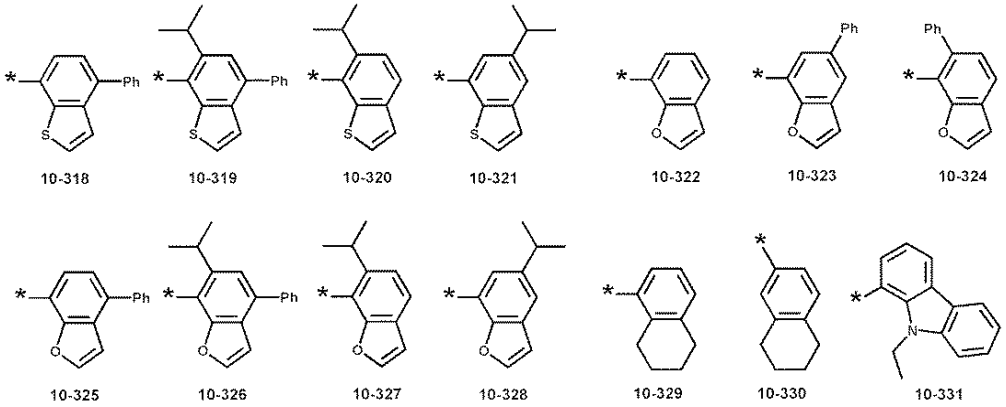
[0063]





[0064]



[0065] 

[0066]

[0067] 상기 화학식 10-1 내지 10-154 및 10-201 내지 10-350 중 *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고, Ph는 페닐기이고, TMS는 트리메틸실릴기이고, TMG는 트리메틸저밀기(trimethylgermyl)이다.

[0068] 상기 화학식 1 중, R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-Ge(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-C(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 또는 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$이다.

[0069] 일 구현예를 따르면, R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또

는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, $-SF_5$, C_1-C_{20}알킬기 또는 C_1-C_{20}알콕시기;

[0070] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, 중수소-함유 C_1-C_{20}알킬기, 불화 C_1-C_{20}알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기(노르보나닐기), 비시클로[2.2.2]옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥실기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)아다만타닐기, (C_1-C_{20}알킬)노르보네닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜테닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥세닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵테닐기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[1.1.1]펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.1.1]헥실기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.1]헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기(silolanyl), 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{20}알킬기 또는 C_1-C_{20}알콕시기;

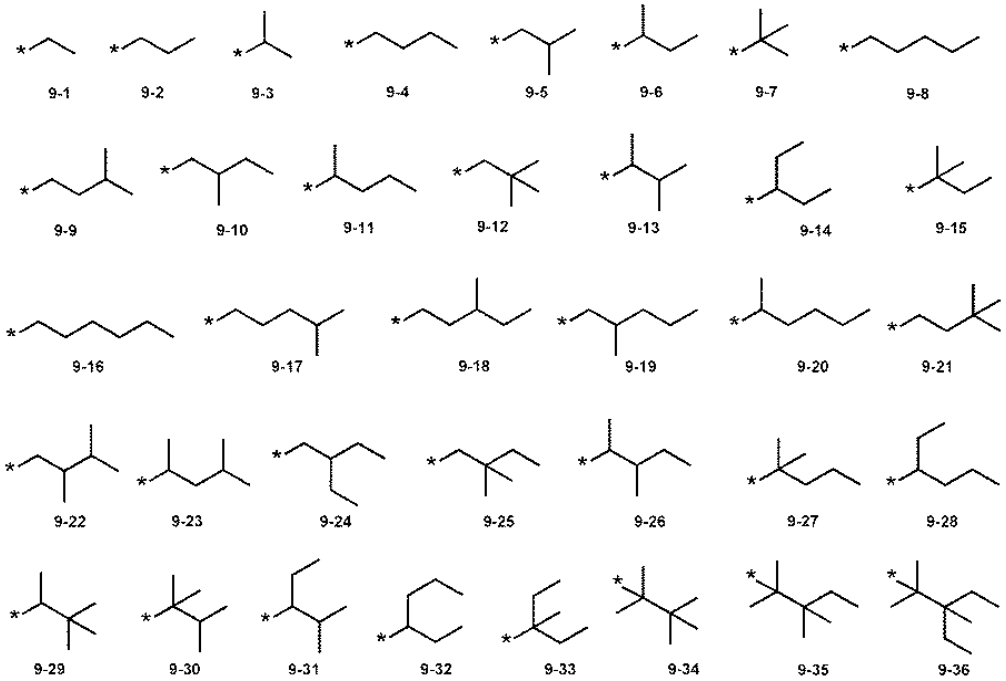
[0071] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, 중수소-함유 C_1-C_{20}알킬기, 불화 C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥실기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)시클로옥틸기, (C_1-C_{20}알킬)아다만타닐기, (C_1-C_{20}알킬)노르보네닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로펜테닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헥세닐기, (C_1-C_{20}알킬)시클로헵테닐기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[1.1.1]펜틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.1.1]헥실기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.1]헵틸기, (C_1-C_{20}알킬)비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기 또는 아자디벤조티오페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기, 노르보네닐기, 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기, 비시클로[2.1.1]헥실기, 비시클로[2.2.1]헵틸기, 비시클로[2.2.2]옥틸기, 실로라닐기, 페닐기, (C_1-C_{20}알킬)페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 1,2,3,4-테트라히드로나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오페닐기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오페닐기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 아자카바졸일기, 아자디벤조퓨라닐기 또는 아자디벤조티오페닐기; 또는

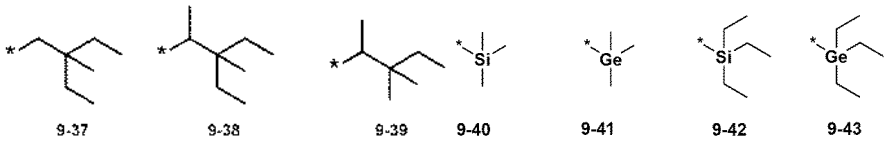
[0072] $-N(Q_1)(Q_2)$, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-Ge(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 또는 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$;일 수 있다.

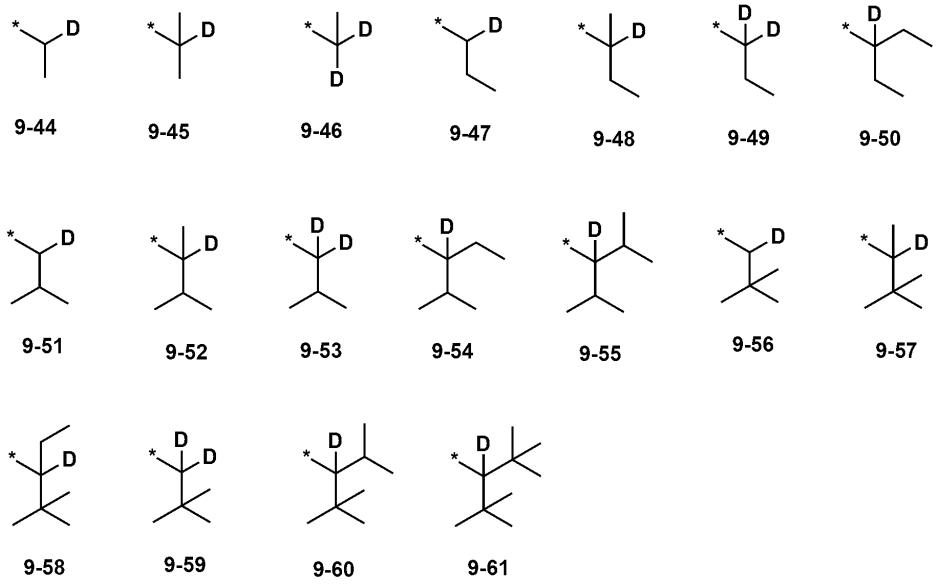
[0073] 일 구현예를 따르면, R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20}은 서로 독립적으로,

[0074] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기; 또는

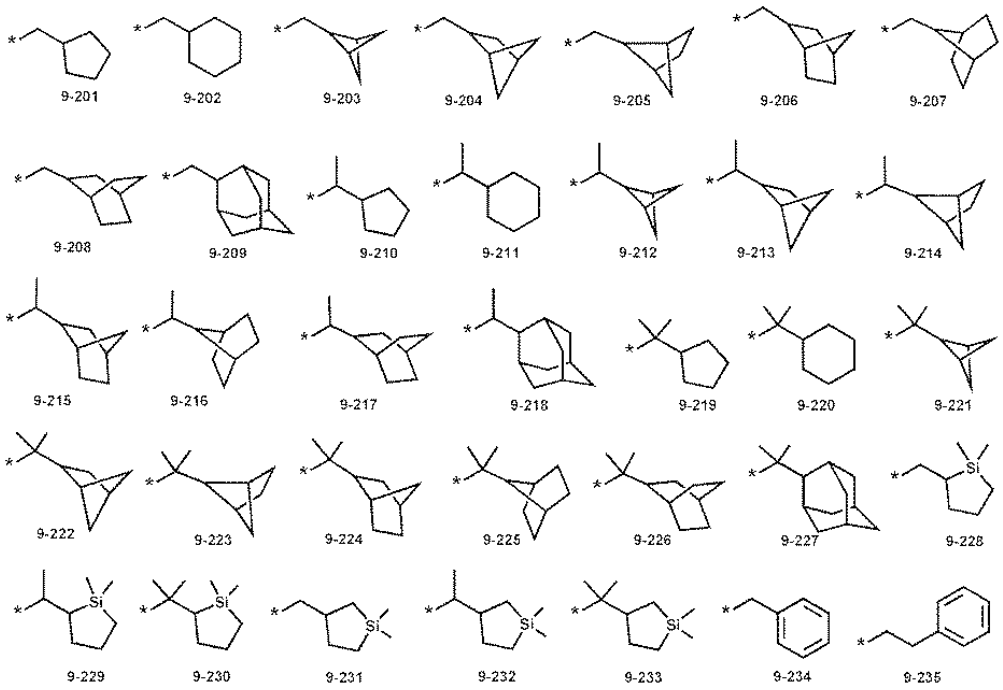
[0075] 화학식 9-1 내지 9-61, 9-201 내지 9-244, 10-1 내지 10-154 및 10-201 내지 10-350 중 어느 하나로 표시되는 그룹일 수 있다:

[0076] 

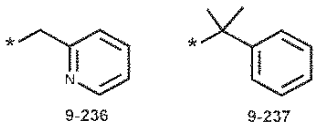
[0077] 

[0078] 

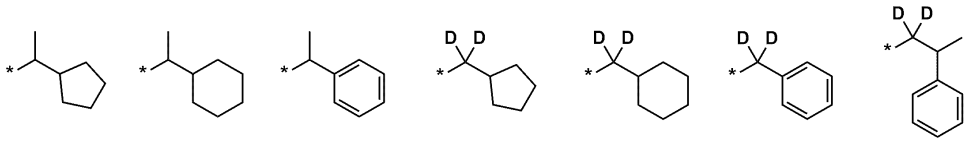
[0079]



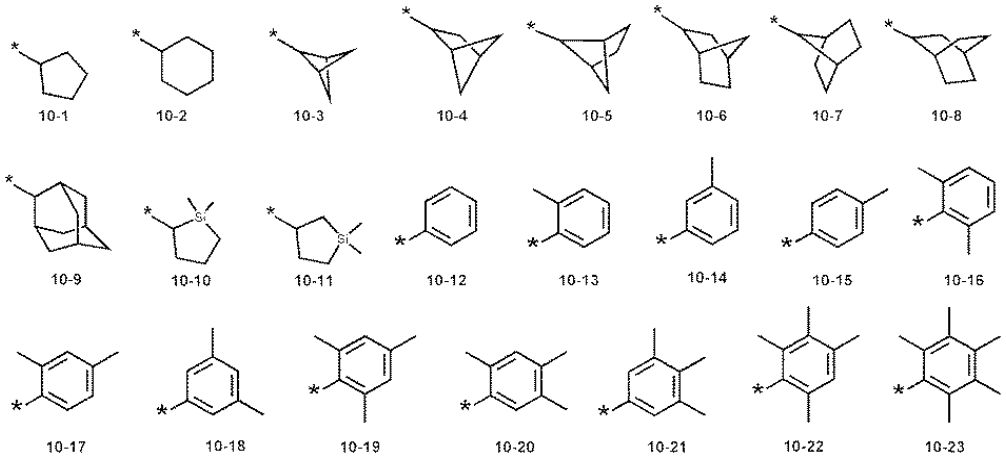
[0080]



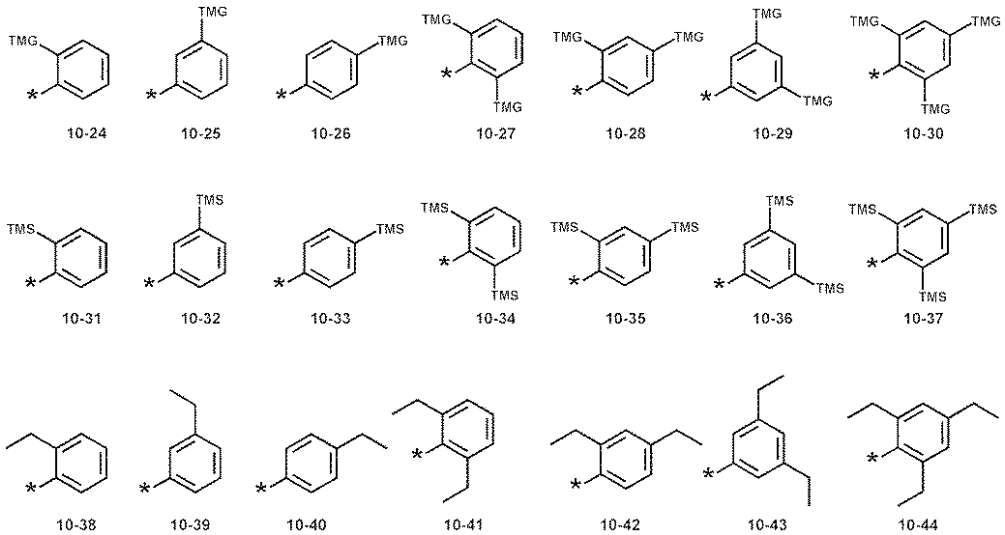
[0081]



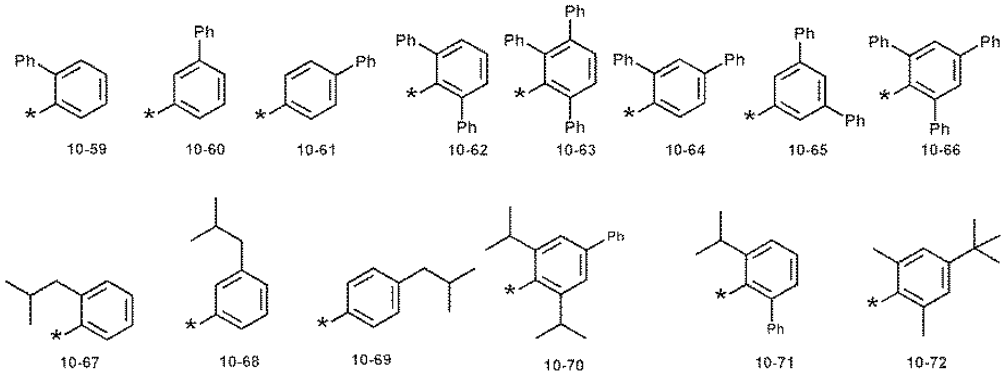
[0082]



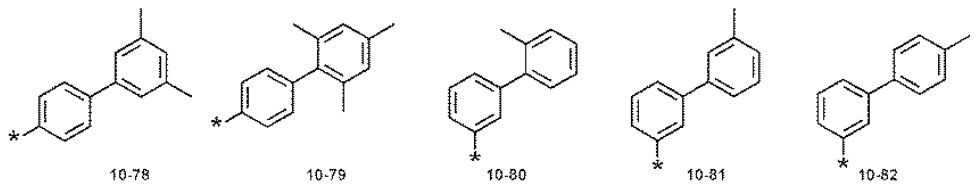
[0083]



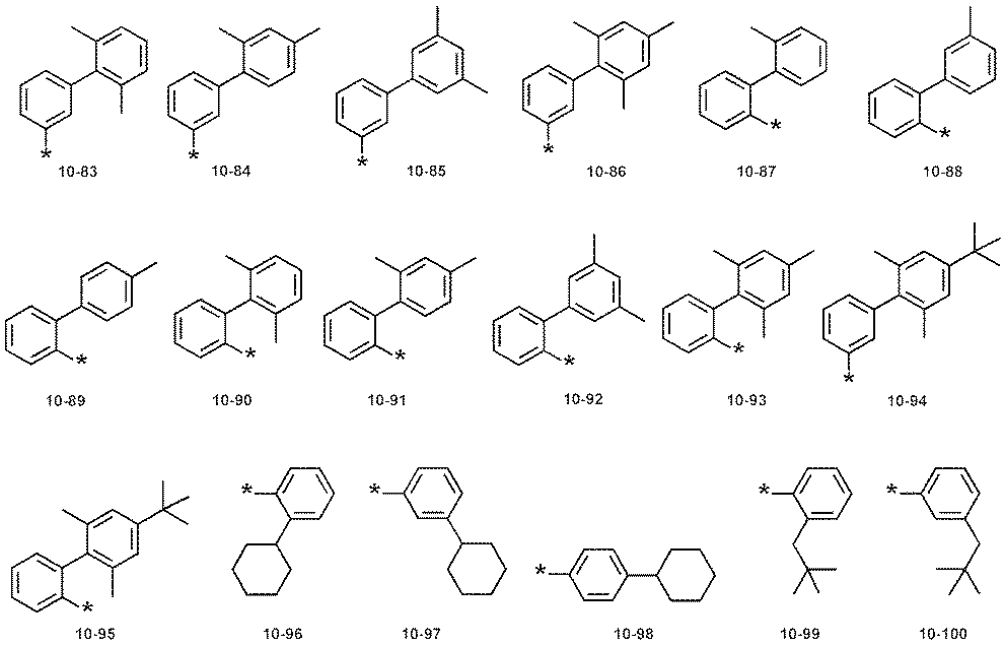
[0084]



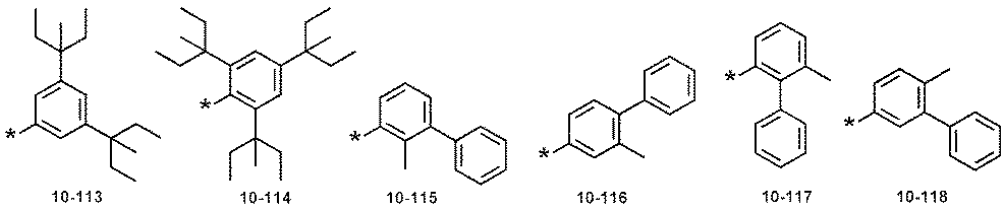
[0085]

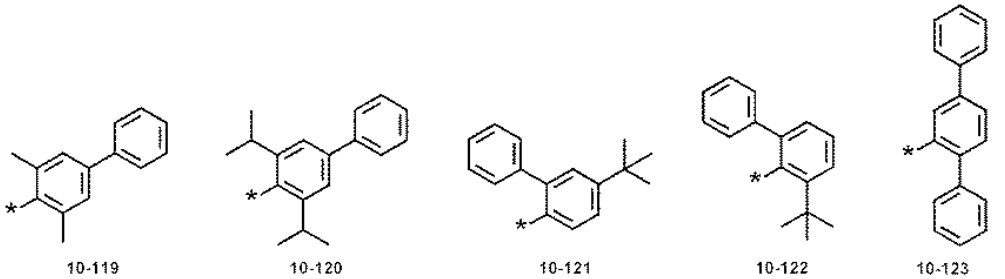


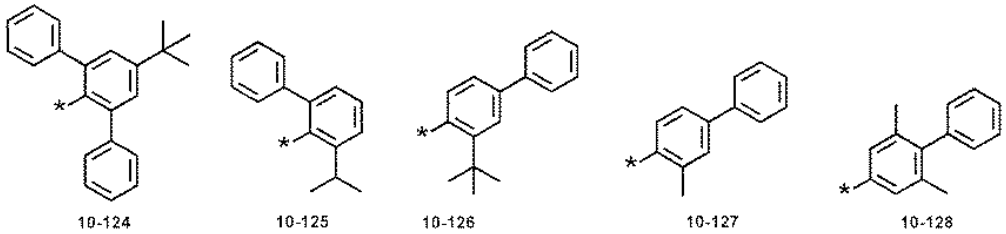
[0086]

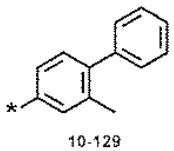

10-83
10-84
10-85
10-86
10-87
10-88
10-89
10-90
10-91
10-92
10-93
10-94
10-95
10-96
10-97
10-98
10-99
10-100
10-101
10-102
10-103
10-104
10-105
10-106
10-107
10-108
10-109
10-110
10-111
10-112

[0087]

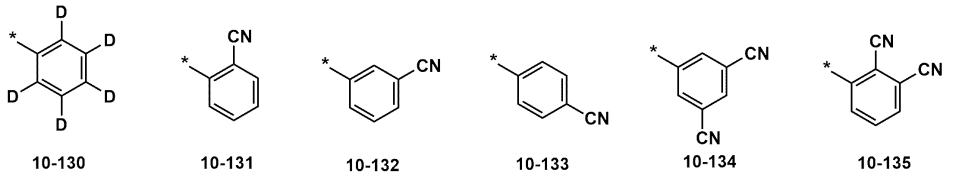

10-113
10-114
10-115
10-116
10-117
10-118

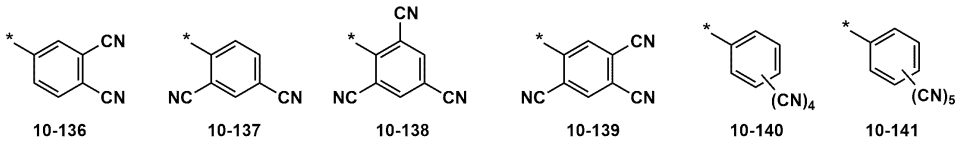

10-119 10-120 10-121 10-122 10-123

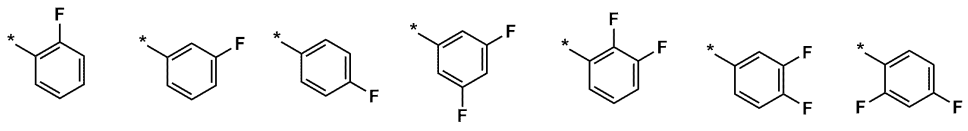

10-124 10-125 10-126 10-127 10-128

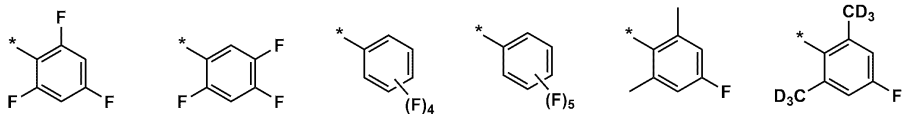

10-129

[0088]

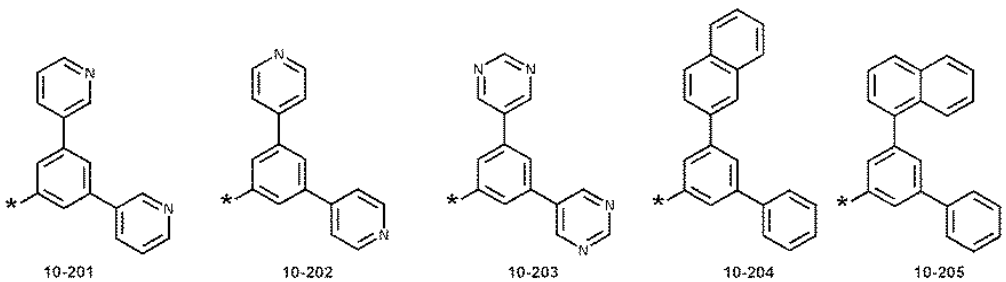

10-130 10-131 10-132 10-133 10-134 10-135

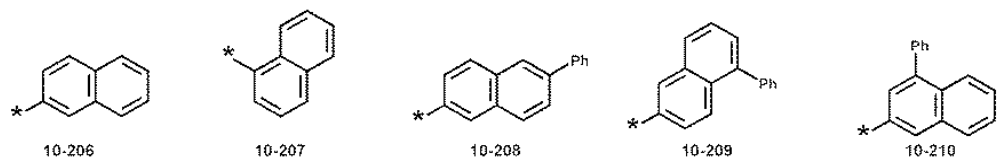

10-136 10-137 10-138 10-139 10-140 10-141


10-142 10-143 10-144 10-145 10-146 10-147 10-148


10-149 10-150 10-151 10-152 10-153 10-154

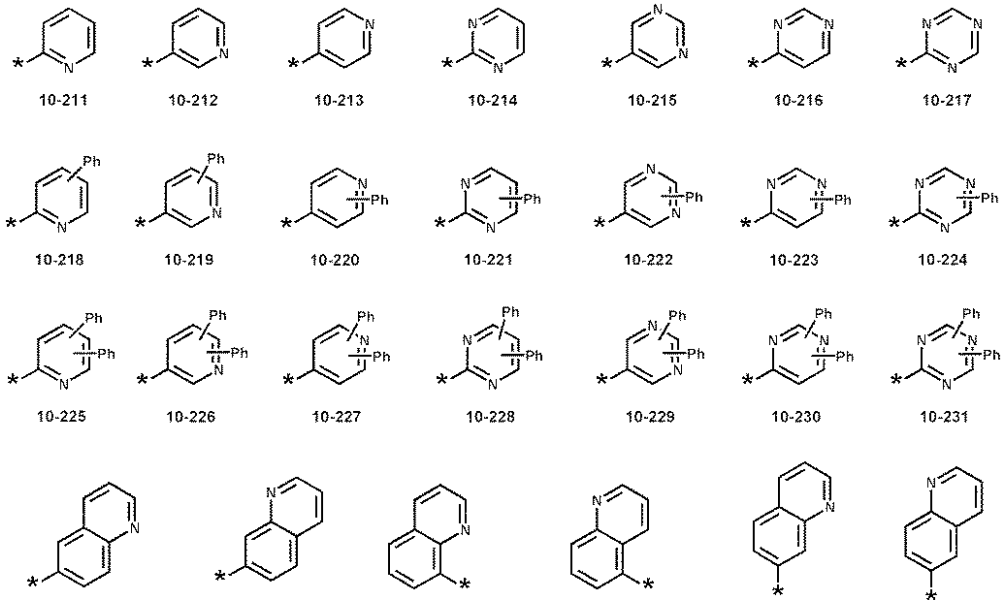
[0089]


10-201 10-202 10-203 10-204 10-205

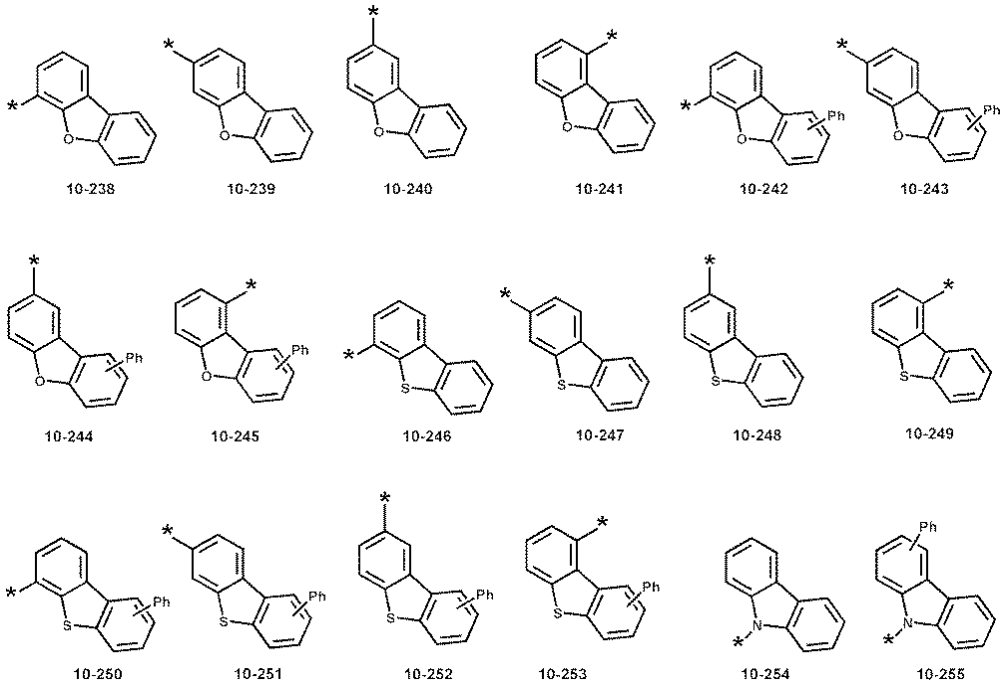

10-206 10-207 10-208 10-209 10-210

[0090]

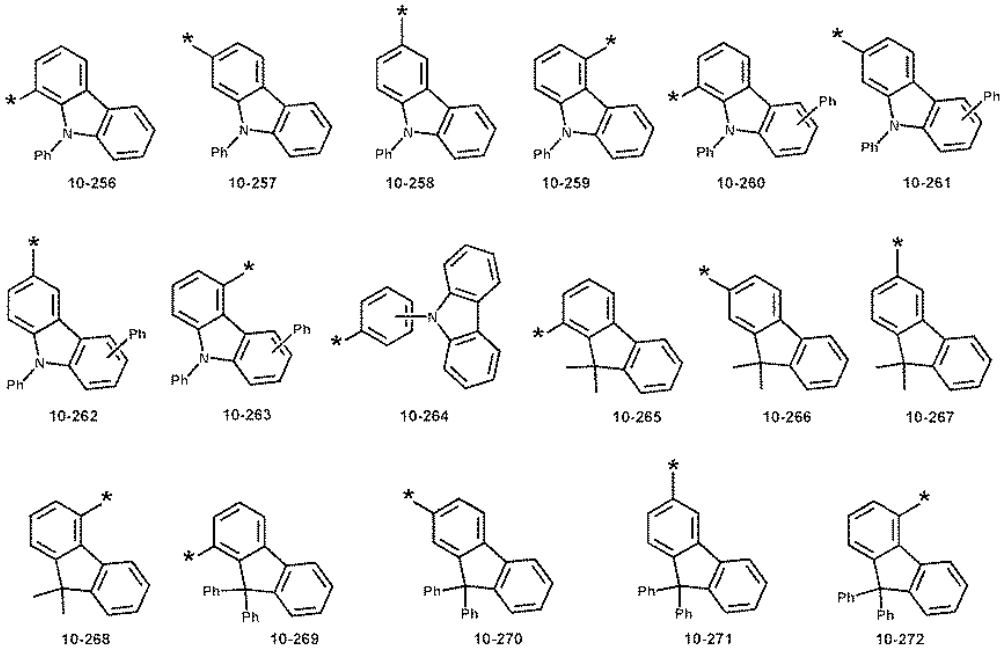
[0091]


10-211
10-212
10-213
10-214
10-215
10-216
10-217
10-218
10-219
10-220
10-221
10-222
10-223
10-224
10-225
10-226
10-227
10-228
10-229
10-230
10-231
10-232
10-233
10-234
10-235
10-236
10-237

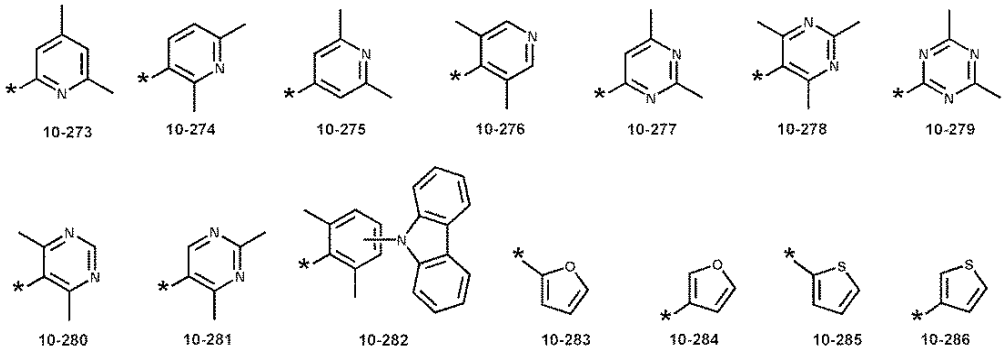
[0092]


10-238
10-239
10-240
10-241
10-242
10-243
10-244
10-245
10-246
10-247
10-248
10-249
10-250
10-251
10-252
10-253
10-254
10-255

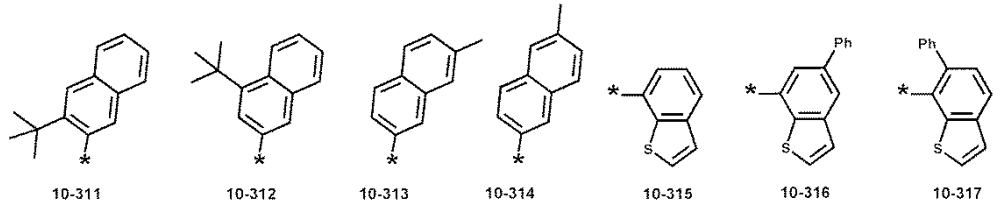
[0093]

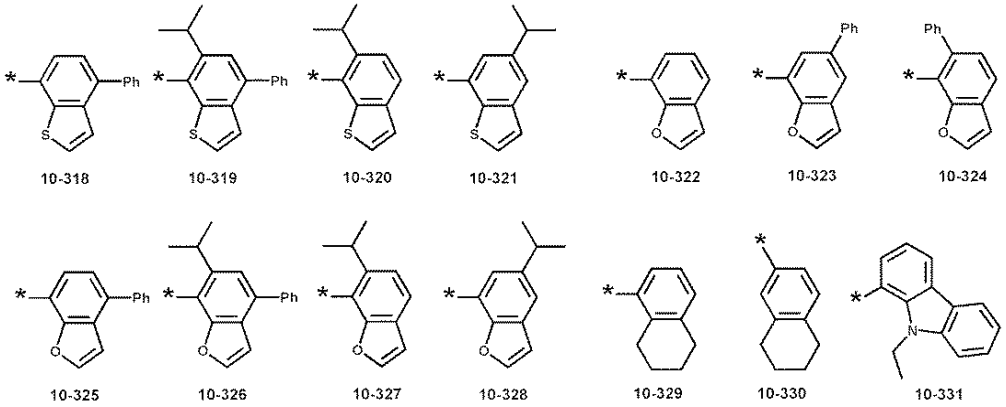


[0094]



[0095]



[0096] 

[0097]

[0098] 상기 화학식 9-1 내지 9-61, 9-201 내지 9-244, 10-1 내지 10-154 및 10-201 내지 10-350 중 *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고, Ph는 페닐기이고, TMS는 트리메틸실릴기이고, TMG는 트리메틸저밀기(trimethylgermyl)이다.

[0099] 일 구현예를 따르면, R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 2-메틸부틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, neo-펜틸기, 3-펜틸기, 3-메틸-2-부틸기, 페닐기, 비페닐기, C_1-C_{20}알킬페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.

[0100] 일 구현예를 따르면, R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 2-메틸부틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, neo-펜틸기, 3-펜틸기, 3-메틸-2-부틸기, 페닐기, 비페닐기, C_1-C_{20}알킬페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.

[0101] 상기 화학식 1 중, R_1 내지 R_4, R_{10} 및 R_{20} 중 이웃한 2 이상이 선택적으로(optionally) 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.

[0102] 상기 화학식 1 중, b10 및 b20은 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 또는 10이다.

[0103] 일 구현예를 따르면, b10 및 b20은 서로 독립적으로, 1, 2, 3, 4, 5, 6 또는 7일 수 있다.

[0104] 본 명세서 중 상기 치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환된

C_2-C_{60}알케닐기, 치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환된 C_3-C_{10}시클로알킬렌기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬렌기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐렌기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐렌기, 치환된 C_6-C_{60}아릴렌기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴렌기, 치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기는,

[0105] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

[0106] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-Ge(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-C(=O)(Q_{11})$, $-S(=O)(Q_{11})$, $-S(=O)_2(Q_{11})$, $-B(Q_{11})(Q_{12})$, $-P(Q_{11})(Q_{12})$, $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$, $-P(=S)(Q_{11})(Q_{12})$ 또는 이의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

[0107] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-N(Q_{21})(Q_{22})$, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-Ge(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-C(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)(Q_{21})$, $-S(=O)_2(Q_{21})$, $-B(Q_{21})(Q_{22})$, $-P(Q_{21})(Q_{22})$, $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$, $-P(=S)(Q_{21})(Q_{22})$ 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0108] $-N(Q_{31})(Q_{32})$, $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-Ge(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-C(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)(Q_{31})$, $-S(=O)_2(Q_{31})$, $-B(Q_{31})(Q_{32})$, $-P(Q_{31})(Q_{32})$, $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 또는 $-P(Q_{31})(Q_{32})$; 또는

[0109] 이의 임의의 조합;일 수 있다.

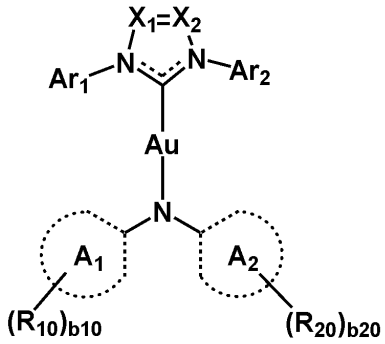
[0110] 본 명세서 중 Q_1 내지 Q_3, Q_{11} 내지 Q_{13}, Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33}은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; -F; -Cl; -Br; -I; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미디노기; 히드라진기; 히드라존기; 카르복실산기 또는 이의 염; 술폰산기 또는 이의 염; 인산기 또는 이의 염; 중수소, C_1-C_{60}알킬기, C_6-C_{60}아릴기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기; C_2-C_{60}알케닐기; C_2-C_{60}알키닐기; C_1-C_{60}알콕시기; C_3-C_{10}시클로알킬기; C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기; C_3-C_{10}시클로알케닐기; C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기; 중수소, C_1-C_{60}알킬기, C_6-C_{60}아릴기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기; C_6-C_{60}아릴옥시기; C_6-C_{60}아릴티오기; C_1-C_{60}헤테로아릴기; 1가 비-방향족 축합다환 그룹; 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;일 수 있다.

[0111] 예를 들어, 본 명세서 중 Q_1 내지 Q_3, Q_{11} 내지 Q_{13}, Q_{21} 내지 Q_{23} 및 Q_{31} 내지 Q_{33}은 서로 독립적으로,

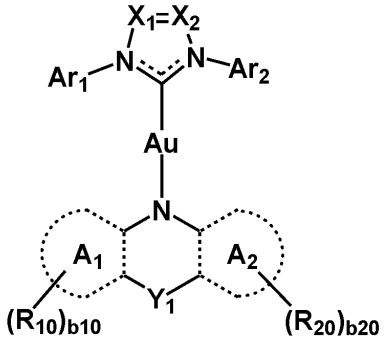
[0112] $-CH_3$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CD_3$, $-CH_2CD_2H$, $-CH_2CDH_2$, $-CHDCH_3$, $-CHDCD_2H$, $-CHDCDH_2$, $-CHDCD_3$, $-CD_2CD_3$, $-CD_2CD_2H$ 또는 $-CD_2CDH_2$; 또는

[0113] 중수소, C_1-C_{10}알킬기, 페닐기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, *n*-프로필기, 이소프로필기, *n*-부틸기, *sec*-부틸기, 이소부틸기, *tert*-부틸기, *n*-펜틸기, *tert*-펜틸기, 네오펜틸기, 이소펜틸기, *sec*-펜틸기, 3-펜틸기, *sec*-이소펜틸기, 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기;일 수 있다.

[0114] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 11-1 또는 11-2로 표시될 수 있다:



11-1



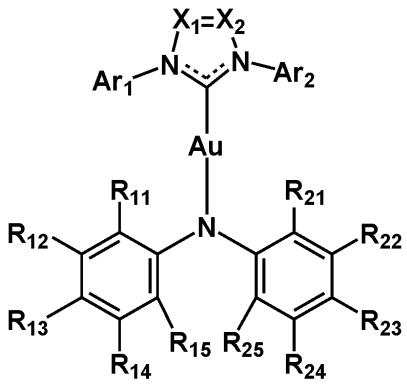
11-2

[0115]

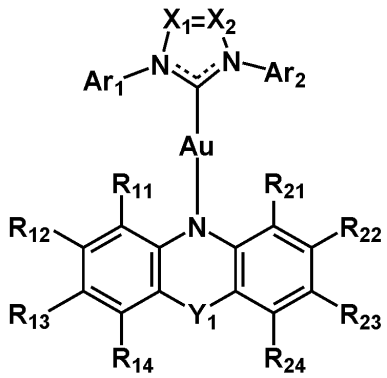
[0116] 상기 화학식 11-1 및 11-2 중,

[0117] X_1, X_2, Y_1, A_1, A_2, Ar_1, Ar_2, R_{10}, R_{20}, b10 및 b20에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0118] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 21-1 또는 21-2로 표시될 수 있다:



21-1



21-2

[0119]

[0120] 상기 화학식 21-1 및 21-2 중,

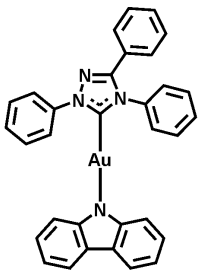
[0121] X_1, X_2, Y_1, Ar_1 및 Ar_2에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0122] R_{11} 내지 R_{15}에 대한 설명은 서로 독립적으로, R_{10}에 대한 설명을 참조하고,

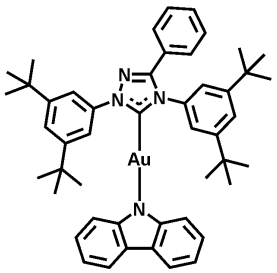
[0123] R_{21} 내지 R_{25}에 대한 설명은 서로 독립적으로, R_{20}에 대한 설명을 참조한다.

[0124] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물이 상기 화학식 1 중 Au 이외의 금속 원자를 포함하지 않을 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은 금속으로서 상기 화학식 1에 표시된 Au 원자 1개만을 포함할 수 있다.

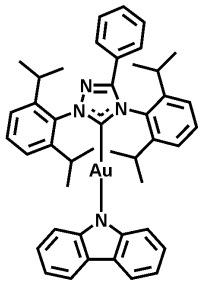
[0125] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 131 중 적어도 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



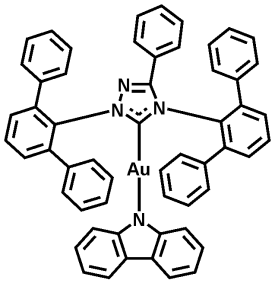
1



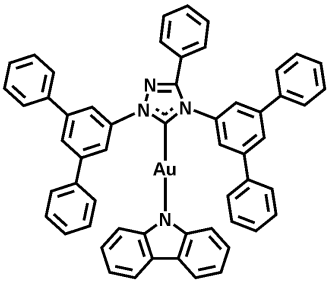
2



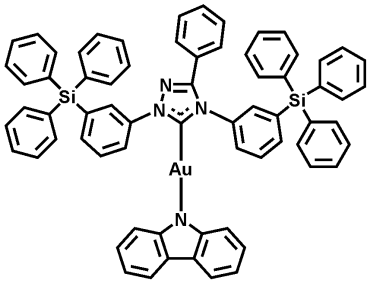
3



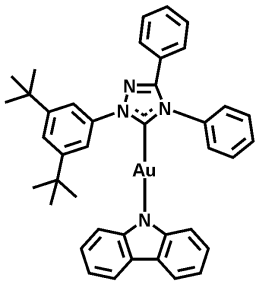
4



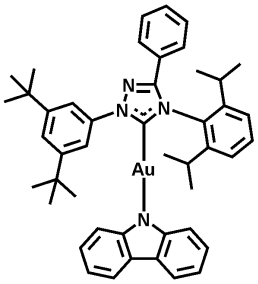
5



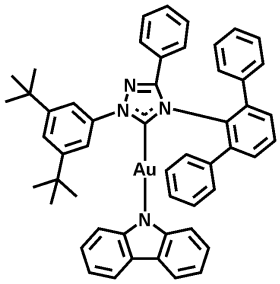
6



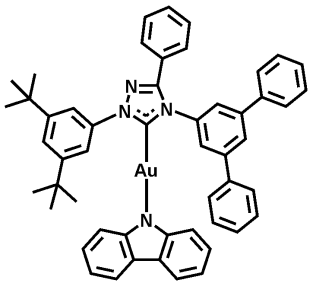
7



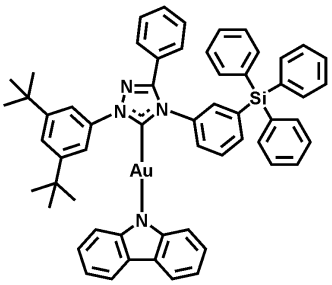
8



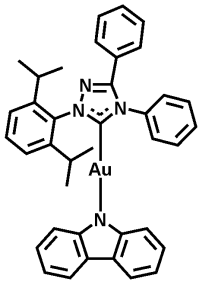
9



10

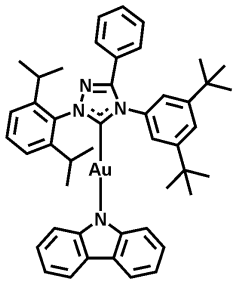


11

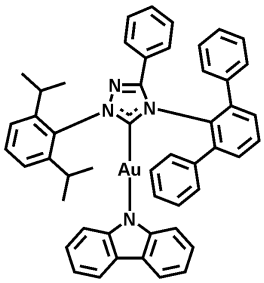


12

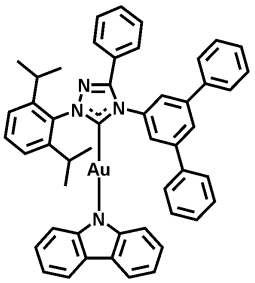
[0126]



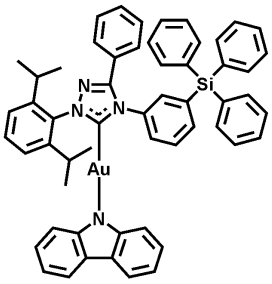
13



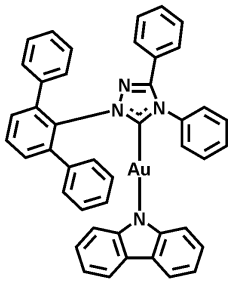
14



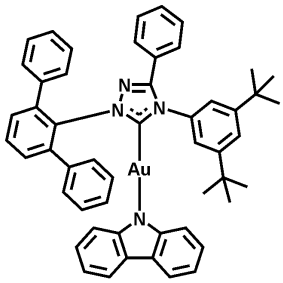
15



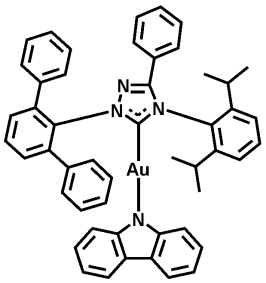
16



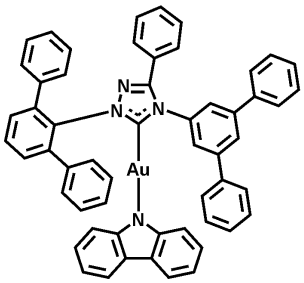
17



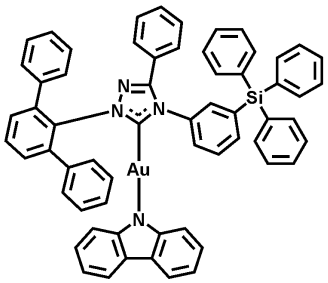
18



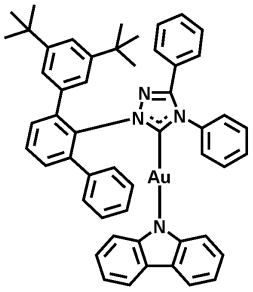
19



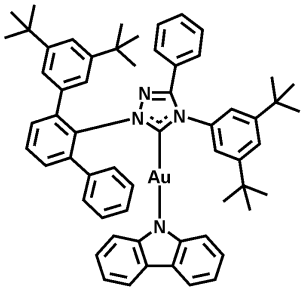
20



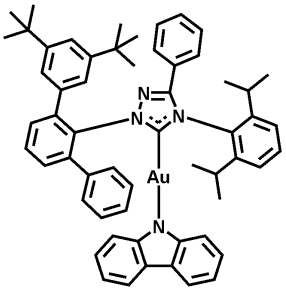
21



22



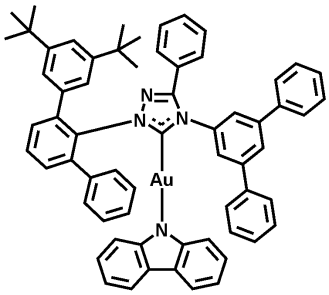
23



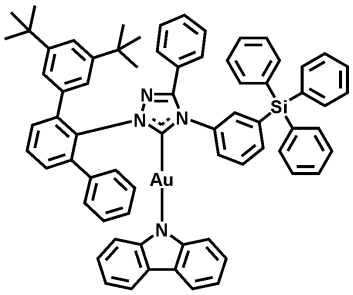
24

[0127]

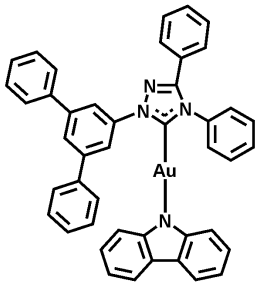
[0128]



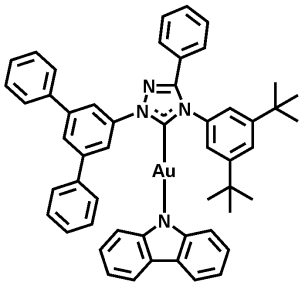
25



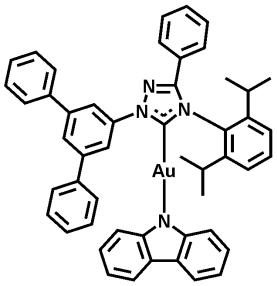
26



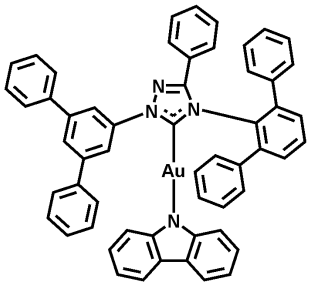
27



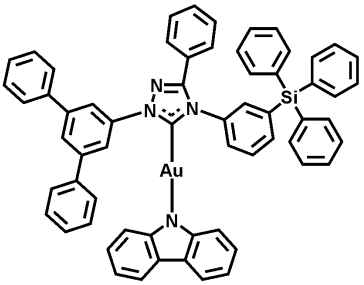
28



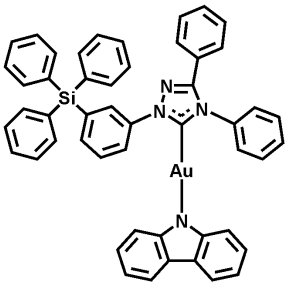
29



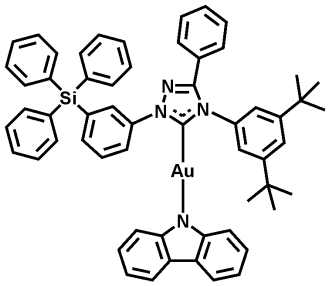
30



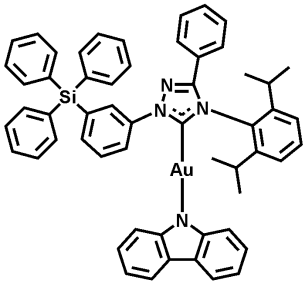
31



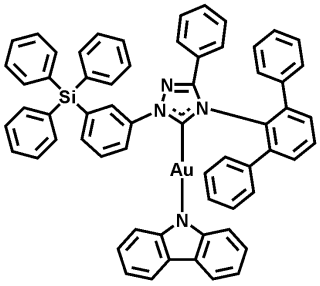
32



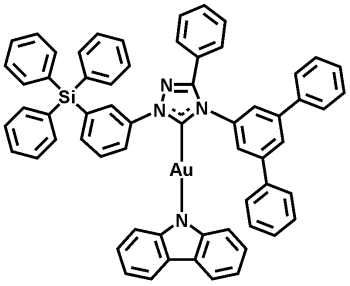
33



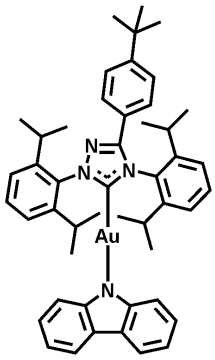
34



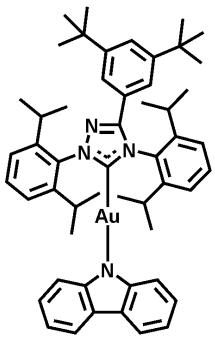
35



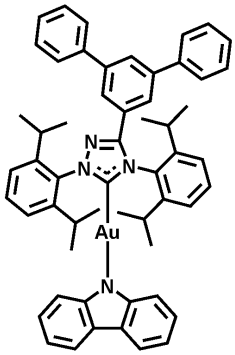
36



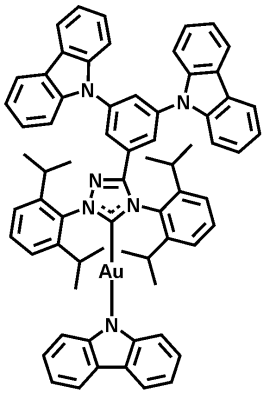
37



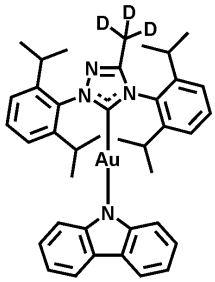
38



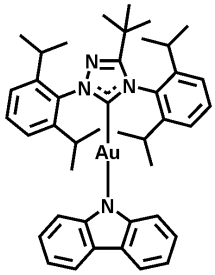
39



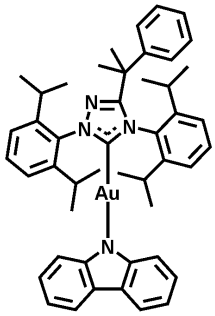
40



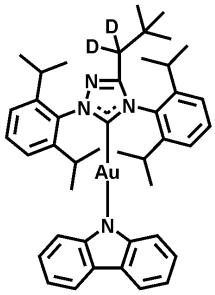
41



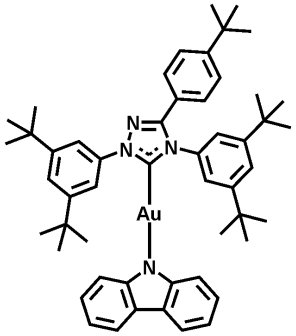
42



43

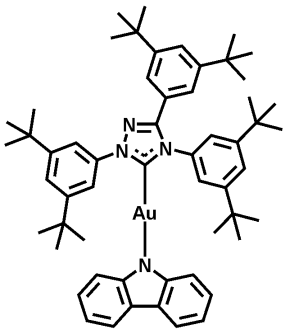


44

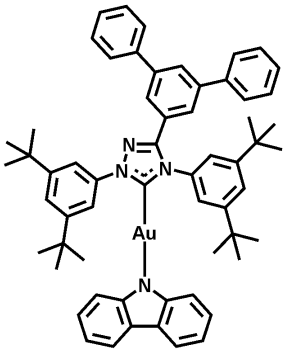


45

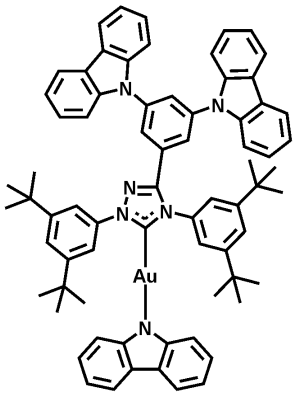
[0129]



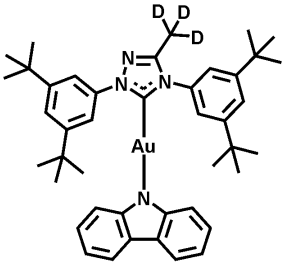
46



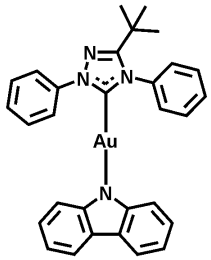
47



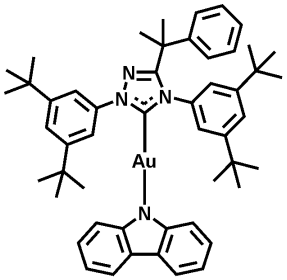
48



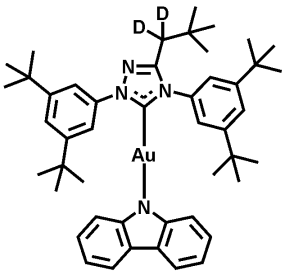
49



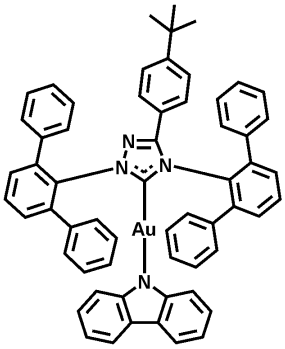
50



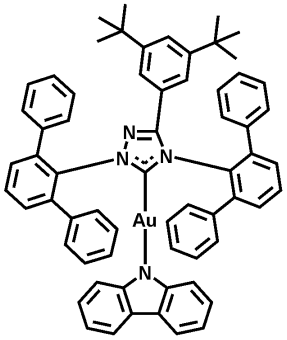
51



52



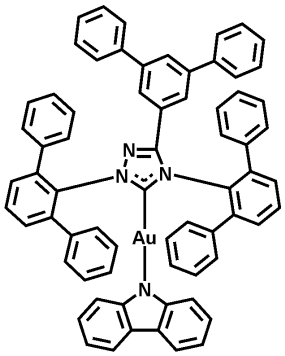
53



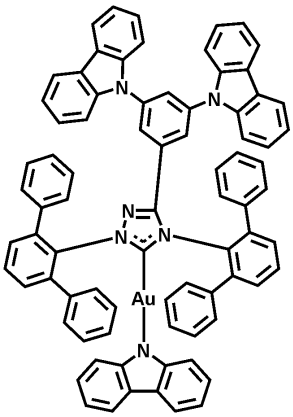
54

[0130]

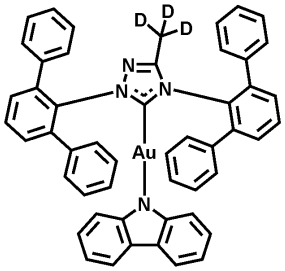
[0131]



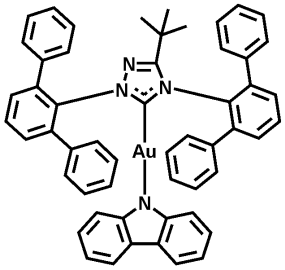
55



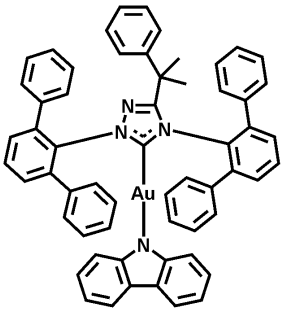
56



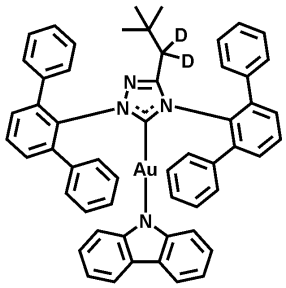
57



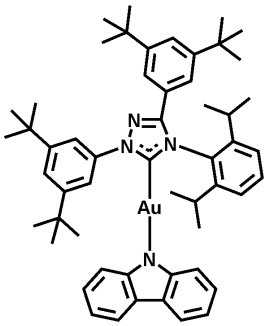
58



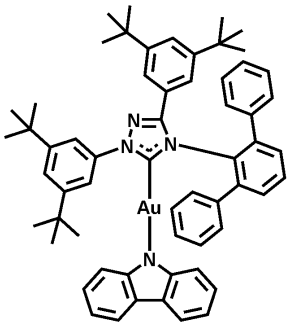
59



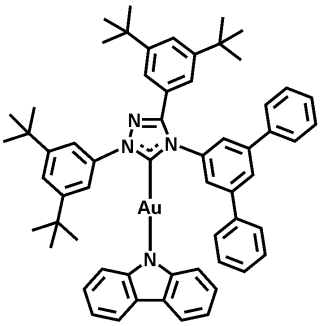
60



61

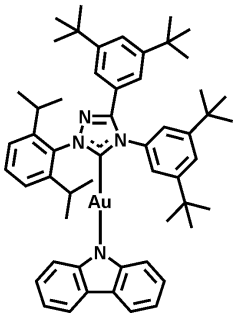


62

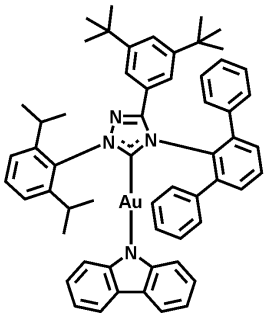


63

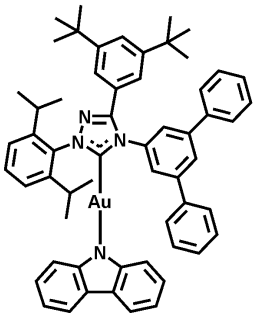
[0132]



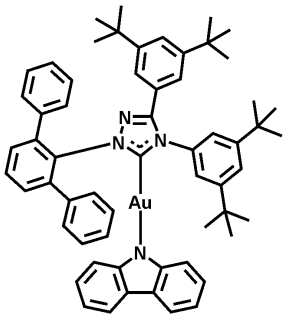
64



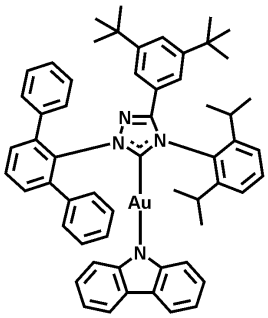
65



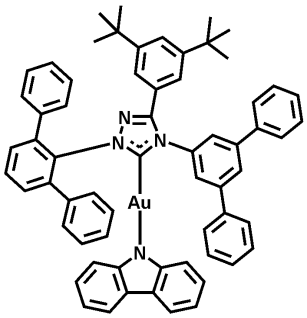
66



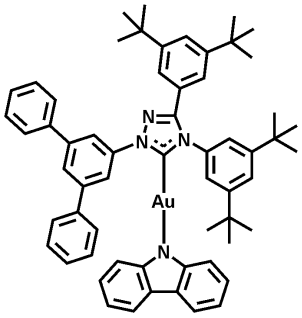
67



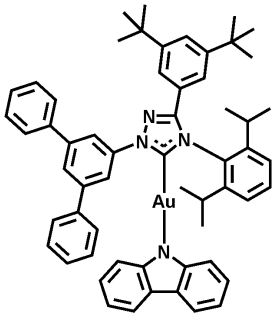
68



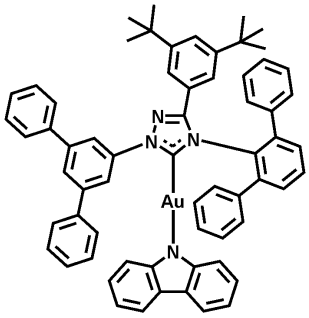
69



70

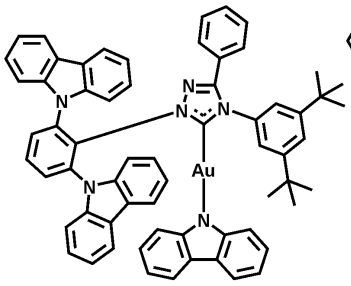


71

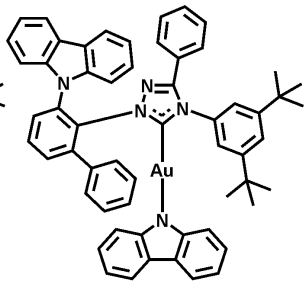


72

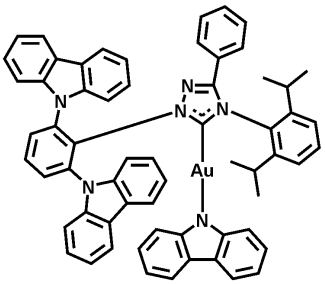
[0133]



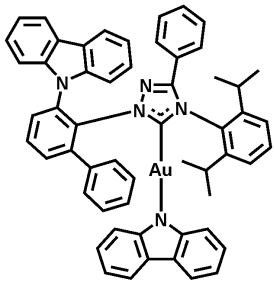
73



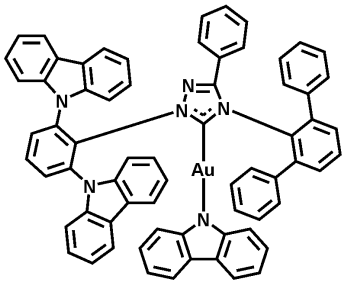
74



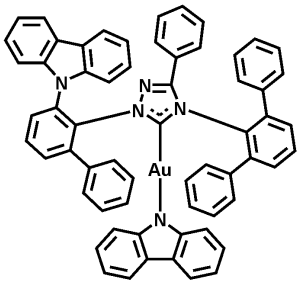
75



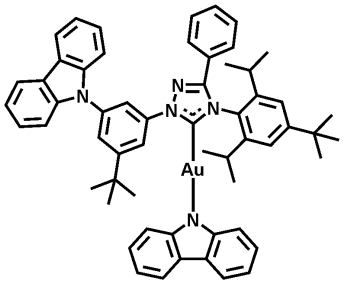
76



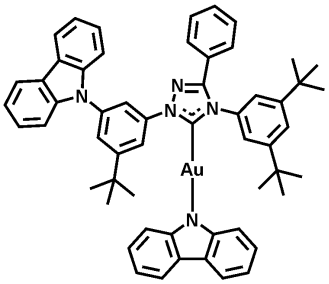
77



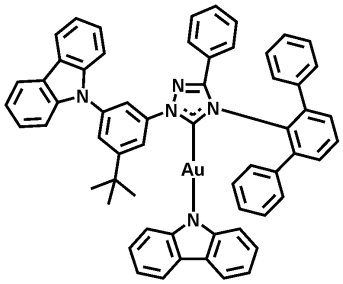
78



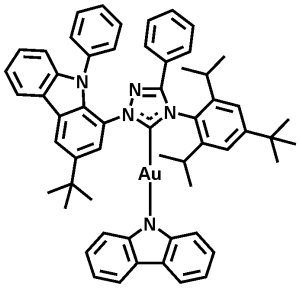
79



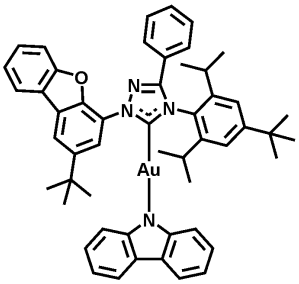
80



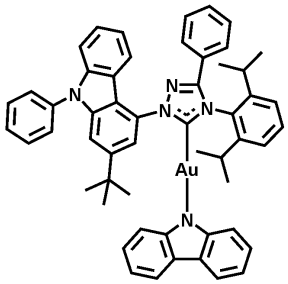
81



82

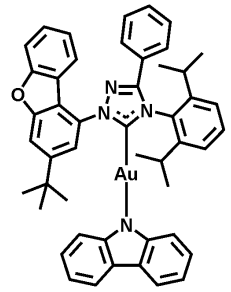


83

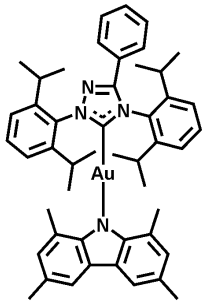


84

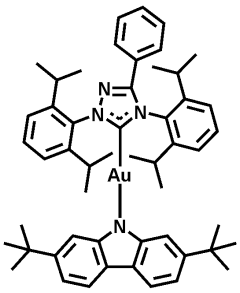
[0134]



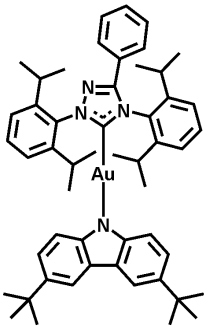
85



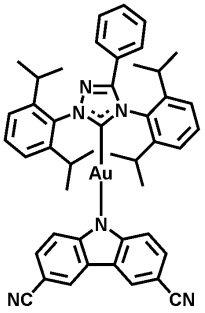
86



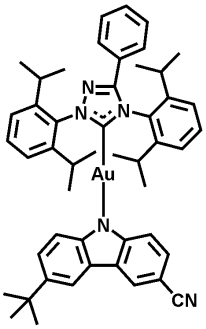
87



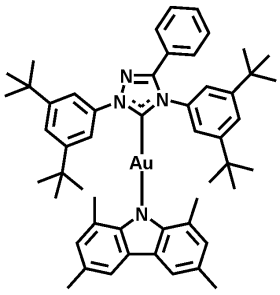
88



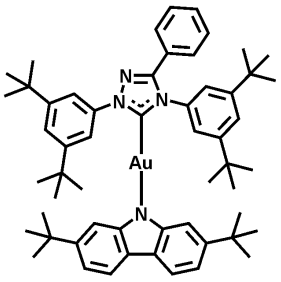
89



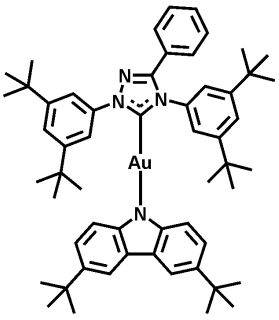
90



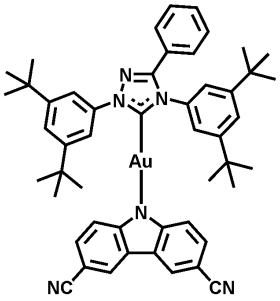
91



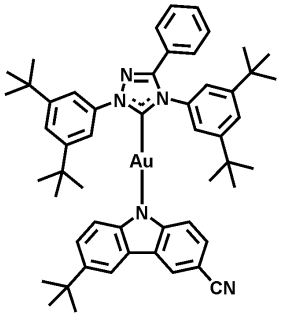
92



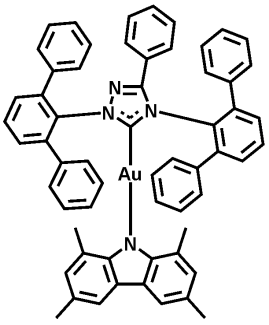
93



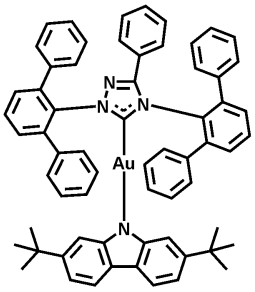
94



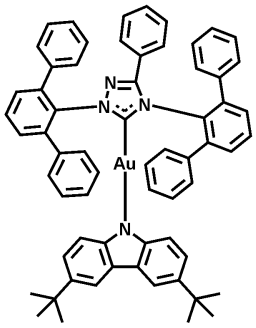
95



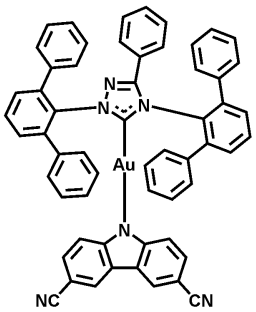
96



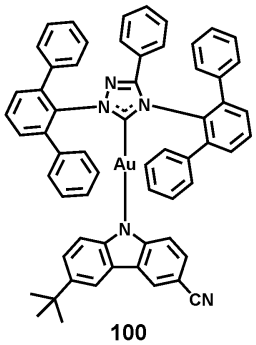
97



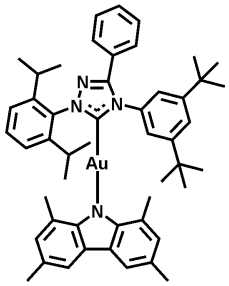
98



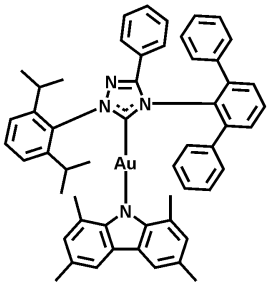
99



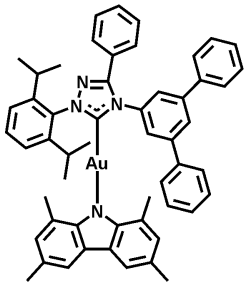
100



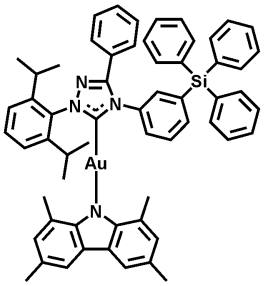
101



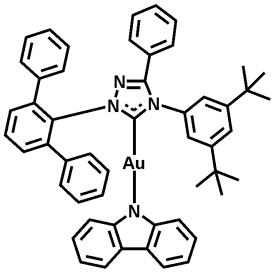
102



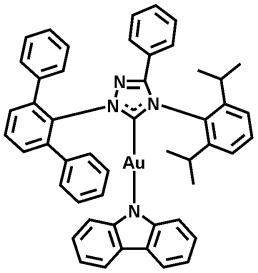
103



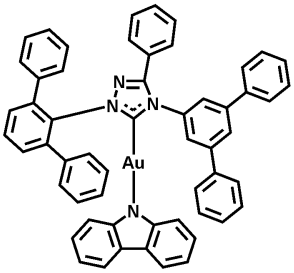
104



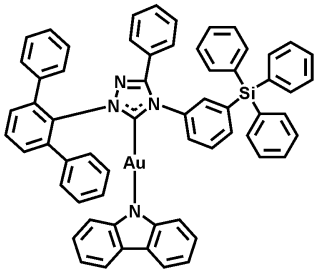
105



106

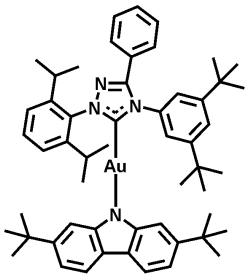


107

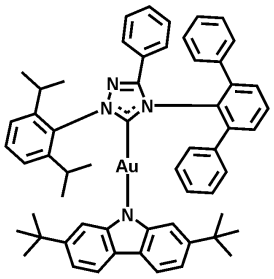


108

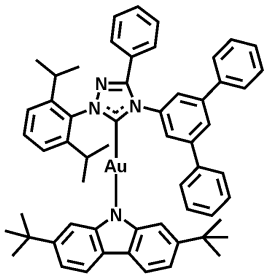
[0135]



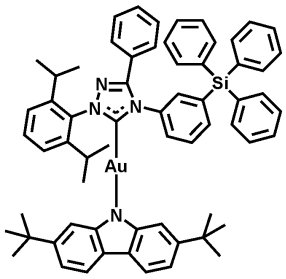
109



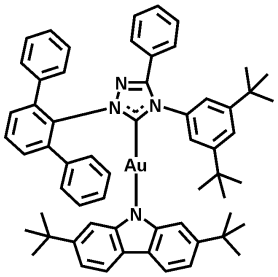
110



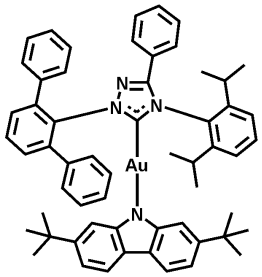
111



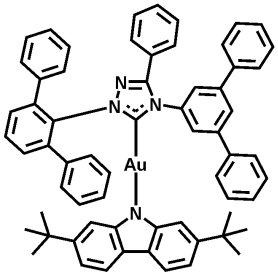
112



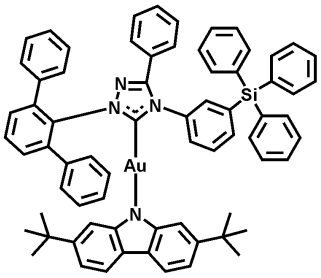
113



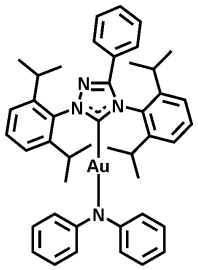
114



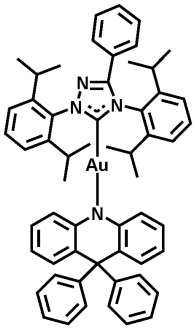
115



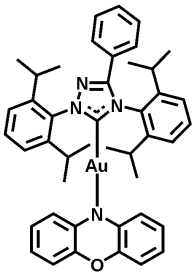
116



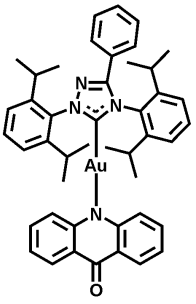
117



118

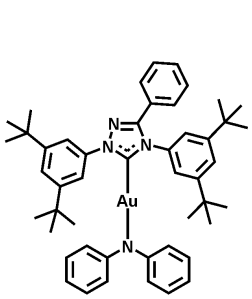


119

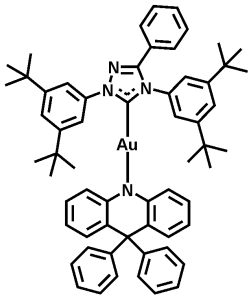


120

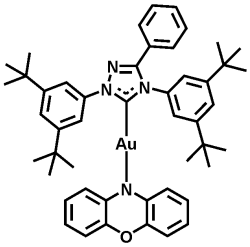
[0136]



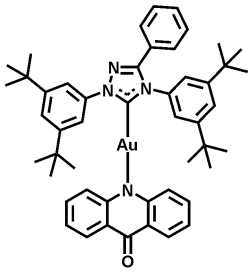
121



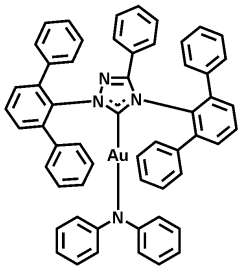
122



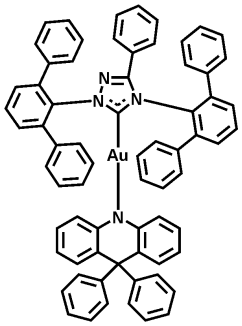
123



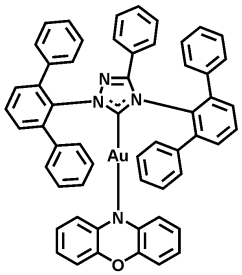
124



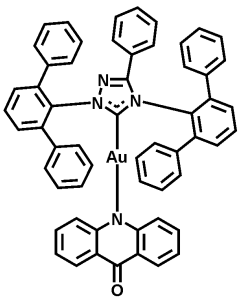
125



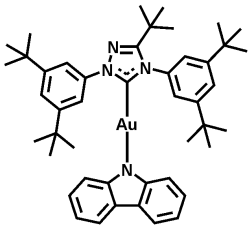
126



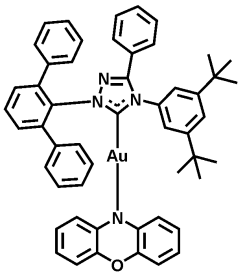
127



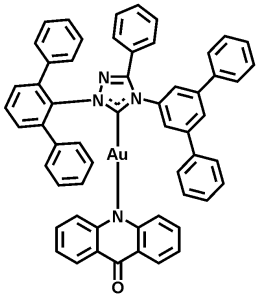
128



129



130



131

[0137] .

[0138] 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 전술한 화학식 1의 구조를 만족하고, 이러한 구조에 의해 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 발광 특성이 우수하고, 진한 청색(deep blue)의 구현에 적합하며, 전하 이동 특성이 우수하다.

[0139] 특정한 이론에 의하여 한정되는 것은 아니나, 상기 유기금속 화합물은 전술한 바와 같은 구조를 만족함에 따라 최고 점유 분자 오비탈(highest occupied molecular orbital, HOMO) 에너지 준위가 깊고(deep) (즉, HOMO의 절대값이 크고), 이로 인해 진한 청색 발광 파장 영역을 가질 수 있으며 정공 주입 특성이 우수하다. 따라서, 상기 유기금속 화합물을 유기 발광 소자에 적용하였을 때 진한 청색 발광을 위한 발광 파장 조절 및 구동 전압이 개선된 우수한 특성의 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.

[0140] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물 중 일부 화합물의 HOMO 에너지 레벨, 최저 비점유 분자 오비탈(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) 에너지 레벨, T_1 에너지 레벨 및 발광 파장(λ_{em})을 B3LYP 에 기반한 density functional theory (DFT)에 의한 분자 구조 최적화를 수반한 Gaussian 09 프로그램을 이용하며

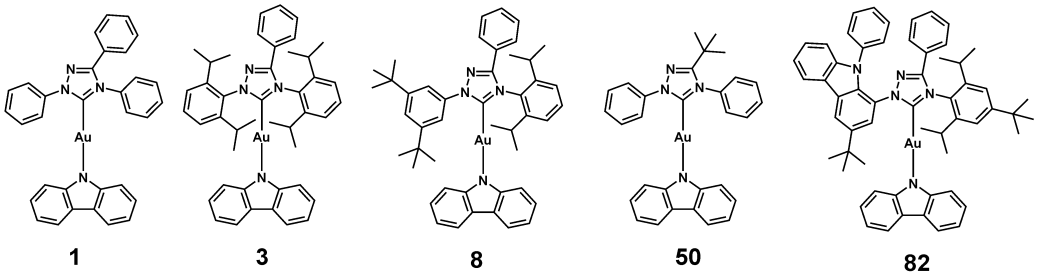
평가한 결과는 하기 표 1과 같다.

표 1

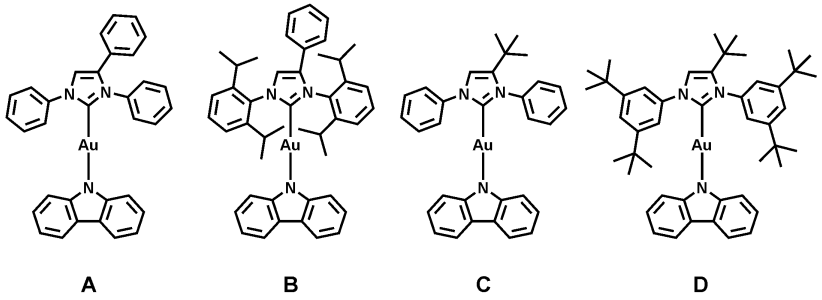
[0141]

	HOMO (eV)	LUMO (eV)	T_1 (eV)	λ_{em} (nm)
화합물 1	-4.23	-1.70	2.67	464
화합물 3	-4.22	-1.58	2.69	460
화합물 8	-4.24	-1.69	2.79	445
화합물 50	-4.22	-1.39	2.76	450
화합물 82	-4.20	-1.64	2.76	450
화합물 A	-4.11	-1.32	2.90	428
화합물 B	-4.12	-1.34	2.91	426
화합물 C	-4.09	-1.12	2.93	423
화합물 D	-4.12	-0.88	2.92	425

[0142]



[0143]



[0144] 상기 표 1로부터, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 도펀트(예를 들어, 에미터 또는 센서타이저)로 사용하기에 적합한 전기적 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0145] 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 화합물 A 내지 D에 비해 HOMO 및 LUMO의 절대값이 더 크고, 진한 청색 영역의 발광 특성을 나타내는 것을 알 수 있다. 이와 달리, 화합물 A 내지 D는 발광 파장이 자외선(UV) 영역에 가까운 특성을 가져 진청색 유기 발광 소자를 구성하기에 적합하지 않은 것을 알 수 있다.

[0146] 일 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물의 발광 스펙트럼 또는 전계발광 스펙트럼의 발광 피크의 반치폭(FWHM)은 60 nm 이하일 수 있다. 예를 들어, 상기 유기금속 화합물의 발광 스펙트럼 또는 전계발광 스펙트럼의 발광 피크의 반치폭(FWHM)은 5 nm 내지 50 nm, 7 nm 내지 40 nm, 또는 10 nm 내지 30 nm의 범위일 수 있다.

[0147] 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 인식할 수 있다.

[0148] 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물의 구조를 확인하는 방법은 특별히 제한되지 않는다. 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물의 구조는 공지의 방법(예를 들어, NMR, LC-MS 등)에 의해 확인할 수 있다.

[0149] [전자 소자]

[0150] 다른 측면에 따르면, 유기금속 화합물을 포함한 전자 소자가 제공될 수 있다.

[0151] 일 구현예를 따르면, 상기 전자 소자는 유기 발광 소자(organic light emitting device, OLED), 유기 포토다이오드(organic photodiode, OPD) 또는 유기 태양 전지(organic solar cell, OSC)일 수 있다.

[0152] [유기 발광 소자]

[0153] 다른 측면에 따르면, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

[0154] 일 구현예를 따르면, 상기 유기 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고,

[0155] 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.

[0156] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층이 상기 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.

[0157] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층이 호스트 및 에미터를 포함하고, 상기 에미터가 상기 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.

[0158] 일 구현예를 따르면, 중량을 기준으로, 상기 발광층 중 호스트의 함량이 상기 유기금속 화합물의 함량보다 클 수 있다.

[0159] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층이 센서타이저를 더 포함할 수 있다.

[0160] 일 구현예를 따르면, 상기 센서타이저는 인광 화합물, 지연 형광 화합물 또는 이들의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0161] 전술한 호스트, 에미터 및 센서타이저에 대한 상세한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조할 수 있다.

[0162] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함한 발광층을 구비함으로써, 상대적으로 좁은 EL 스펙트럼 발광 피크의 반치폭(FWHM), 우수한 효율 및 수명 특성을 가질 수 있다.

[0163] 일 구현예에 따르면, 상기 유기금속 화합물은 상기 발광층 중 도펀트(예를 들어, 에미터 또는 센서타이저)의 역할을 하고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함할 수 있다(즉, 상기 발광층 중, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물의 함량은 상기 호스트의 함량보다 작을 수 있다).

[0164] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층은 청색광을 방출할 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층은 최대 발광 파장이 400 nm 내지 490 nm인 청색광을 방출할 수 있다. 다른 예를 들어, 상기 발광층은 최대 발광 파장이 430 nm 내지 480 nm인 청색광을 방출할 수 있다.

[0165] 본 명세서 중 "(발광층이) 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(발광층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 유기금속 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 유기금속 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0166] 예를 들어, 상기 발광층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 발광층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다.

[0167] [도 1에 대한 설명]

[0168] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.

[0169] 도 1의 유기 발광 소자(10)는 제1전극(11), 상기 제1전극(11)에 대향된 제2전극(19) 및 상기 제1전극(11)과 상기 제2전극(19) 사이에 배치된 유기층(15)을 포함한다.

[0170] 상기 유기층(15)은 발광층을 포함하고, 상기 제1전극(11)과 상기 발광층 사이에는 정공 수송 영역이 배치될 수 있고, 상기 발광층과 상기 제2전극(19) 사이에는 전자 수송 영역이 배치될 수 있다.

[0171] 상기 제1전극(11) 하부 또는 제2전극(19) 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

[0172] [제1전극(11)]

[0173] 상기 제1전극(11)은 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 애노드일 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다.

[0174] 상기 제1전극(11)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 투과형 전극인 제1전극(11)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO_2), 산화아연(ZnO) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 제1전극(110)을 형성하기 위하여, 제1전극용 물질은, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 및 이의 임의의 조합 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0175] 상기 제1전극(11)은 단일층 또는 2 이상의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

[0176] [발광층(15)]

[0177] 상기 발광층(15)은 상기 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.

[0178] [도 2에 대한 설명]

[0179] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층 중 유기금속 화합물이 에미터로서 포함될 수 있다.

[0180] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층은 호스트(이하, '호스트 A'라 하고, 상기 호스트 A는 상기 유기금속 화합물과 동일하지 않음)를 더 포함할 수 있다. 상기 호스트 A는 후술하는 호스트 재료를 참조하여 이해될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0181] 도 2를 참조하여, 일 구현예에 따른 에너지 전이를 설명하면 다음과 같다.

[0182] 발광층 중의 호스트 A에서 25%의 일중항 엑시톤이 형성되고, 상기 호스트 A에서 형성된 일중항 엑시톤은 펠스터 에너지 전이(Förster energy transfer) (또는, 펠스터 공명 에너지 전이(Förster resonance energy transfer, FRET))를 통해 상기 유기금속 화합물로 전이된다. 또한, 발광층 중의 호스트 A에서 형성된 75%의 삼중항 엑시톤이 덱스터 에너지 전이(Dexter energy transfer)를 통해 상기 유기금속 화합물로 전이된다. 이 중 상기 유기금속 화합물의 일중항의 에너지의 적어도 일부는 항간 교차(intersystem crossing, ISC)에 의해 삼중항으로 전달되고, 상기 유기금속 화합물이 인광을 방출할 수 있다. 또한, 상기 유기금속 화합물의 삼중항의 에너지의 적어도 일부가 역항간 교차(reverse intersystem crossing, RISC)에 의해 일중항으로 전달되고, 상기 유기금속 화합물이 지연 형광(또는, 열 활성화 지연 형광(thermally activated delayed fluoerescence, TADF)을 방출할 수 있다.

[0183] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층으로부터 방출되는 전체 발광 성분 중, 상기 유기금속 화합물로부터 방출되는 발광 성분의 비율은 80% 이상, 예를 들어, 90% 이상일 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층으로부터 방출되는 전체 발광 성분 중, 상기 유기금속 화합물로부터 방출되는 발광 성분의 비율이 95% 이상일 수 있다.

[0184] 여기서, 상기 유기금속 화합물은 인광 또는 지연 형광을 방출하며, 상기 호스트는 광을 방출하지 않을 수 있다.

[0185] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층이 상기 유기금속 화합물 외에 호스트 A를 더 포함할 경우, 상기 유기금속 화합물의 함량은 상기 발광층 100 중량부 당 50 중량부 이하, 예를 들어, 30 중량부 이하일 수 있고, 상기 발광층 중 상기 호스트 A의 함량은 상기 발광층 100 중량부 당 50 중량부 이상, 예를 들어, 70 중량부 이상일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0186] [도 3에 대한 설명]

[0187] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물이 센서타이저로 사용되고, 발광층이 형광 에미터를 더 포함할 수 있다.

[0188] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층은 호스트(이하, '호스트 B'라 하고, 상기 호스트 B는 상기 유기금속 화합물 및 형광 에미터와 동일하지 않음) 및 형광 에미터(이하, '형광 에미터 B'라 하고, 상기 형광 에미터 B는 상기 호스트 B와 상기 유기금속 화합물과 동일하지 않음)을 더 포함할 수 있다. 상기 호스트 B와 상기 형광 에미터 B는 후술하는 호스트 재료 및 형광 에미터 재료를 참조하여 이해될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0189] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층으로부터 방출되는 전체 발광 성분 중, 상기 형광 에미터 B의 발광 성분의 비율이 80% 이상, 예를 들어, 90% 이상(또 다른 예로서, 95% 이상)일 수 있다. 예를 들어, 상기 형광 에미터 B가 형광을 방출할 수 있다. 또한, 상기 호스트 및 상기 센서타이저는 각각 광을 방출하지 않을 수 있다.

[0190] 도 3를 참조하여, 일 구현예에 따른 에너지 전이를 설명하면 다음과 같다.

[0191] 발광층 중의 호스트 B에서 형성된 75% 비율의 삼중항 엑시톤은 Dexter 에너지 전이를 통해 상기 유기금속 화합물로 전달되고, 호스트 B에서 형성된 25% 비율의 일중항 엑시톤의 에너지는 상기 유기금속 화합물의 일중항과 삼중항으로 전이되고, 이 중에서 상기 유기금속 화합물의 일중항으로 전달된 에너지의 적어도 일부가 삼중항으로 ISC되고, 그 다음 상기 유기금속 화합물의 삼중항 에너지가 FRET을 통해 형광 에미터 B로 전이될 수 있다. 또한, 상기 유기금속 화합물의 삼중항 에너지의 적어도 일부가 RISC를 통해 일중항으로 전달된 후 형광 에미터 B로 전이될 수 있다.

[0192] 이에 따라, 발광층에서 생성된 일중항 엑시톤 및 삼중항 엑시톤을 모두 에미터에 전달함으로써, 효율이 향상된 유기 발광 소자를 얻을 수 있다. 뿐만 아니라, 손실되는 에너지가 현저히 줄어든 유기 발광 소자를 얻을 수 있기 때문에, 상기 유기 발광 소자의 수명 특성도 향상될 수 있다.

[0193] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층 중 상기 유기금속 화합물의 함량은 5 중량% 내지 50 중량% 범위, 구체적으로, 10 중량% 내지 30 중량% 범위 내에서 선택될 수 있다. 상술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 발광층 중 효과적인 에너지 전달을 달성할 수 있는 바, 고효율 및 장수명의 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.

[0194] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층 중 상기 형광 에미터 B의 함량은 0.01 중량% 내지 15 중량% 범위, 구체적으로, 0.05 중량% 내지 3 중량% 범위 내에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0195] [도 4에 대한 설명]

[0196] 일 구현예를 따르면, 상기 유기금속 화합물이 센서타이저로 사용되고, 발광층이 지연 형광 에미터를 더 포함할 수 있다.

[0197] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층은 호스트(이하, '호스트 C'라 하고, 상기 호스트 C는 상기 유기금속 화합물 및 형광 에미터와 동일하지 않음) 및 지연 형광 에미터(이하, '지연 형광 에미터 C'라 하고, 상기 지연 형광 에미터 C는 상기 호스트 C와 상기 유기금속 화합물과 동일하지 않음)을 더 포함할 수 있다. 상기 호스트 C와 상기 지연 형광 에미터 C는 후술하는 호스트 재료 및 지연 형광 에미터 재료를 참조하여 이해될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0198] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층으로부터 방출되는 전체 발광 성분 중, 상기 지연 형광 에미터의 발광 성분의 비율이 80% 이상, 예를 들어, 90% 이상(또 다른 예로서, 95% 이상)일 수 있다. 예를 들어, 상기 지연 형광 에미터가 지연 형광을 방출할 수 있다. 또한, 상기 호스트 및 상기 센서타이저는 각각 광을 방출하지 않을 수 있다.

[0199] 도 4를 참조하여, 일 구현예에 따른 에너지 전이를 설명하면 다음과 같다.

[0200] 발광층 중의 호스트 C에서 형성된 75% 비율의 삼중항 엑시톤은 Dexter 에너지 전이를 통해 상기 유기금속 화합물로 전달되고, 호스트 C에서 형성된 25% 비율의 일중항 엑시톤의 에너지는 상기 유기금속 화합물의 일중항과 삼중항으로 전이되고, 이 중에서 상기 유기금속 화합물의 일중항으로 전달된 에너지의 적어도 일부가 삼중항으로 ISC되고, 그 다음 상기 유기금속 화합물의 삼중항 에너지가 FRET을 통해 지형광 에미터 C로 전이될 수 있다. 또한, 상기 유기금속 화합물의 삼중항 에너지의 적어도 일부가 RISC를 통해 일중항으로 전달된 후 지연 형광 에미터 C로 전이될 수 있다.

[0201] 이에 따라, 발광층에서 생성된 일중항 엑시톤 및 삼중항 엑시톤을 모두 에미터에 전달함으로써, 효율이 향상된 유기 발광 소자를 얻을 수 있다. 뿐만 아니라, 손실되는 에너지가 현저히 줄어든 유기 발광 소자를 얻을 수 있기 때문에, 상기 유기 발광 소자의 수명 특성도 향상될 수 있다.

[0202] 일 구현예에 따르면, 상기 발광층 중 상기 유기금속 화합물의 함량은 5 중량% 내지 50 중량% 범위, 구체적으로, 10 중량% 내지 30 중량% 범위 내에서 선택될 수 있다. 상술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 발광층 중 효과적인 에너지 전달을 달성할 수 있는 바, 고효율 및 장수명의 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.

[0203] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층 중 상기 지연 형광 에미터 C의 함량은 0.01 중량% 내지 15 중량% 범위, 구체적으로, 0.05 중량% 내지 3 중량% 범위 내에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0204] [발광층 중 호스트]

[0205] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는 금속 원자를 비포함할 수 있다.

[0206] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는, 플루오렌-함유 화합물, 카바졸-함유 화합물, 디벤조퓨란-함유 화합물, 디벤조티오펜-함유 화합물, 인데노카바졸-함유 화합물, 인돌로카바졸-함유 화합물, 벤조퓨로카바졸-함유 화합물,

벤조티에노카바졸-함유 화합물, 아크리딘-함유 화합물, 디하이드로아크리딘-함유 화합물, 트라이인돌로벤젠-함유 화합물, 피리딘-함유 화합물, 피리미딘-함유 화합물, 트리아진-함유 화합물, 실리콘-함유 화합물, 시아노기-함유 화합물, 포스핀 옥사이드-함유 화합물, 설폭사이드-함유 화합물 및 설포닐-함유 화합물 중에서 선택된 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다.

[0207] 예를 들어, 상기 호스트는, 적어도 하나의 카바졸 고리 및 적어도 하나의 시아노기를 포함한 화합물 또는 포스핀 옥사이드-함유 화합물일 수 있다.

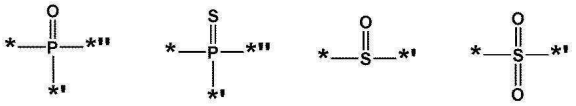
[0208] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는 1종의 호스트로 이루어질 수 있다. 상기 호스트가 1종의 호스트로 이루어진 경우, 상기 1종의 호스트는 후술하는 바이폴라(bipolar) 호스트, 전자 수송성 호스트 및 정공 수송성 호스트 중에서 선택될 수 있다.

[0209] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는 2종 이상의 서로 상이한 호스트의 혼합물일 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트가 정공 수송성 호스트, 전자 수송성 호스트, 바이폴라 호스트 또는 이들의 조합을 포함할 수 있다.

[0210] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는 전자 수송성 호스트 및 정공 수송성 호스트의 혼합물, 서로 상이한 2종의 전자 수송성 호스트의 혼합물 또는 서로 상이한 2종의 정공 수송성 호스트의 혼합물일 수 있다. 상기 전자 수송성 호스트 및 정공 수송성 호스트에 관한 설명은 후술하는 바를 참조한다.

[0211] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는 전자 수송성 모이어티를 적어도 하나 포함한 전자 수송성 호스트 및 전자 수송성 모이어티를 비포함한 정공 수송성 호스트를 포함할 수 있다.

[0212] 본 명세서 중 전자 수송성 모이어티는, 시아노기, π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹 및 하기 화학식 중 하나로 표시된 그룹 중에서 선택될 수 있다:

[0213] 

[0214] 상기 화학식 중 *, *' 및 *"은 각각 이웃한 임의의 원자와의 결합 사이트이다.

[0215] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층 중 전자 수송성 호스트는 시아노기 및 π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0216] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층 중 전자 수송성 호스트는 적어도 하나의 시아노기를 포함할 수 있다.

[0217] 일 구현예를 따르면, 상기 발광층 중 전자 수송성 호스트는 적어도 하나의 시아노기 및 적어도 하나의 π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹을 포함할 수 있다.

[0218] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는 전자 수송성 호스트 및 정공 수송성 호스트를 포함하고, 상기 전자 수송성 호스트는 적어도 하나의 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹 및 적어도 하나의 전자 수송성 모이어티를 포함하고, 상기 정공 수송성 호스트는 적어도 하나의 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹을 포함하고, 전자 수송성 모이어티를 비포함할 수 있다.

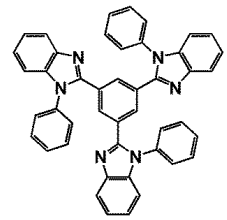
[0219] 본 명세서 중 "π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹"이란 적어도 하나의 *-N=*' 모이어티를 갖는 시클릭 그룹으로서, 예를 들면, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 피리미딘 그룹, 인다졸 그룹, 푸린(purine) 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹 및 아자카바졸 그룹; 및 2 이상의 상기 π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹의 축합환 중에서 선택될 수 있다.

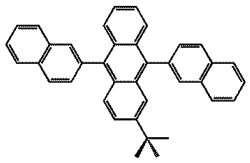
[0220] 한편, 상기 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹은 벤젠 그룹, 헵탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프틸렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타센 그룹, 헥사센 그룹, 펜타센 그룹, 루비센 그룹, 코로젠 그룹, 오발렌 그룹, 피롤 그룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디벤조카바졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조티

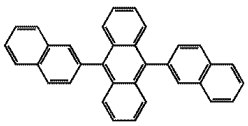
오펜 설폰(dibenzothiophene sulfone) 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 인데노카바졸 그룹, 인돌로카바졸 그룹, 벤조퓨로카바졸 그룹, 벤조티에노카바졸 그룹 및 트라이인돌로벤젠 그룹; 및 2 이상의 상기 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹의 축합환 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

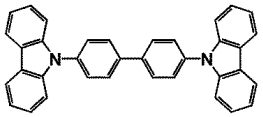
[0221] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트가 전자 수송성 호스트와 정공 수송성 호스트의 혼합물일 경우, 상기 전자 수송성 호스트 및 정공 수송성 호스트의 중량비는 1:9 내지 9:1, 예를 들면, 2:8 내지 8:2, 또 다른 예로서, 4:6 내지 6:4, 또 다른 예로서, 5:5의 범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송성 호스트 및 정공 수송성 호스트의 중량비가 상술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 발광층 내로의 정공 및 전자 수송 균형을 달성할 수 있다.

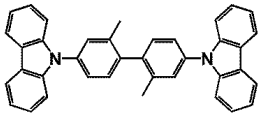
[0222] 상기 호스트는 하기 TPBi, TBADN, ADN("DNA"라고도 함), CBP, CDBP, TCP, mCP, 화합물 H50 및 화합물 H51 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:

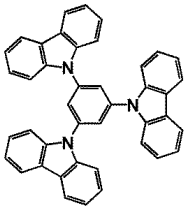
[0223] 
TPBi

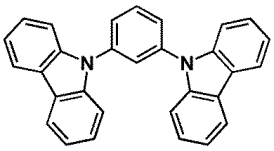

TBADN

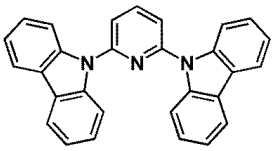

ADN

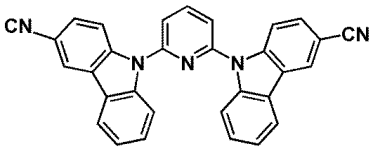

CBP


CDBP


TCP

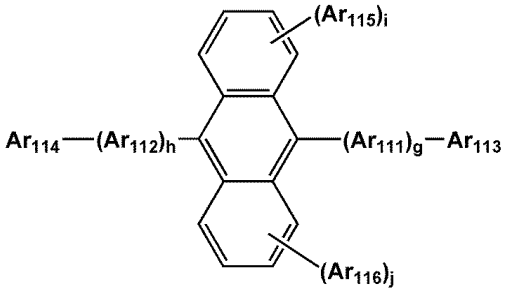
[0224] 
mCP


H50


H51

[0225] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 301로 표시되는 화합물을 더 포함할 수 있다:

[0226] <화학식 301>

[0227] 

[0228] 상기 화학식 301 중, Ar_{111} 및 Ar_{112}는 서로 독립적으로,

[0229] 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기; 및

[0230] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기;

[0231] 중에서 선택될 수 있다.

[0232] 상기 화학식 301 중 상기 Ar_{113} 내지 Ar_{116}은 서로 독립적으로,

[0233] C_1-C_{10}알킬기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기; 및

[0234] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기;

[0235] 중에서 선택될 수 있다.

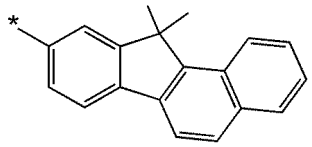
[0236] 상기 화학식 301 중 g, h, i 및 j는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수, 예를 들면, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0237] 상기 화학식 301 중, Ar_{113} 내지 Ar_{116}은 서로 독립적으로,

[0238] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_{10}알킬기;

[0239] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기;

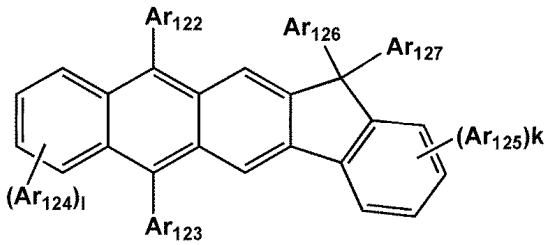
[0240] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기; 및

[0241] 
;

[0242] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0243] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 302로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

[0244] <화학식 302>

[0245] 

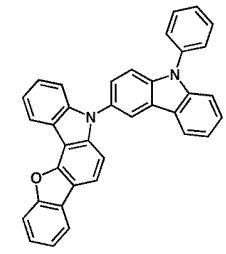
[0246] 상기 화학식 302 중 Ar_{122} 내지 Ar_{125}에 대한 상세한 설명은 상기 화학식 301의 Ar_{113}에 대한 설명을 참조한다.

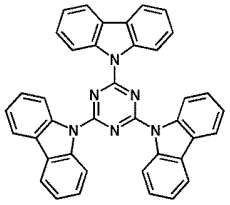
[0247] 상기 화학식 302 중 Ar_{126} 및 Ar_{127}은 서로 독립적으로, C_1-C_{10}알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기 또는 프로필기)일 수 있다.

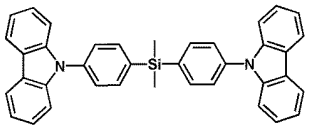
[0248] 상기 화학식 302 중 k 및 l은 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 k 및 l은 0, 1 또는 2일 수 있다.

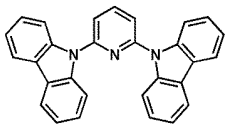
[0249] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는 하기 화합물 H1 내지 H24 중 적어도 하나의 화합물을 포함할 수 있다:

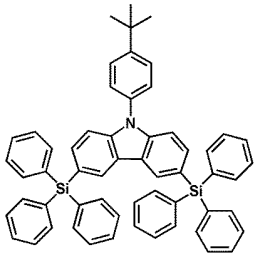
[0250]

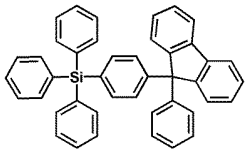

H1


H2

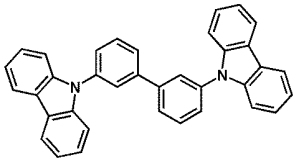

H3

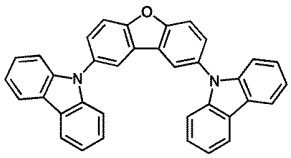

H4

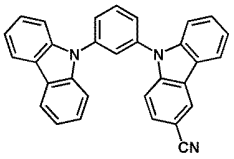

H5

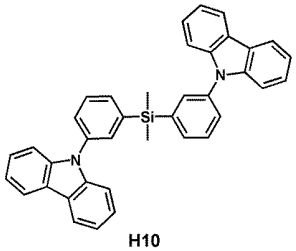

H6

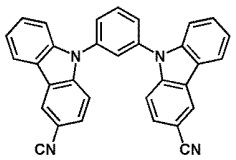
[0251]

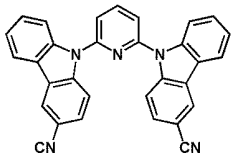

H7


H8

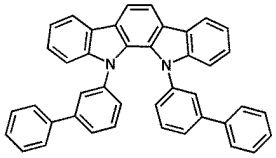

H9

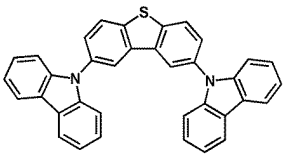

H10

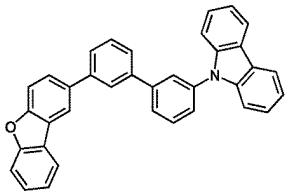

H11

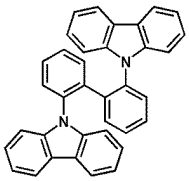

H12

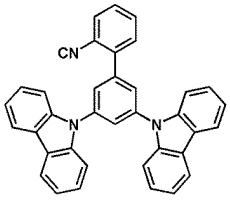
[0252]

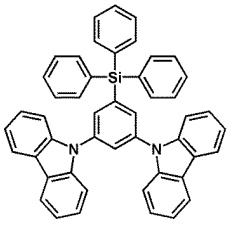

H13

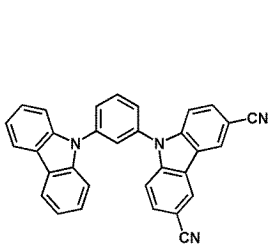

H14


H15

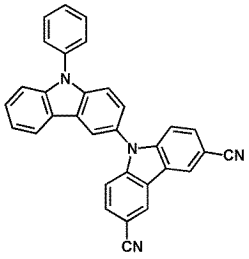

H16


H17

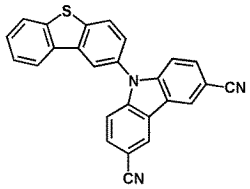

H18



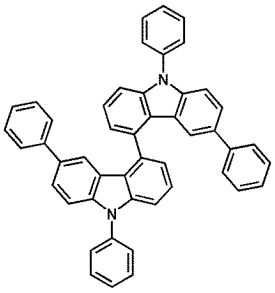
H19



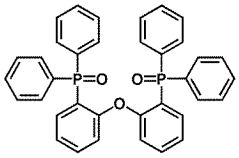
H20



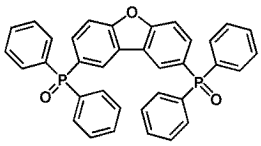
H21



H22



H23



H24

[0253]

[0254] 일 구현예에 따르면, 상기 호스트는 1종의 화합물로 이루어질(consist of) 수 있다. 예를 들어, 상기 1종의 화합물은 상술한 바와 같은 제1물질(정공 수송성 호스트) 및 제2물질(전자 수송성 호스트) 중에서 임의로 선택될 수 있다.

[0255] 일 구현예를 따르면, 상기 호스트는 2종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 호스트는 서로 다른 정공 수송성 호스트를 2종 이상 포함하거나, 서로 다른 전자 수송성 호스트를 2종 이상 포함하거나, 1종 이상의 정공 수송성 호스트 및 1종 이상의 전자 수송성 호스트의 조합을 포함할 수 있다.

[0256] [발광층 중 에미터]

[0257] 상기 에미터는 광을 방출할 수 있다.

[0258] 구체적으로, 상기 에미터는 형광 및/또는 지연 형광을 방출하는 형광 및/또는 지연 형광 에미터일 수 있다. 이에 따라, 상기 에미터의 감쇠 시간($T_{decay}(E)$)은 100 μs 미만일 수 있다.

[0259] $T_{decay}(E)$은 쿼츠 기판 상에 상기 발광층에 포함된 호스트 및 에미터를 90:10의 중량비로 10^{-7} torr의 진공도에서 진공 공증착하여 수득한 40nm 두께의 필름에 대한 상온에서의 TRPL(Time-Resolved Photoluminescece) 스펙트럼으로부터 계산한 값이다.

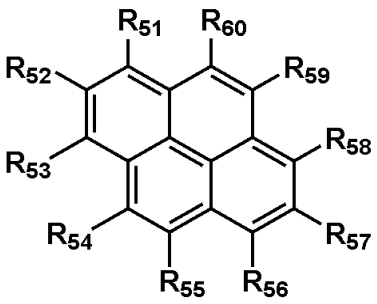
[0260] 일 구현예를 따르면, 상기 에미터는 4환 이상의 카보시클릭 그룹 또는 4환 이상의 헤테로시클릭 그룹을 포함할 수 있다.

[0261] 일 구현예를 따르면, 상기 에미터는 금속을 포함하지 않은 유기 화합물일 수 있다.

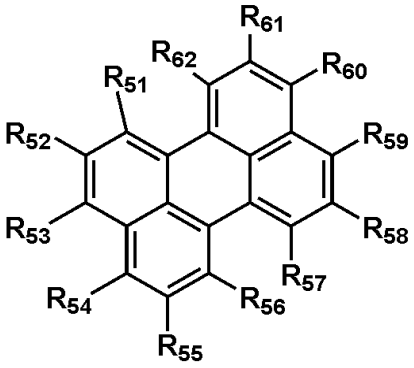
[0262] 일 구현예를 따르면, 상기 에미터는 하기 화학식 51 내지 54 중 어느 하나로 표시된 화합물일 수 있다:

[0263] <화학식 51>

[0264]

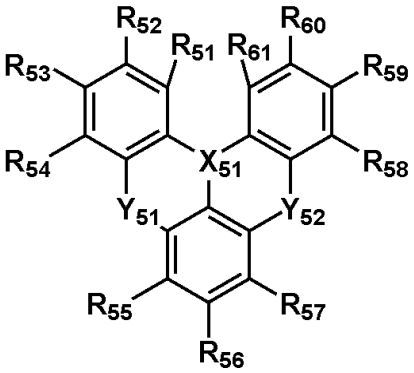


[0265] <화학식 52>



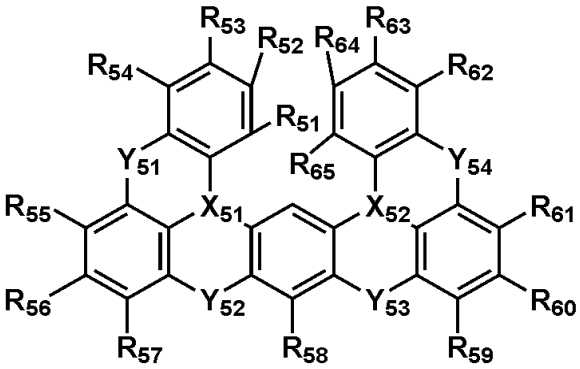
[0266]

[0267] <화학식 53>



[0268]

[0269] <화학식 54>



[0270]

[0271] 상기 화학식 51 내지 54 중,

[0272] X_{51} 및 X_{52}는 서로 독립적으로, N 또는 B이고,

[0273] Y_{51}은 단일 결합, O, S, Se, $N(R_{501})$, $B(R_{501})$, $C(R_{501})(R_{502})$ 또는 $Si(R_{501})(R_{502})$이고,

[0274] Y_{52}는 단일 결합, O, S, Se, $N(R_{503})$, $B(R_{503})$, $C(R_{503})(R_{504})$ 또는 $Si(R_{503})(R_{504})$이고,

[0275] Y_{53}은 단일 결합, O, S, Se, $N(R_{505})$, $B(R_{505})$, $C(R_{505})(R_{506})$ 또는 $Si(R_{505})(R_{506})$이고,

[0276] Y_{54}는 단일 결합, O, S, Se, $N(R_{507})$, $B(R_{507})$, $C(R_{507})(R_{508})$ 또는 $Si(R_{507})(R_{508})$이고,

[0277] R_{51} 내지 R_{65} 및 R_{501} 내지 R_{508}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시

클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-Ge(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-C(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 또는 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$이고,

[0278] R_{51} 내지 R_{65} 및 R_{501} 내지 R_{508} 중 이웃한 2 이상이 선택적으로(optionally) 서로 결합하여, 적어도 하나의 R_5로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R_5로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹을 형성하고,

[0279] 상기 치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹, 치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환된 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0280] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

[0281] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-Ge(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{14})(Q_{15})$, $-B(Q_{16})(Q_{17})$, $-P(=O)(Q_{18})(Q_{19})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

[0282] C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0283] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-Ge(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{24})(Q_{25})$, $-B(Q_{26})(Q_{27})$, $-P(=O)(Q_{28})(Q_{29})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

[0284] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-Ge(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{34})(Q_{35})$, $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 또는 $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$;이고,

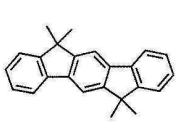
[0285] 상기 Q_1 내지 Q_9, Q_{11} 내지 Q_{19}, Q_{21} 내지 Q_{29} 및 Q_{31} 내지 Q_{39}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

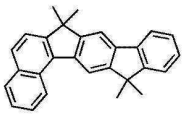
[0286] 일 구현예를 따르면, 상기 R_{51} 내지 R_{65} 및 R_{501} 내지 R_{508}에 대한 설명은 상기 R_1에 대한 설명을 참조할 수 있다.

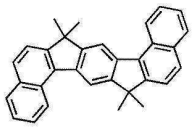
[0287] 일 구현예를 따르면, 상기 에미터는 축합다환 화합물 및 스티릴계 화합물 중에서 선택될 수 있다.

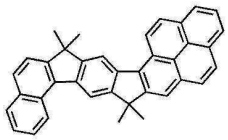
[0288] 일 구현예를 따르면, 상기 에미터는 나프탈렌-함유 코어, 플루오렌-함유 코어, 스파이로-비플루오렌-함유 코어, 벤조플루오렌-함유 코어, 디벤조플루오렌-함유 코어, 페난트렌-함유 코어, 안트라센-함유 코어, 플루오란텐-함유 코어, 트리페닐렌-함유 코어, 파이렌-함유 코어, 크라이센-함유 코어, 피센-함유 코어, 페릴렌-함유 코어, 펜타센-함유 코어, 인데노안트라센-함유 코어, 테트라센-함유 코어, 비스안트라센-함유 코어 및 하기 화학식 501-1 내지 501-21으로 표시되는 코어 중 하나를 포함할 수 있다:

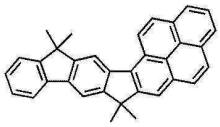
[0289]

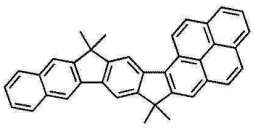

501-1


501-2


501-3

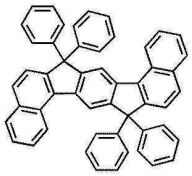

501-4


501-5

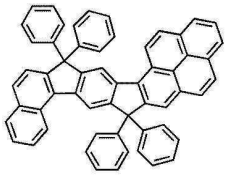

501-6

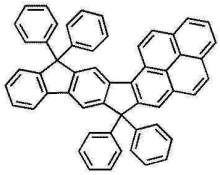

501-7

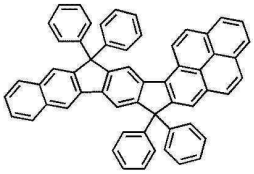

501-8


501-9

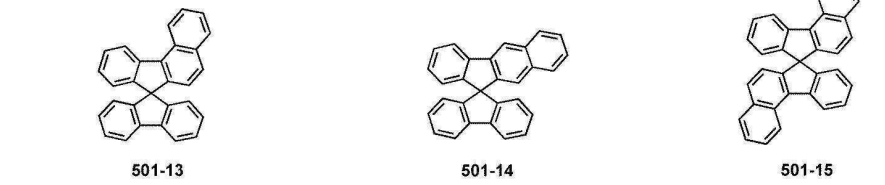
[0290]


501-10

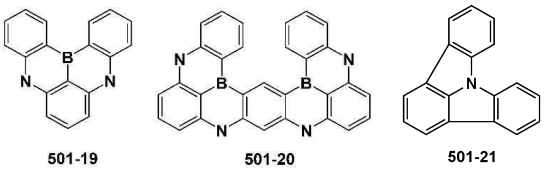

501-11


501-12

[0291]



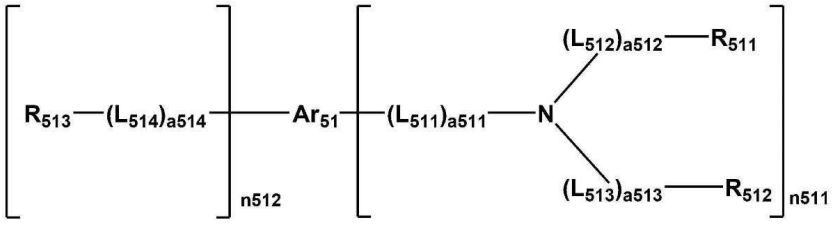
[0292]



[0293] 구체적으로, 상기 에미터는 하기 화학식 501로 표시될 수 있다:

[0294] <화학식 501>

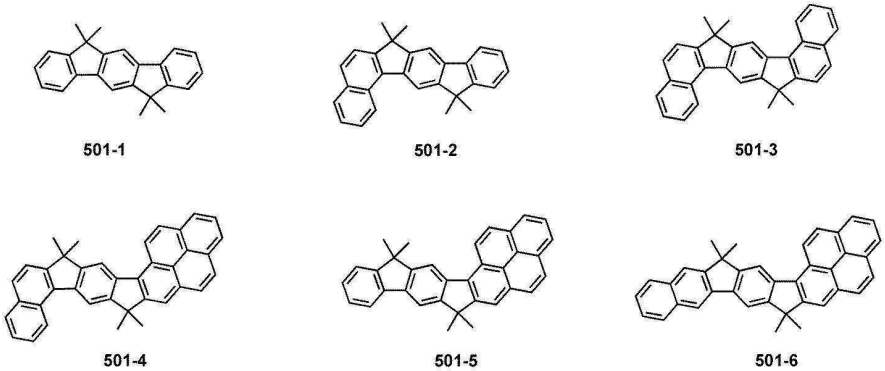
[0295]



[0296] 상기 화학식 501 중,

[0297] Ar_{51}은 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 술폰산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{511})(Q_{512})(Q_{513})$, $-Ge(Q_{511})(Q_{512})(Q_{513})$, $-C(Q_{511})(Q_{512})(Q_{513})$, $-B(Q_{511})(Q_{512})$, $-N(Q_{511})(Q_{512})$, $-P(Q_{511})(Q_{512})$, $-C(=O)(Q_{511})$, $-S(=O)(Q_{511})$, $-S(=O)_2(Q_{511})$, $-P(=O)(Q_{511})(Q_{512})$, $-P(=S)(Q_{511})(Q_{512})$, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-비플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타센 그룹, 인데노안트라센 그룹, 테트라센 그룹, 비스안트라센 그룹 또는 하기 화학식 501-1 내지 501-21으로 표시되는 그룹; 이고;

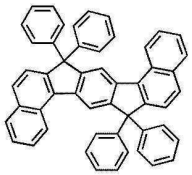
[0298]

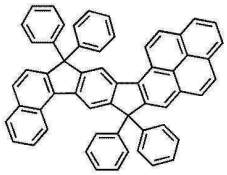


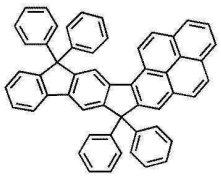
[0299]

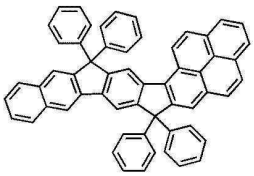

501-7

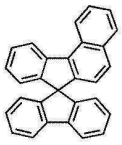

501-8

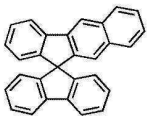

501-9

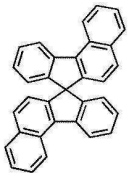

501-10


501-11

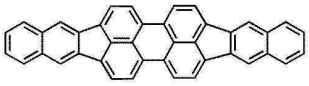

501-12

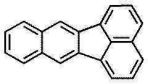

501-13

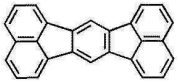

501-14


501-15

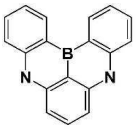
[0300]

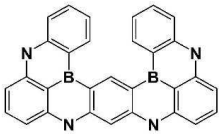

501-16

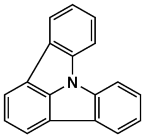

501-17


501-18

[0301]


501-19


501-20


501-21

[0302] L_{511} 내지 L_{514}는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0303] a511 내지 a514는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 및 3 중에서 선택되고,

[0304] R_{511} 내지 R_{513}은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택되고,

[0305] Q_{511} 내지 Q_{513}은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_7-C_{60}알킬아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F, 시아노기, C_1-C_{20}알킬기 및 C_6-C_{30}아릴기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{60}알킬기 및 중수소, -F, 시아노기,

C_1-C_{20}알킬기 및 C_6-C_{30}아릴기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_6-C_{60}아릴기 중에서 선택되고,

[0306] n511 및 n512는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4, 5 및 6 중에서 선택된다.

[0307] 예를 들어, 상기 화학식 51 중, n511 및 n512의 합은 1 이상일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

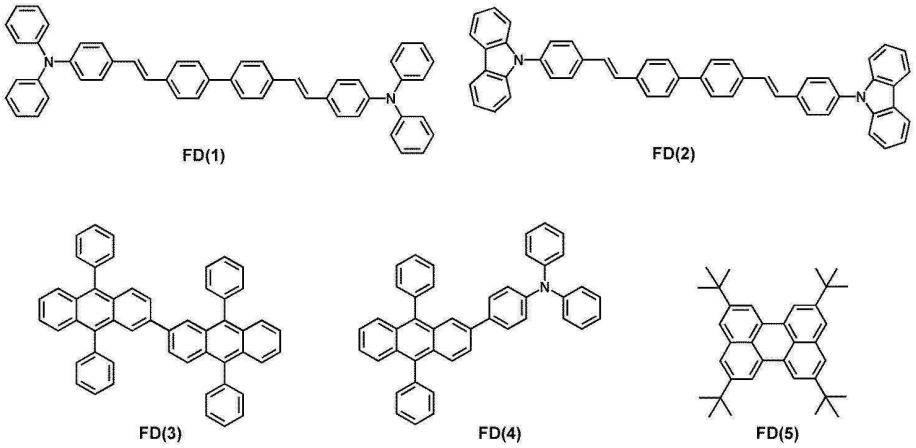
[0308] 예를 들어, 상기 화학식 51 중, R_{511} 및 R_{512}는 서로 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 및

[0309] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-비플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기 및 디벤조티오페닐기; 중에서 선택될 수 있다.

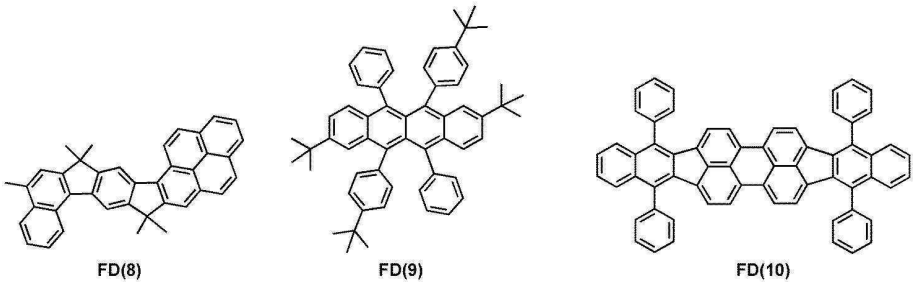
[0310] 일 실시예에 있어서, 상기 에미터는 하기 그룹 FD1 중에서 선택될 수 있다:

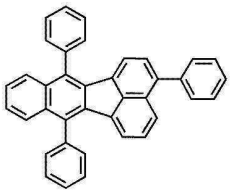
[0311] <그룹 FD1>

[0312]

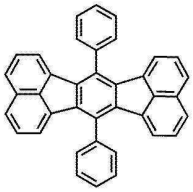


[0313]

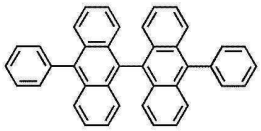




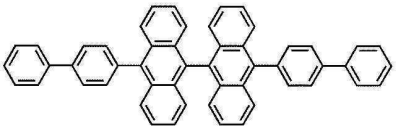
FD(11)



FD(12)



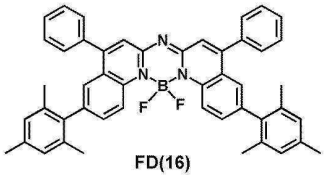
FD(13)



FD(14)

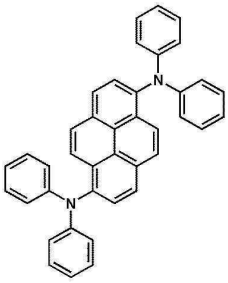


FD(15)

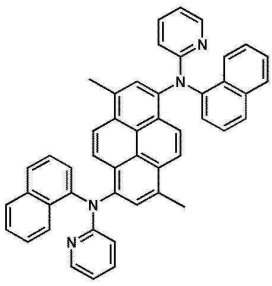


FD(16)

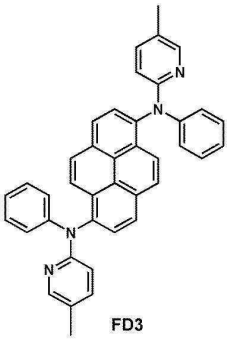
[0314]



FD1

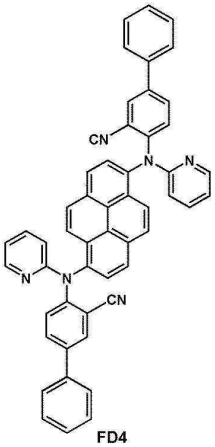


FD2

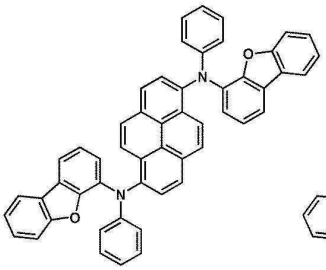


FD3

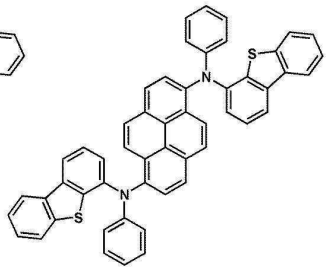
[0315]



FD4

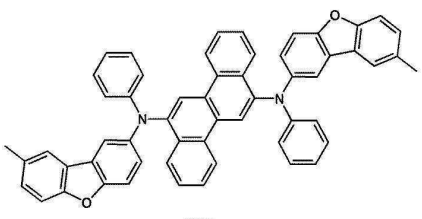


FD5

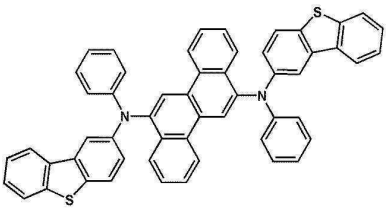


FD6

[0316]



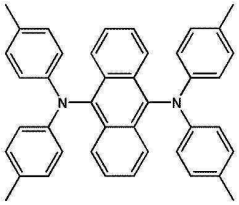
FD7



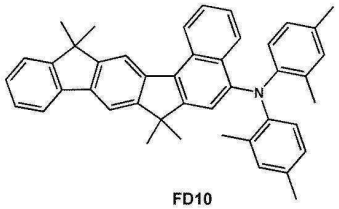
FD8

[0317]

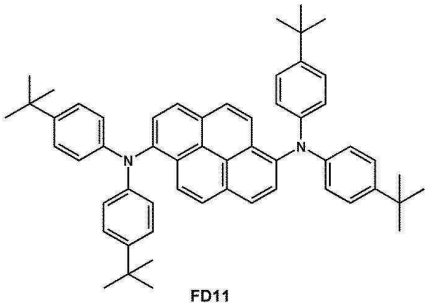
[0318]



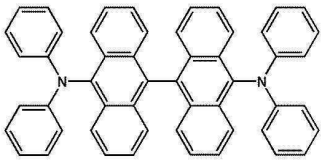
FD9



FD10

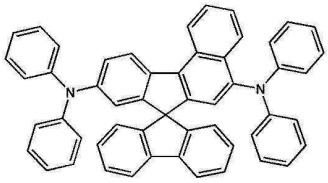


FD11



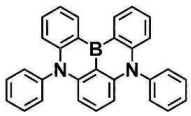
FD12

[0319]

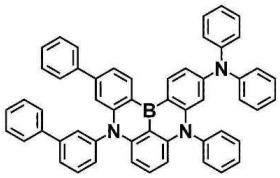


FD13

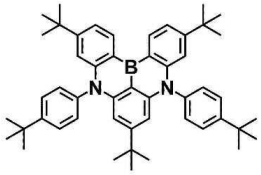
[0320]



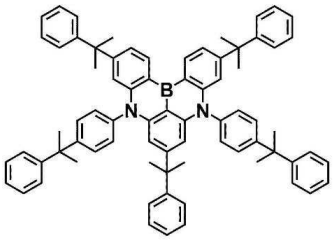
BD1-1



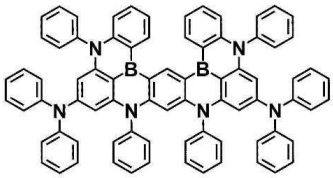
BD1-2



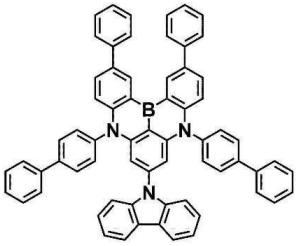
BD1-3



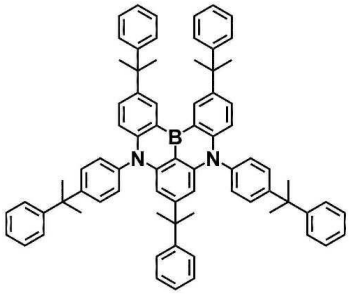
BD1-4



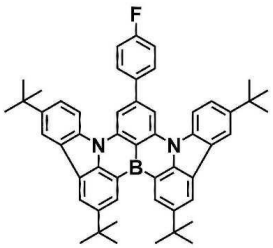
BD1-5



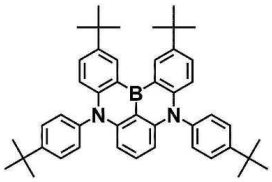
BD1-6



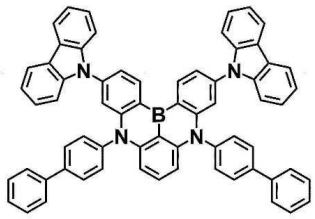
BD1-7



BD1-8



BD1-9



BD1-10

[0321]

[0322] 상기 에미터의 발광 스펙트럼의 최대 발광 파장은 400nm 이상 및 650nm 이하일 수 있다. 예를 들어, 상기 에미터의 발광 스펙트럼의 최대 발광 파장은 400nm 이상 및 550nm 이하, 40nm 이상 및 495nm 이하, 450 nm 이상 및 495 nm 이하일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 에미터는 청색광 내지 녹색광, 구체적으로 청색광을 방출할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 "최대 발광 파장"은 발광 세기가 최대인 파장을 가리키는 것으로서, "피크 발광 파장"이라고도 할 수 있다.

[0323] 상기 발광층 중 상기 에미터의 함량은 0.01 중량% 내지 15 중량% 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0324] 상기 발광층 중 상기 호스트, 상기 센서타이저 및 상기 에미터의 함량은 상기 호스트가 가장 크고, 상기 에미터가 가장 작을 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0325] 상기 유기 발광 소자는 하기 조건 1을 만족할 수 있다:

[0326] <조건 1>

[0327] $S_1(H) > S_1(S) \geq S_1(E)$

[0328] 상기 조건 1 중,

[0329] $S_1(H)$은 상기 호스트의 최저 여기 일중항 에너지 레벨이고;

[0330] $S_1(S)$은 상기 센서타이저의 최저 여기 일중항 에너지 레벨이고;

[0331] $S_1(E)$는 상기 에미터의 최저 여기 일중항 에너지 레벨이다.

[0332] $S_1(H)$, $S_1(S)$ 및 $S_1(E)$는 각각 쿼츠 기판 상에 호스트, 센서타이저 또는 에미터를 10^{-7} torr의 진공도에서 진공 공증착하여 수득한 40nm 두께의 필름에 대해 얻어진 PL 스펙트럼으로부터 계산한 값이다.

[0333] 상기 조건 1을 만족하면, 상기 에미터가 발광할 수 있고, 향상된 효율의 유기 발광 소자를 제공할 수 있다.

[0334] 예를 들어, 상기 조건 1을 만족하면, 상기 유기 발광 소자에서 상기 에미터로부터의 발광 비율이 85% 이상일 수 있다. 즉, 상술한 범위를 만족하면, 상기 유기 발광 소자에서 상기 에미터만이 실질적으로 발광하고, 상기 엑시플렉스와 상기 센서타이저는 실질적으로 발광하지 않을 수 있다.

[0335] 상기 호스트에서 형성된 일중항 및/또는 삼중항 엑시톤이 상기 센서타이저에 전이된 다음, 역항간전이(RISC)를 통해 상기 센서타이저에서 삼중항 엑시톤이 일중항 엑시톤으로 변환된 후, Förster 에너지 전이(FRET)를 통해

에미터로 전이된다. 상기 호스트의 일중항 엑시톤 및 삼중항 엑시톤을 모두 상기 에미터에 전달할 수 있기 때문에, 상기 유기 발광 소자는 현저히 향상된 수명 및 효율을 가질 수 있다.

[0336] 한편, 상기 호스트 및 상기 센서타이저는 하기 조건 2를 만족할 수 있다:

[0337] <조건 2>

[0338] $T_1(H) \geq T_1(S)$

[0339] 상기 조건 2 중,

[0340] $T_1(H)$은 상기 호스트의 최저 여기 삼중항 에너지 레벨이고;

[0341] $T_1(S)$은 상기 센서타이저의 최저 여기 삼중항 에너지 레벨이다.

[0342] [발광층 중 센서타이저]

[0343] 상기 센서타이저는 상기 유기금속 화합물을 포함할 수 있다.

[0344] 일 구현예를 따르면, 상기 센서타이저는 인광 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0345] 일 구현예를 따르면, 상기 인광 화합물은 1종 이상의 금속을 포함할 수 있다.

[0346] 일 구현예를 따르면, 상기 인광 화합물은 전이 금속 중에서 선택된 1종 이상의 금속(M_{11}) 및 유기 리간드(L_{11})를 포함할 수 있고, L_{11} 및 M_{11}은 1, 2, 3 또는 4개의 시클로메탈화 고리(cyclometallated ring)를 형성할 수 있다.

[0347] 일 구현예를 따르면, 상기 인광 화합물은 하기 화학식 101로 표시될 수 있다.

[0348] <화학식 101>

[0349] $M_{11}(L_{11})_{n11}(L_{12})_{n12}$

[0350] 상기 화학식 101 중,

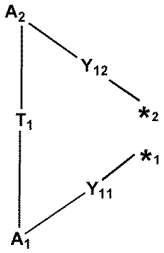
[0351] M_{11}은 전이 금속이고,

[0352] L_{11}은 하기 화학식 1-1 내지 1-4 중 어느 하나로 표시된 리간드이고;

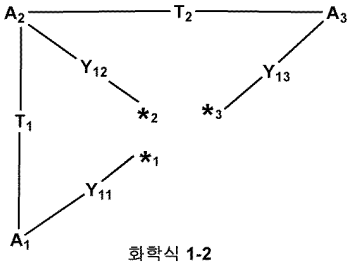
[0353] L_{12}는 1자리(monodentate) 리간드 또는 2자리(bidentate)이고,

[0354] n11은 1이고,

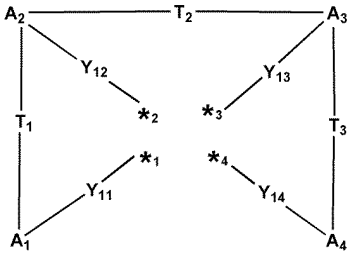
[0355] n12는 0, 1 및 2 중에서 선택되고,



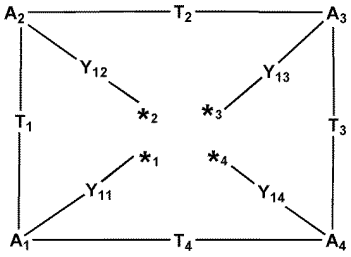
화학식 1-1



화학식 1-2



화학식 1-3



화학식 1-4

[0356]

[0357] 상기 화학식 1-1 내지 1-4 중,

[0358] A_1 내지 A_4는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹 및 비고리형(non-cyclic) 그룹 중에서 선택되고,

[0359] Y_{11} 내지 Y_{14}는 서로 독립적으로, 화학 결합, O, S, $N(R_{91})$, $B(R_{91})$, $P(R_{91})$ 또는 $C(R_{91})(R_{92})$이고,

[0360] T_1 내지 T_4는 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, *-$N(R_{93})$-*', *-$B(R_{93})$-*', *-$P(R_{93})$-*', *-$C(R_{93})(R_{94})$-*', *-$Si(R_{93})(R_{94})$-*', *-$Ge(R_{93})(R_{94})$-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-$S(=O)_2$-*', *-$C(R_{93})$=*', *=$C(R_{93})$-*', *-$C(R_{93})$=$C(R_{94})$-*', *-C(=S)-*' 및 *-C≡C-*' 중에서 선택되고,

[0361] 상기 치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹의 치환기, 치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹의 치환기 및 R_{91} 내지 R_{94}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-SF_5$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 방향족 헤테로축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-Ge(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-C(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되되, 상기 치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹의 치환기 및 치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹의 치환기는 수소가 아니고,

[0362] $*_1$, $*_2$, $*_3$ 및 $*_4$는 M_{11}과의 결합 사이트이고,

[0363] Q_1 내지 Q_3는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기,

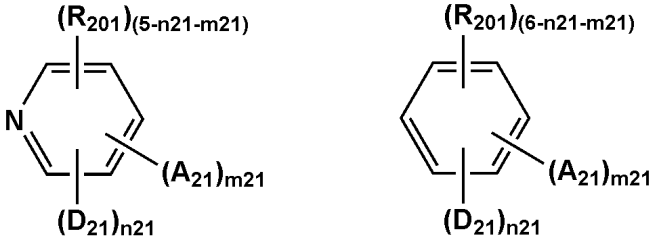
C_7-C_{60}알킬아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 방향족 축합다환 그룹, 1가 방향족 헤테로축합다환 그룹, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F, 시아노기, C_1-C_{60}알킬기 및 C_6-C_{60}아릴기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{60}알킬기 및 중수소, -F, 시아노기, C_1-C_{60}알킬기 및 C_6-C_{60}아릴기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_6-C_{60}아릴기 중에서 선택된다.

[0364] 일 구현예를 따르면, 상기 전이 금속은 백금(Pt), 팔라듐(Pd), 금(Au), 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), 하프늄(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 툴륨(Tm) 또는 로듐(Rh) 일 수 있다.

[0365] 일 구현예를 따르면, 상기 센서타이저는 지연 형광 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0366] 일 구현예를 따르면, 상기 지연 형광 화합물은 하기 화학식 101 또는 102로 표시될 수 있다.

[0367] <화학식 101> <화학식 102>

[0368] 

[0369] 상기 화학식 101 및 102 중,

[0370] A_{21}은 억셉터기이고,

[0371] D_{21}은 도너기이고,

[0372] m21은 1, 2 또는 3이고, n21은 1, 2, 또는 3이고,

[0373] 상기 화학식 101 중 n21 및 m21의 합은 6 이하이고, 상기 화학식 102 중 n21 및 m21의 합은 5 이하이고;

[0374] R_{201}은 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-SF_5$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_7-C_{60}알킬아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-Ge(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-C(Q_1)(Q_2)(Q_3)$, $-B(Q_1)(Q_2)$, $-N(Q_1)(Q_2)$, $-P(Q_1)(Q_2)$, $-C(=O)(Q_1)$, $-S(=O)(Q_1)$, $-S(=O)_2(Q_1)$, $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 및 $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ 중에서 선택되고, 복수의 R_{201}은 선택적으로(optionally), 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

[0375] Q_1 내지 Q_3는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라지노기, 히드라조노기, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_7-C_{60}알킬아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 방향족 축합다환 그룹, 1가 방향족 헤테로축합다환 그룹, 1가 비-방향

족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 중수소, -F, 시아노기, C_1-C_{60}알킬기 및 C_6-C_{60}아릴기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_1-C_{60}알킬기 및 중수소, -F, 시아노기, C_1-C_{60}알킬기 및 C_6-C_{60}아릴기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된 C_6-C_{60}아릴기 중에서 선택된다.

[0376] 일 구현예를 따르면, 상기 화학식 101 및 102 중, A_{21}은 치환 또는 비치환된 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹일 수 있다.

[0377] 구체적으로, 상기 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹은 벤젠 그룹, 헵탈렌 그룹, 인덴 그룹, 나프탈렌 그룹, 아줄렌 그룹, 인다센 그룹, 아세나프틸렌 그룹, 플루오렌 그룹, 스파이로-바이플루오렌 그룹, 벤조플루오렌 그룹, 디벤조플루오렌 그룹, 페날렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 나프타센 그룹, 피센 그룹, 페릴렌 그룹, 펜타센 그룹, 헥사센 그룹, 펜타센 그룹, 루비센 그룹, 코로젠 그룹, 오발렌 그룹, 피롤 그룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디벤조카바졸 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 설폰(dibenzothiophene sulfone) 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 인데노카바졸 그룹, 인돌로카바졸 그룹, 벤조퓨로카바졸 그룹, 벤조티에노카바졸 그룹 및 트라이인돌로벤젠 그룹; 및 2 이상의 상기 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹의 축합환; 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0378] 예를 들어, 상기 화학식 101 및 102 중, D_{21}은 -F, 시아노기, π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹;

[0379] -F 및 시아노기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{60}알킬기, π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹; 및

[0380] 중수소, C_1-C_{60}알킬기, π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹 및 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹; 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹; 중에서 선택될 수 있다.

[0381] 구체적으로, 상기 π 전자 결핍성 질소-비함유 시클릭 그룹은 전술한 바를 참조한다.

[0382] 구체적으로, π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹은 적어도 하나의 *-N=*' 모이어티를 갖는 시클릭 그룹으로서, 예를 들면, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 피리미딘 그룹, 인다졸 그룹, 푸린(purine) 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 프탈라진 그룹, 나프티리딘 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 페난트리딘 그룹, 아크리딘 그룹, 페난트롤린 그룹, 페나진 그룹, 벤즈이미다졸 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 이소벤조옥사졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 티아디아졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹, 이미다조피리미딘 그룹, 아자카바졸 그룹, 및 벤즈이미다졸로벤즈이미다졸; 및 2 이상의 상기 π 전자 결핍성 함질소 시클릭 그룹의 축합환; 중에서 선택될 수 있다.

[0383] 일 구현예에 따르면, 상기 유기층 중 상기 센서타이저의 함량이 상기 에미터의 함량보다 클 수 있다. 예를 들어, 상기 센서타이저와 상기 에미터의 부피비가 30:0.1 내지 10:3, 또는 10:0.1 내지 20:5일 수 있다. 다른 예를 들어, 상기 센서타이저와 상기 에미터의 중량비는 10:0.1 내지 20:5일 수 있다. 한편, 상기 유기층 중 상기 호스트와 상기 센서타이저의 부피비는 60:40 내지 95:5 또는 70:30 내지 90:10일 수 있다. 또는, 상기 호스트와 상기 센서타이저의 중량비는 60:40 내지 95:5의 범위 중에서 선택될 수 있다. 상술한 바와 같은 함량 범위를 만족함으로써, 상기 유기 발광 소자는 향상된 발광 효율 및/또는 수명 특성을 가질 수 있다.

[0384] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다. 유기 발광 소자(10)는 제1전극(11), 유기층(15) 및 제2전극(19)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.

[0385] 상기 제1전극(11) 하부 또는 제2전극(19) 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

[0386] 상기 제1전극(11)은 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 애노드일 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO_2), 산화아연(ZnO)

등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등과 같은 금속을 이용할 수 있다.

[0387] 상기 제1전극(11)은 단일층 또는 2 이상의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(11)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0388] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.

[0389] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.

[0390] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.

[0391] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 버퍼층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0392] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층만을 포함하거나, 정공 수송층만을 포함할 수 있다. 또는, 상기 정공 수송 영역은, 제1전극(11)로부터 차례로 적층된, 정공 주입층/정공 수송층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 구조를 가질 수 있다.

[0393] 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(11) 상부에 진공증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

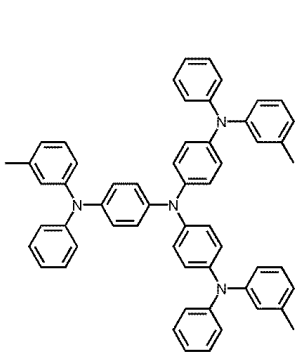
[0394] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 ℃ 내지 약 500 ℃, 진공도 약 10^{-8} torr 내지 약 10^{-3} torr, 증착 속도 약 0.01 Å/sec 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0395] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2,000 rpm 내지 약 5,000 rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80 ℃ 내지 200 ℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

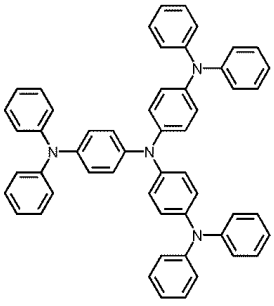
[0396] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.

[0397] 상기 정공 수송 영역은, 예를 들면, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB, β-NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, methylated NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), PANI/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술폰산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캠퍼술폰산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:

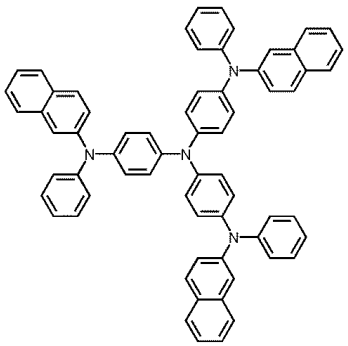
[0398]



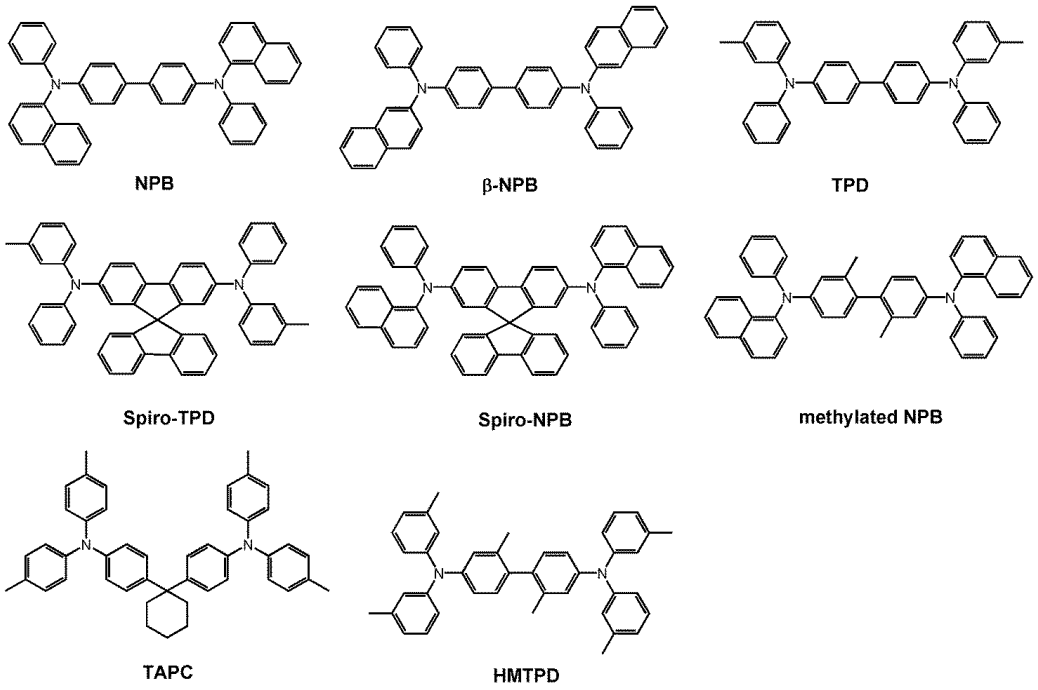
m-MTDATA



TDATA

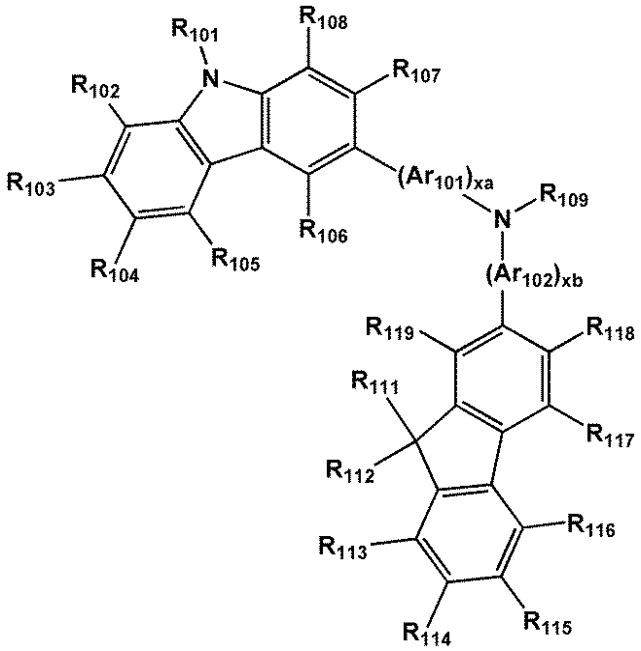


2-TNATA



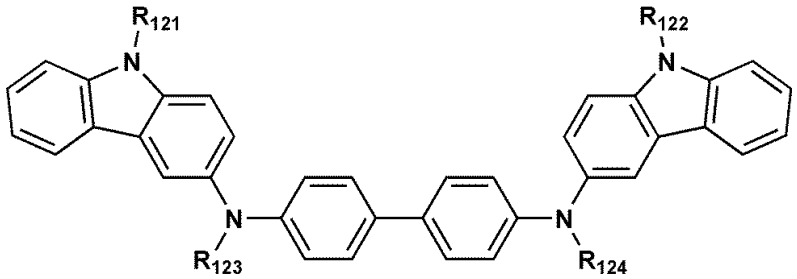
[0399]

[0400] <화학식 201>



[0401]

[0402] <화학식 202>



[0403]

[0404] 상기 화학식 201 중, Ar_{101} 및 Ar_{102}는 서로 독립적으로,

[0405] 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌

기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 펙릴레닐렌기 또는 펜타세닐렌기; 또는

[0406] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 펙릴레닐렌기 또는 펜타세닐렌기;일 수 있다.

[0407] 상기 화학식 201 중, 상기 xa 및 xb는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수, 또는 0, 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, 상기 xa는 1이고, xb는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0408] 상기 화학식 201 및 202 중, 상기 R_{101} 내지 R_{108}, R_{111} 내지 R_{119} 및 R_{121} 내지 R_{124}는 서로 독립적으로,

[0409] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{10}알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등) 또는 C_1-C_{10}알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등);

[0410] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{10}알킬기 또는 C_1-C_{10}알콕시기;

[0411] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 또는 파이레닐기; 또는

[0412] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{10}알킬기, C_1-C_{10}알콕시기 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 또는 파이레닐기;일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

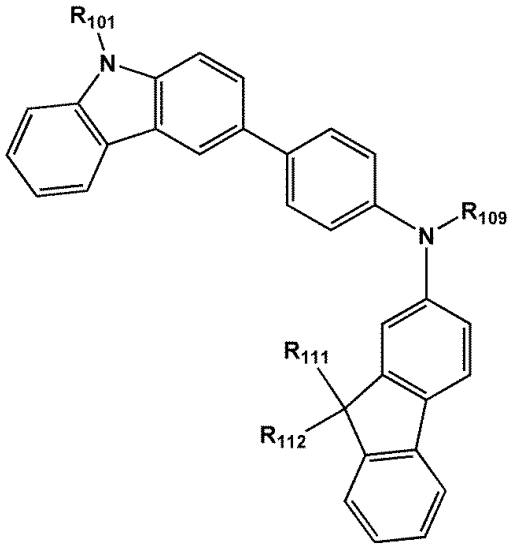
[0413] 상기 화학식 201 중, R_{109}는,

[0414] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 또는 피리디닐기; 또는

[0415] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C_1-C_{20}알킬기, C_1-C_{20}알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 피리디닐기, 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 또는 피리디닐기;일 수 있다.

[0416] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

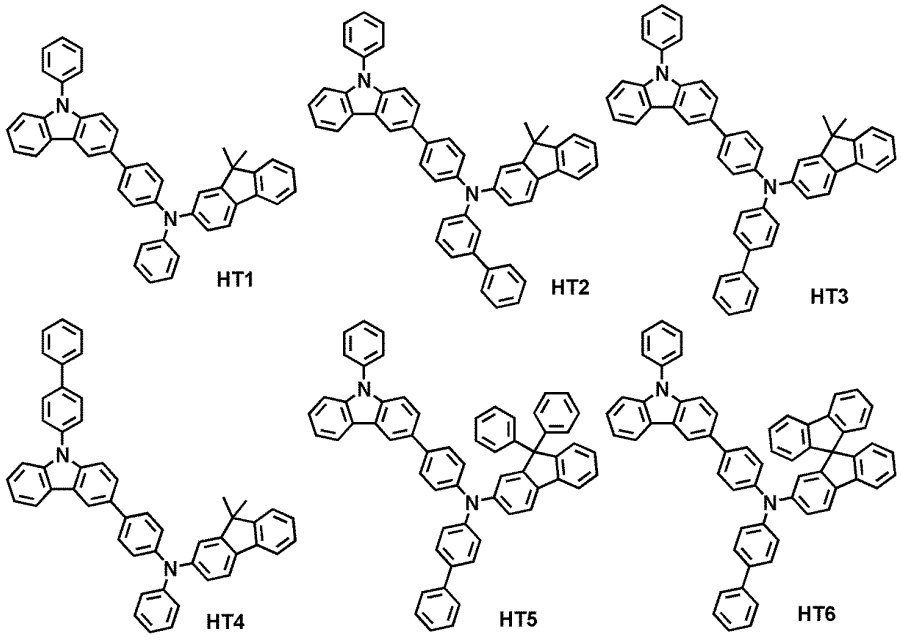
[0417] <화학식 201A>



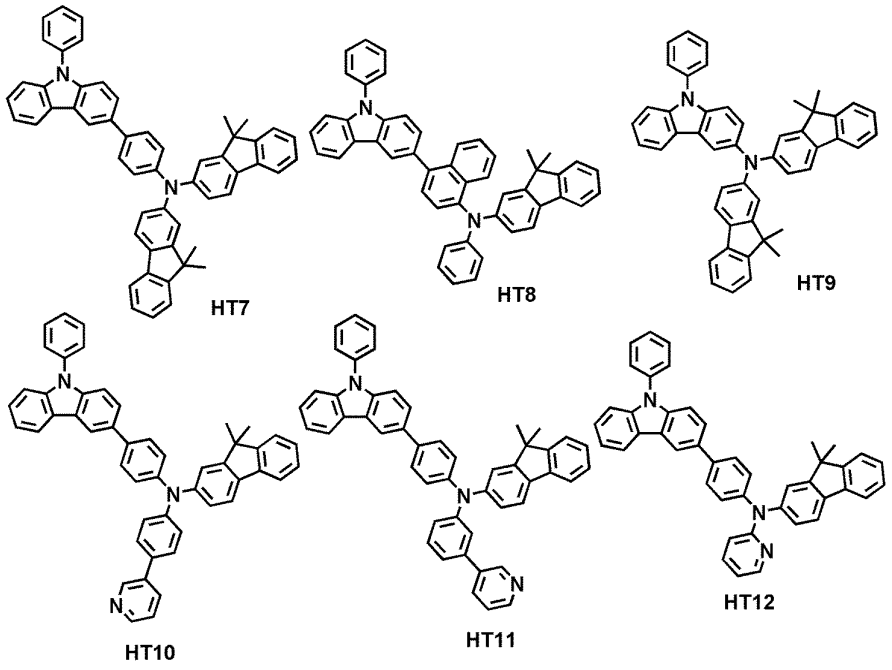
[0418]

[0419] 상기 화학식 201A 중, R_{101}, R_{111}, R_{112} 및 R_{109}에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

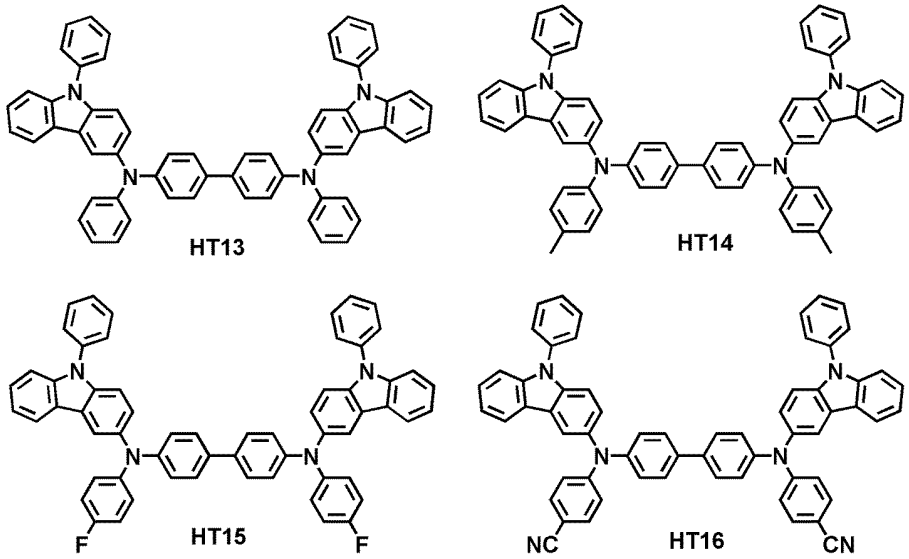
[0420] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0421] 

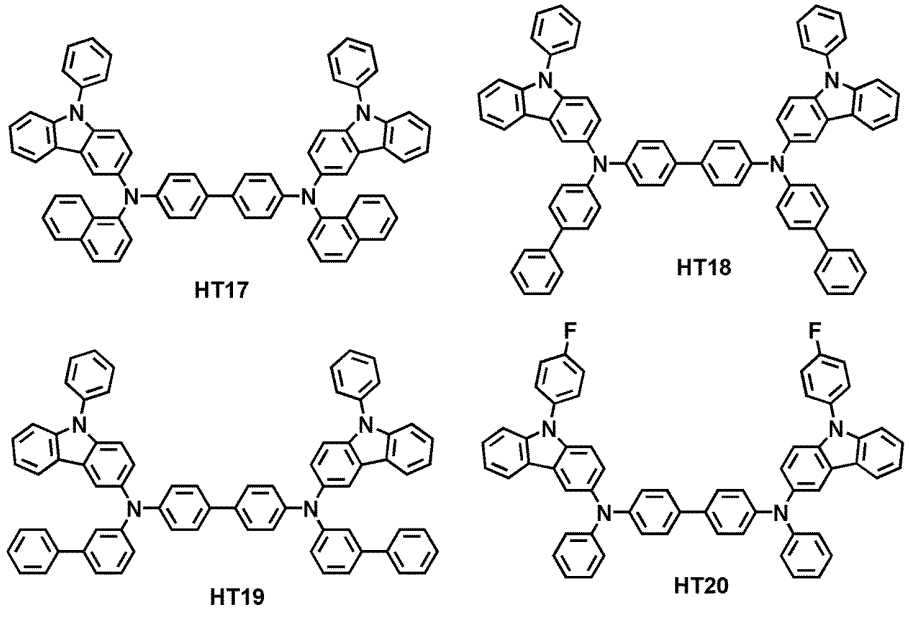
[0422]



[0423]



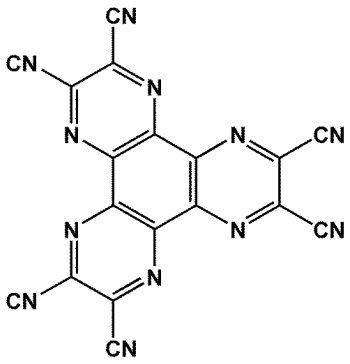
[0424]



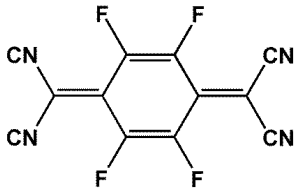
[0425] 상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100 Å 내지 약 10,000 Å, 예를 들면, 약 100 Å 내지 약 1,000 Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 하나를 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100 Å 내지 약 10,000 Å, 예를 들면, 약 100 Å 내지 약 1,000 Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50 Å 내지 약 2,000 Å, 예를 들면 약 100 Å 내지 약 1,500 Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0426] 상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 전하-생성 물질은 상기 정공 수송 영역 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

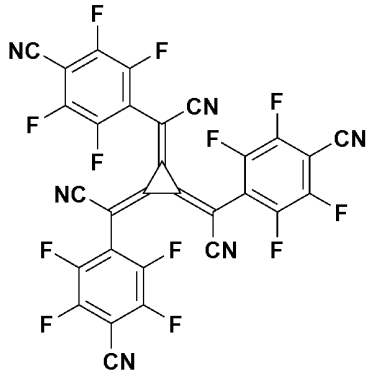
[0427] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 HT-D1, F12 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0428] 

HT-D1



F4-TCNQ



F12

[0429]

[0430] 상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

[0431] 상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 수 있다.

[0432] 상기 정공 수송 영역 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0433] 한편, 상기 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 상기 전자 저지층 재료는, 상술한 바와 같은 정공 수송 영역에 사용될 수 있는 물질 및 후술하는 호스트 물질 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 전자 저지층 재료로서, 후술하는 mCP를 사용할 수 있다.

[0434] 상기 유기 발광 소자가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패터닝될 수 있다. 또는, 상기 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및/또는 청색 발광층이 적층된 구조를 가짐으로써, 백색광을 방출할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0435] 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 중량부 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0436] 상기 발광층의 두께는 약 100 Å 내지 약 1,000 Å, 예를 들면 약 200 Å 내지 약 600 Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

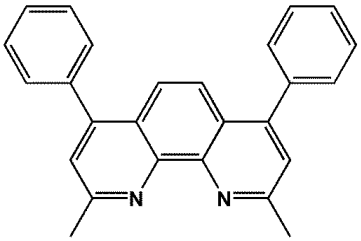
[0437] 다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.

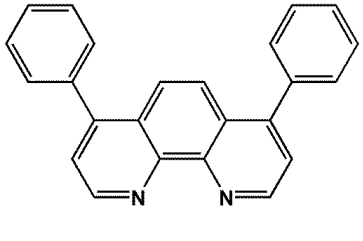
[0438] 전자 수송 영역은 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0439] 예를 들어, 전자 수송 영역은 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층 또는 전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 전자 수송층은 단일층 또는 2 이상의 서로 다른 물질을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

[0440] 상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참조한다.

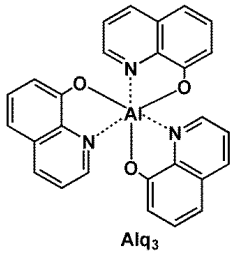
[0441] 상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP, Bphen 및 BAlq 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

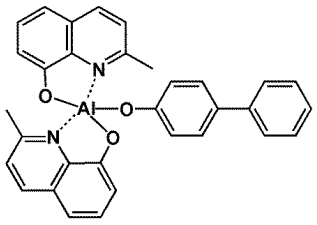
[0442] 
BCP

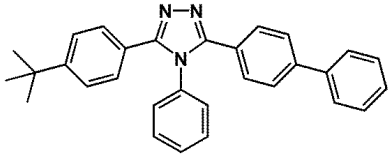

Bphen

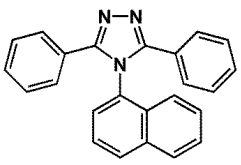
[0443] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1,000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0444] 상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq_3, BAlq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.

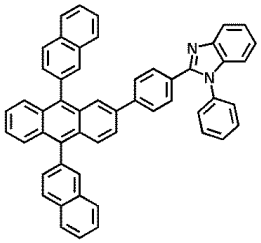

Alq_3


BAlq

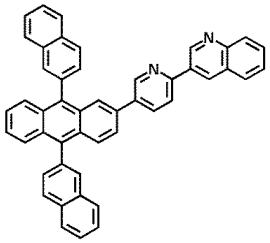
[0445] 
TAZ


NTAZ

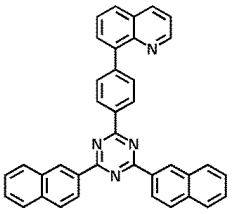
[0446] 또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 내지 ET25 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



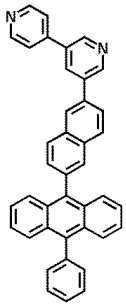
ET1



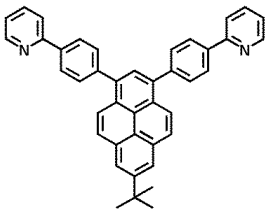
ET2



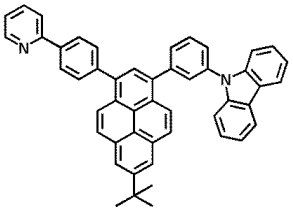
ET3



ET4

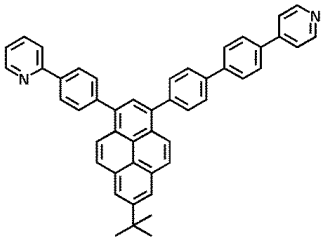


ET5

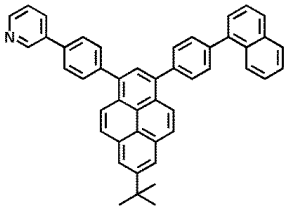


ET6

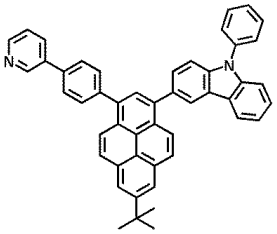
[0447]



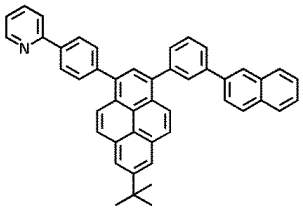
ET7



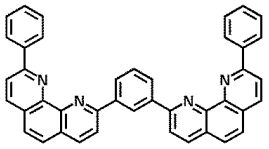
ET8



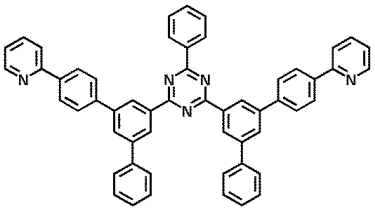
ET9



ET10

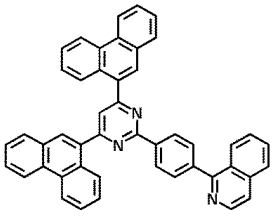


ET11

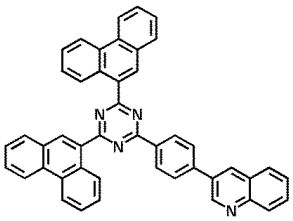


ET12

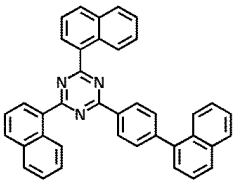
[0448]



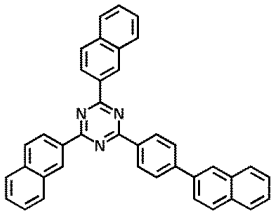
ET13



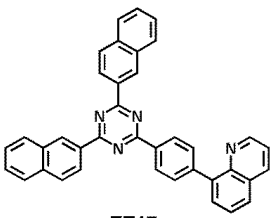
ET14



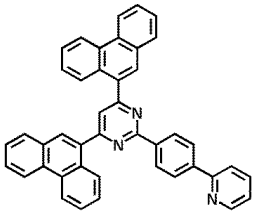
ET15



ET16

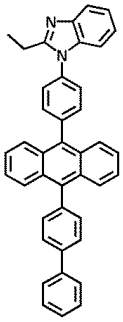


ET17

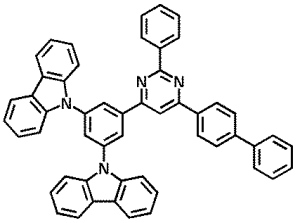


ET18

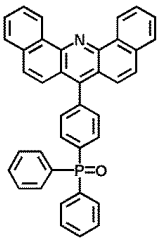
[0449]



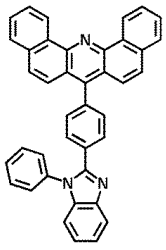
ET19



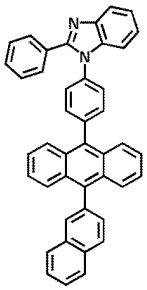
ET20



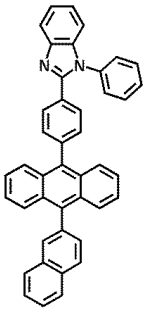
ET21



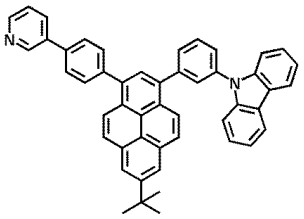
ET22



ET23



ET24



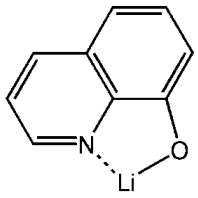
ET25

[0450]

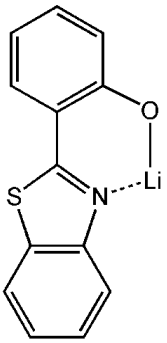
[0451] 상기 전자 수송층의 두께는 약 100 Å 내지 약 1,000 Å, 예를 들면 약 150 Å 내지 약 500 Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0452] 상기 전자 수송층은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0453] 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2을 포함할 수 있다.



ET-D1



ET-D2

[0454]

[0455] 또한 전자 수송 영역은, 제2전극(19)으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 전자 주입층(EIL)을 포함할 수 있다.

[0456] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li_2O, BaO 또는 이들의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

[0457] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1 Å 내지 약 100 Å, 예를 들면, 약 3 Å 내지 약 90 Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0458] [제2전극(19)]

[0459] 상기 유기층(15) 상부로는 제2전극(19)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(19)은 캐소드일 수 있다. 상기 제2전극(19)용 물질로는 상대적으로 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-

인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 제2전극(19) 형성용 물질로 사용할 수 있다. 또는, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용하여 투과형 제2전극(19)을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0460] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0461] 또 다른 측면에 따르면, 상기 유기 발광 소자를 포함한 전자 장치가 제공될 수 있다.

[0462] 상기 전자 장치는, 상술한 바와 같은 유기 발광 소자 외에 박막 트랜지스터를 더 포함할 수 있다. 상기 박막 트랜지스터는 소스 전극, 드레인 전극 및 활성층을 포함할 수 있고, 상기 소스 전극 및 드레인 전극 중 어느 하나와 상기 유기 발광 소자의 제1전극 및 제2전극 중 어느 하나는 전기적으로 연결될 수 있다.

[0463] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

[0464] 상기 진단용 조성물은 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0465] 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 고발광 효율을 제공할 수 있으므로, 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물은 높은 진단 효율을 가질 수 있다.

[0466] 상기 진단용 조성물은, 각종 진단용 키트, 진단 시약, 바이오 센서, 바이오 마커 등에 다양하게 응용될 수 있다.

[0467] 본 명세서 중 C_1-C_{60}알킬기는 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 포화 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_1-C_{60}알킬렌기는 상기 C_1-C_{60}알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

[0468] 본 명세서 중 C_1-C_{60}알킬기, C_1-C_{20}알킬기 및/또는 C_1-C_{10}알킬기의 예에는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, tert-펜틸기, 네오펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, 3-펜틸기, sec-이소펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기, tert-데실기, 또는 이의 임의의 조합으로 치환 또는 비치환된, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, tert-펜틸기, 네오펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, 3-펜틸기, sec-이소펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노닐기, 이소노닐기, sec-노닐기, tert-노닐기, n-데실기, 이소데실기, sec-데실기 또는 tert-데실기 등이 포함될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 9-33은 분지형 C6알킬기로서, 2개의 메틸기로 치환된 tert-부틸기로 볼 수 있다.

[0469] 본 명세서 중 C_1-C_{60}알콕시기는 $-OA_{101}$(여기서, A_{101}은 상기 C_1-C_{60}알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.

[0470] 본 명세서 중 C_1-C_{60}알콕시기, C_1-C_{20}알콕시기 또는 C_1-C_{10}알콕시기의 예에는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기 또는 펜톡시기 등이 포함될 수 있다.

[0471] 본 명세서 중 C_2-C_{60}알케닐기는 상기 C_2-C_{60}알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_2-C_{60}알케닐렌기는 상기 C_2-C_{60}알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0472] 본 명세서 중 C_2-C_{60}알키닐기는 상기 C_2-C_{60}알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세서 중 C_2-C_{60}알키닐렌기는 상기 C_2-C_{60}알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0473] 본 명세서 중 C_3-C_{10}시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C_3-C_{10}시클로알킬렌기는 상기 C_3-C_{10}시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0474] 본 명세서 중 C_3-C_{10}시클로알킬기의 예에는, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]pentyl), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexyl), 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]heptyl)(노르보나닐기(norbornanyl)), 비시클로[2.2.2]옥틸기 등이 포함될 수 있다.

[0475] 본 명세서 중 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오페닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬렌기는 상기 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0476] 본 명세서 중 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기의 예에는, 실로라닐기(silolanyl), 실리나닐기(silinanyl), 테트라하이드로퓨라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라하이드로-2H-피라닐기(tetrahydro-2H-pyranyl), 테트라하이드로티오페닐기(tetrahydrothiophenyl) 등이 포함될 수 있다.

[0477] 본 명세서 중 C_3-C_{10}시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C_3-C_{10}시클로알케닐렌기는 상기 C_3-C_{10}시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0478] 본 명세서 중 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 2 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-디히드로퓨라닐기, 2,3-디히드로티오페닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C_2-C_{10}헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0479] 본 명세서 중 C_6-C_{60}아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C_6-C_{60}아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C_6-C_{60}아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C_6-C_{60}아릴기 및 C_6-C_{60}아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0480] 본 명세서 중 C_7-C_{60}알킬아릴기는 적어도 하나의 C_1-C_{60}알킬기로 치환된 C_6-C_{60}아릴기를 의미한다.

[0481] 본 명세서 중 C_1-C_{60}헤테로아릴기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C_1-C_{60}헤테로아릴렌기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C_1-C_{60}헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C_1-C_{60}헤테로아릴기 및 C_1-C_{60}헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0482] 본 명세서 중 C_2-C_{60}알킬헤테로아릴기는 적어도 하나의 C_1-C_{60}알킬기로 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기를 의미한다.

[0483] 본 명세서 중 C_6-C_{60}아릴옥시기는 $-OA_{102}$(여기서, A_{102}는 상기 C_6-C_{60}아릴기임)를 가리키고, 상기 C_6-C_{60}아릴티오기(arylthio)는 $-SA_{103}$(여기서, A_{103}은 상기 C_6-C_{60}아릴기임)를 가리킨다.

[0484] 본 명세서 중 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기는 $-OA_{104}$(여기서, A_{104}는 상기 C_1-C_{60}헤테로아릴기임)를 가리키고, 상기 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기(arylthio)는 $-SA_{105}$(여기서, A_{105}는 상기 C_1-C_{60}헤테로아릴기임)를 가리킨다.

[0485] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서

로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)를 갖는 1가 그룹(예를 들면, 8 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예는 플루오레닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0486] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)를 갖는 1가 그룹(예를 들면, 1 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은, 카바졸일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0487] 본 명세서 중 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 5 내지 30개의 탄소만을 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. "(적어도 하나의 R_{1a}로 치환 또는 비치환된) C_5-C_{30}카보시클릭 그룹"은, 예를 들어, (적어도 하나의 R_{1a}로 치환 또는 비치환된,) 아다만탄(adamantane) 그룹, 노르보르넨 그룹, 비시클로[1.1.1]펜탄 그룹, 비시클로[2.1.1]헥산 그룹, 비시클로[2.2.1]헵탄 그룹(노르보르난(norbornane) 그룹), 비시클로[2.2.2]옥탄 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헥센 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 실롤 그룹, 플루오렌 그룹 등을 포함할 수 있다.

[0488] 본 명세서 중 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 1 내지 30개의 탄소 외에, N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 적어도 하나 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. "(적어도 하나의 R_{1a}로 치환 또는 비치환된) C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹"은, 예를 들어, (적어도 하나의 R_{1a}로 치환 또는 비치환된,) 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 보롤 그룹, 포스폴 그룹, 셀레노펜 그룹, 저몰 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 인돌 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조저몰 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조저몰 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자인돌 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조저몰 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조저몰 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹 등을 포함할 수 있다.

[0489] 본 명세서 중 TMS는 *-$Si(CH_3)_3$를 나타내고, TMG는 *-$Ge(CH_3)_3$를 나타낸다.

[0490] 상기 치환된 C_5-C_{30}카보시클릭 그룹, C_1-C_{30}헤테로시클릭 그룹, C_1-C_{60}알킬기, 치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, 치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0491] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이

의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

[0492] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-Ge(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$, $-N(Q_{14})(Q_{15})$, $-B(Q_{16})(Q_{17})$, $-P(=O)(Q_{18})(Q_{19})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기 또는 C_1-C_{60}알콕시기;

[0493] C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0494] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CF_3$, $-CF_2H$, $-CFH_2$, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_1-C_{60}알킬기, C_2-C_{60}알케닐기, C_2-C_{60}알키닐기, C_1-C_{60}알콕시기, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-Ge(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$, $-N(Q_{24})(Q_{25})$, $-B(Q_{26})(Q_{27})$, $-P(=O)(Q_{28})(Q_{29})$ 또는 이들의 임의의 조합으로 치환된, C_3-C_{10}시클로알킬기, C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, C_3-C_{10}시클로알케닐기, C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, C_6-C_{60}아릴기, C_6-C_{60}아릴옥시기, C_6-C_{60}아릴티오기, C_1-C_{60}헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 또는

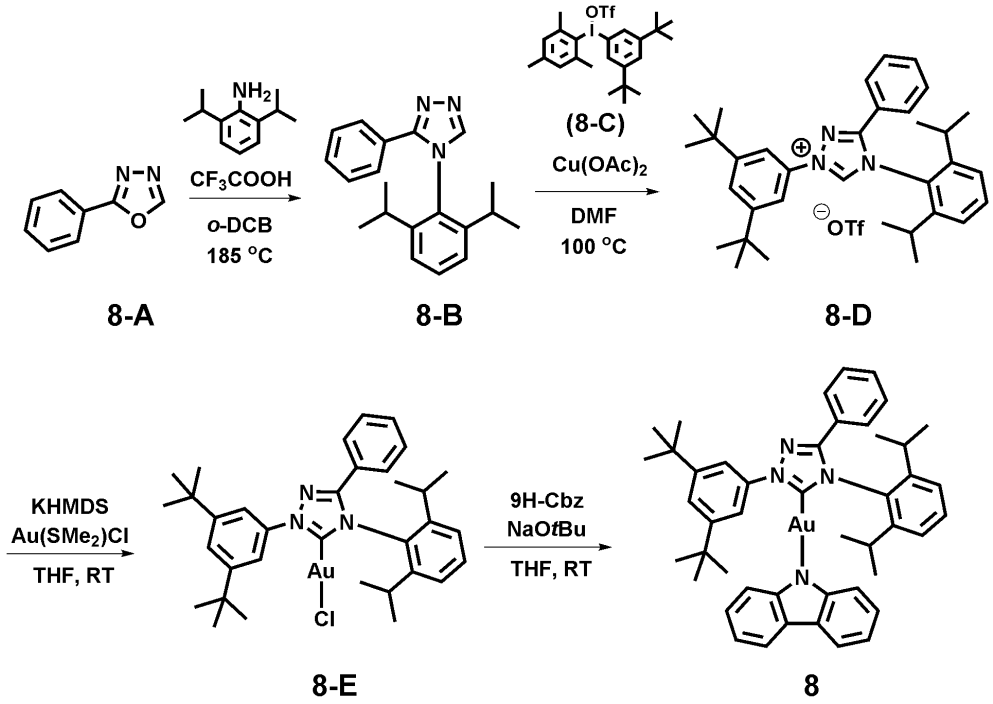
[0495] $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-Ge(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$, $-N(Q_{34})(Q_{35})$, $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 또는 $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$;이고,

[0496] 상기 Q_1 내지 Q_9, Q_{11} 내지 Q_{19}, Q_{21} 내지 Q_{29} 및 Q_{31} 내지 Q_{39}는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{10}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10}헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60}헤테로아릴기, C_1-C_{60}헤테로아릴옥시기, C_1-C_{60}헤테로아릴티오기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

[0497] 이하, 합성예 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성예 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 하기 합성예 중 "'A' 대신 'B'를 사용하였다"란 표현 중 'B'의 사용량과 'A'의 사용량은 몰당량 기준으로 동일하다.

[0498] [합성예]

[0499] **합성예 1: 화합물 1의 합성**



[0500]

[0501] (1) 화합물 8-B의 합성

[0502] 둥근 바닥 플라스크에 화합물 8-A (2.0 g, 13.7 mmol), 2,6-Diisopropylaniline (1.3 mL, 12.3 mmol)을 o-Dichlorobenzene (15 mL)에 녹인다. 그 후 Trifluoroacetic acid (1.0 mL, 13.7 mmol)를 넣어준 뒤, 185℃에서 12시간동안 환류하며 교반시켰다. 반응 완료 후 실온까지 온도를 낮춘 뒤, 에틸 아세테이트와 포화 Na_2CO_3 수용액을 첨가한다. 유기 용액층을 에틸 아세테이트를 이용해 추출하고, 무수 $MgSO_4$를 이용해 건조한 뒤 여과한다. 여과액은 농축시켜 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통해서 정제하여 1.2 g 의 화합물 8-B를 수득하였다.

[0503] (2) 화합물 8-D의 합성

[0504] 둥근 바닥 플라스크에 화합물 8-B (1.2 g, 3.93 mmol), 화합물 8-C (3.44 g, 5.90 mmol) 및 $Cu(OAc)_2$ (0.07 g, 0.393 mmol)를 넣은 후, DMF (40 mL)와 혼합한다. 100℃에서 12시간동안 환류하며 교반시켰다. 반응 완료 후 실온까지 온도를 낮춘 뒤, 에틸 아세테이트와 포화 염화암모늄 수용액을 첨가한다. 유기 용액층을 에틸 아세테이트를 이용해 추출하고, 무수 $MgSO_4$를 이용해 건조한 뒤 여과한다. 여과액은 농축시켜 실리카겔 컬럼 크로마토그래피를 통해서 정제하여 2.2 g 의 화합물 8-D를 수득하였다.

[0505] (3) 화합물 8-E의 합성

[0506] 둥근 바닥 플라스크에 화합물 8-D (2.2 g, 3.54 mmol)를 THF에 녹인 후, Ice-bath를 통해 온도를 낮춘다. KHMDS (1.0M in THF) 3.5 mL를 넣어준 뒤, 상온으로 승온시킨다. 그 후 $Au(SMe)_2Cl$ (1.0 g, 3.54 mmol)을 첨가해준 뒤 12시간동안 교반시켰다. 반응 용액을 Celite를 통해 여과시키고, 여과액을 증류시켜 남은 고체를 헥산으로 씻어준다. 1.2 g의 화합물 8-E를 수득하였다.

[0507] (4) 화합물 8의 합성

[0508] 둥근 바닥 플라스크에 화합물 8-E (1.2 g, 1.65 mmol), 9H-carbazole (0.28 g, 1.65 mmol)를 THF에 녹인다. NaOtBu (0.16 g, 1.65 mmol)를 첨가해준 뒤 12시간동안 교반시켰다. 반응 용액을 Celite를 통해 여과시키고, 여과액을 증류시켜 남은 고체를 헥산으로 씻어준다. 1.1 g 의 화합물 8을 수득하였다.

부호의 설명

[0509] 10: 유기 발광 소자

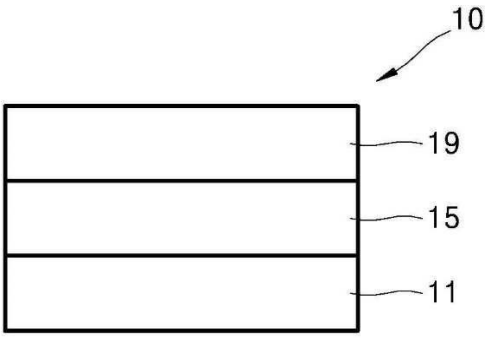
11: 제1전극

15: 유기층

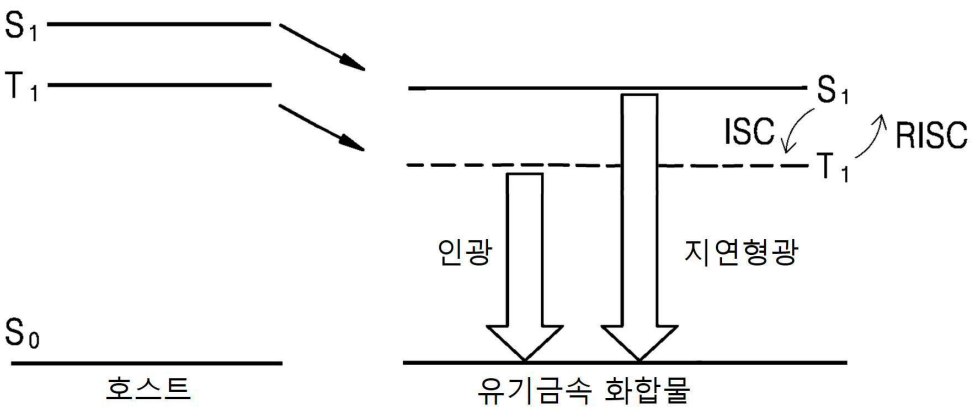
19: 제2전극

도면

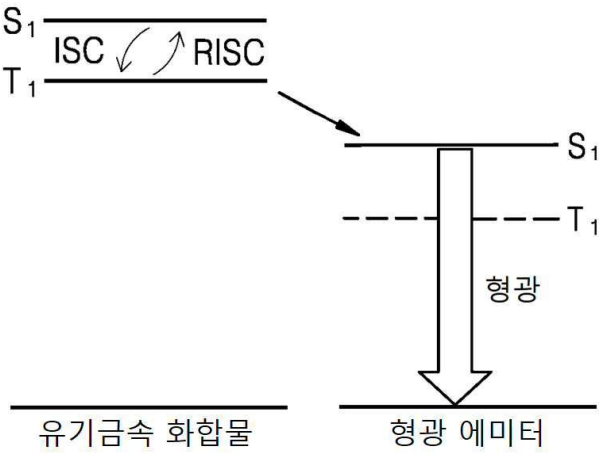
도면1



도면2



도면3



도면4

