



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0098011
 (43) 공개일자 2018년09월03일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 15/00 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
G01N 21/64 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

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

(21) 출원번호 10-2017-0024923
 (22) 출원일자 2017년02월24일
 심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성전자주식회사
 경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)

(72) 발명자
이정인
 경기도 화성시 동탄반석로 231, 155동 1403호 (석우동, 동탄예당마을 롯데캐슬)

최현호
 서울특별시 송파구 올림픽로 435, 315동 2102호 (신천동, 파크리오)
 (뒷면에 계속)

(74) 대리인
리엔목특허법인

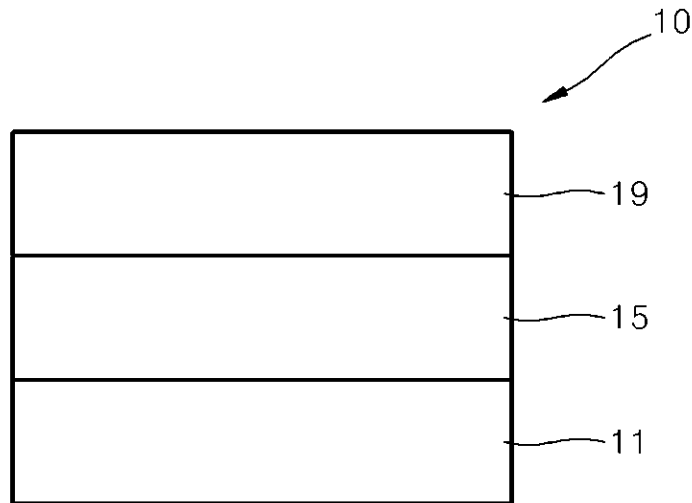
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 **유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 이를 포함한 진단용 조성물**

(57) 요약

유기금속 화합물, 상기 유기금속 화합물을 포함한 유기 발광 소자 및 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물이 개시된다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

G01N 21/6486 (2013.01)
H01L 51/0083 (2013.01)
H01L 51/0084 (2013.01)
H01L 51/0091 (2013.01)
H01L 51/5024 (2013.01)
C09K 2211/185 (2013.01)

(72) 발명자

곽윤현

서울특별시 강남구 도산대로30길 16-2, 401호 (논현동)

김상동

서울특별시 중구 칠패로 27, B동 1604호 (순화동)

김지환

서울특별시 중구 다산로 32, 6동 401호 (신당동, 남산타운아파트)

이지연

경기도 안양시 만안구 연현로79번길 56, 302동 903호 (석수동, 석수 엘지 빌리지)

황규영

경기도 안양시 동안구 동안로 101, 102동 602호 (호계동, 목련선경아파트)

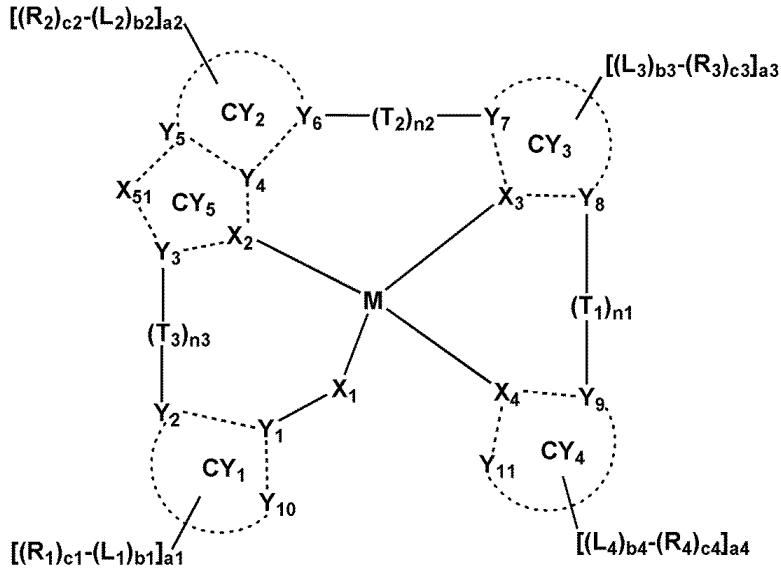
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중

M은 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 칼슘(Ca), 티타늄(Ti), 망간(Mn), 코발트(Co), 구리(Cu), 아연(Zn), 갈륨(Ga), 게르마늄(Ge), 지르코늄(Zr), 루테튬(Ru), 로듐(Rh), 팔라듐(Pd), 은(Ag), 레늄(Re), 백금(Pt) 또는 금(Au)이고,

X₁은 O 또는 S이고, X₁과 M 사이의 결합은 공유 결합이고,

X₂ 내지 X₄는 서로 독립적으로, N 또는 C이고, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 1개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 2개의 결합은 배위 결합이고,

Y₁ 내지 Y₉는 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

Y₁₀ 및 Y₁₁은 서로 독립적으로, C, N, O 또는 S이고,

Y₁과 Y₁₀, Y₁과 Y₂, X₂와 Y₃, X₂와 Y₄, Y₄와 Y₅, X₅₁과 Y₃, X₅₁과 Y₅, Y₄와 Y₆, X₃와 Y₇, X₃와 Y₈, X₄와 Y₉ 및 X₄와 Y₁₁는 각각, 화학 결합을 통하여 서로 연결되어 있고,

CY₁ 내지 CY₅는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

CY₅, CY₂, CY₃ 및 M에 의하여 형성된 시클로메탈화 고리(cyclometallated ring)는 6원환, 7원환 또는 8원환이고,

T₁ 내지 T₃는 서로 독립적으로, *-N[(L₅)_{b5}-(R₅)]-*', *-B(R₅)-*', *-P(R₅)-*', *-C(R₅)(R₆)-*', *-Si(R₅)(R₆)-*', *-Ge(R₅)(R₆)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-S(=O)₂-*', *-C(R₅)=*', *-C(R₅)-*', *-C(R₅)=C(R₆)-*', *-C(=S)-*' 및 *-C≡C-*' 중에서 선택되고,

R₅ 및 R₆은 선택적으로, 단일 결합 또는 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클

릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

n₁ 내지 n₃는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고, n₁이 0일 경우 *-(T₁)_{n₁}-*'은 단일 결합이 되고, n₂가 0일 경우 *-(T₂)_{n₂}-*'은 단일 결합이 되고, n₃가 0일 경우 *-(T₃)_{n₃}-*'은 단일 결합이 되고,

n₁ + n₂ + n₃는 1 이상이고,

X₅₁은 O, S, N[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}], C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}], Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}], C(=O), N, C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}] 또는 Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}]이고,

R₇ 및 R₈은 선택적으로, 단일 결합 또는 제2연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

L₁ 내지 L₅, L₇ 및 L₈은 서로 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

b₁ 내지 b₅, b₇ 및 b₈은 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

R₁ 내지 R₈은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 및 -P(=O)(Q₈)(Q₉) 중에서 선택되고,

c₁ 내지 c₄, c₇ 및 c₈은 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수 중에서 선택되고,

서로 이웃한 복수의 R₁ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

서로 이웃한 복수의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

서로 이웃한 복수의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

서로 이웃한 복수의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

R₁ 내지 R₄ 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

상기 치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅), -B(Q₁₆)(Q₁₇) 및 -P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

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

중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅), -B(Q₂₆)(Q₂₇) 및 -P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

-N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), -B(Q₃₆)(Q₃₇) 및 -P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉);

중에서 선택되고,

상기 Q₁ 내지 Q₉, Q₁₁ 내지 Q₁₉, Q₂₁ 내지 Q₂₉ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₉는 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, C₁-C₆₀알킬기, 중수소, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, 중수소, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서,

X₂는 C이고, X₃ 및 X₄는 N이고, X₂와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이거나;

X₃는 C이고, X₂ 및 X₄는 N이고, X₃와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합은 배위 결합이거나; 또는

X₄는 C이고, X₂ 및 X₃는 N이고, X₄와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X₂와 M 사이의 결합 및 X₃와 M 사이의 결합은 배위 결합;

인, 유기금속 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

CY₁ 내지 CY₄는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인텐 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴놀살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 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 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

T₁ 내지 T₃는 서로 독립적으로, *-N[(L₅)_{b5}-(R₅)]-*, *-C(R₅)(R₆)-*, *-Si(R₅)(R₆)-*, *-Ge(R₅)(R₆)-*, *-S-* 및 *-O-* 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

T₁ 내지 T₃가 서로 독립적으로, *-C(R₅)(R₆)-*, *-Si(R₅)(R₆)-* 및 *-Ge(R₅)(R₆)-* 중에서 선택되고,

상기 R₅와 R₆은 단일 결합 또는 제1연결기를 통하여 서로 결합되어 있고,

상기 제1연결기는 *-N[(L₉)_{b9}-(R₉)]-*, *-B(R₉)-*, *-P(R₉)-*, *-C(R₉)(R₁₀)-*, *-Si(R₉)(R₁₀)-*, *-Ge(R₉)(R₁₀)-*, *-S-*, *-Se-*, *-O-*, *-C(=O)-*, *-S(=O)-*, *-S(=O)₂-*, *-C(R₉)=*, *=C(R₉)-*, *-C(R₉)=C(R₁₀)-*, *-C(=S)-* 및 *-C≡C-* 중에서 선택되고,

상기 L₉ 및 b₉에 대한 설명은 각각 제1항 중 L₅ 및 b₅에 대한 설명을 참조하고,

상기 R₉ 및 R₁₀에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₅에 대한 설명을 참조하고,

* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 6

제1항에 있어서,

n₁은 1이고, n₂ 및 n₃는 0이거나;

n₂는 1이고, n₁ 및 n₃는 0이거나; 또는

n₃는 1이고, n₁ 및 n₂는 0인; 유기금속 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₈은 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라

존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, $-SF_5$, C_1-C_{20} 알킬기 및 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_{10} 알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 노르보네닐기(norborneny1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C_1-C_{20} 알킬기 및 C_1-C_{20} 알콕시기;

시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 노르보네닐기(norborneny1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 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, 벤조티오펜기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;

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, C_1-C_{20} 알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 노르보네닐기(norborneny1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 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, 벤조티오펜기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 노르보네닐기(norborneny1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 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, 벤조티오펜기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 노르보네닐기(norborneny1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 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, 벤조티오펜기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기; 및

$-N(Q_1)(Q_2)$, $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$, $-B(Q_6)(Q_7)$ 및 $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$;

중에서 선택되고,

Q_1 내지 Q_9 및 Q_{33} 내지 Q_{35} 는 서로 독립적으로,

$-CH_3$, $-CD_3$, $-CD_2H$, $-CDH_2$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CD_3$, $-CH_2CD_2H$, $-CH_2CDH_2$, $-CHDCH_3$, $-CHDCD_2H$, $-CHDCDH_2$, $-CHDCD_3$, $-CD_2CD_3$, $-CD_2CD_2H$ 및 $-CD_2CDH_2$;

n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기

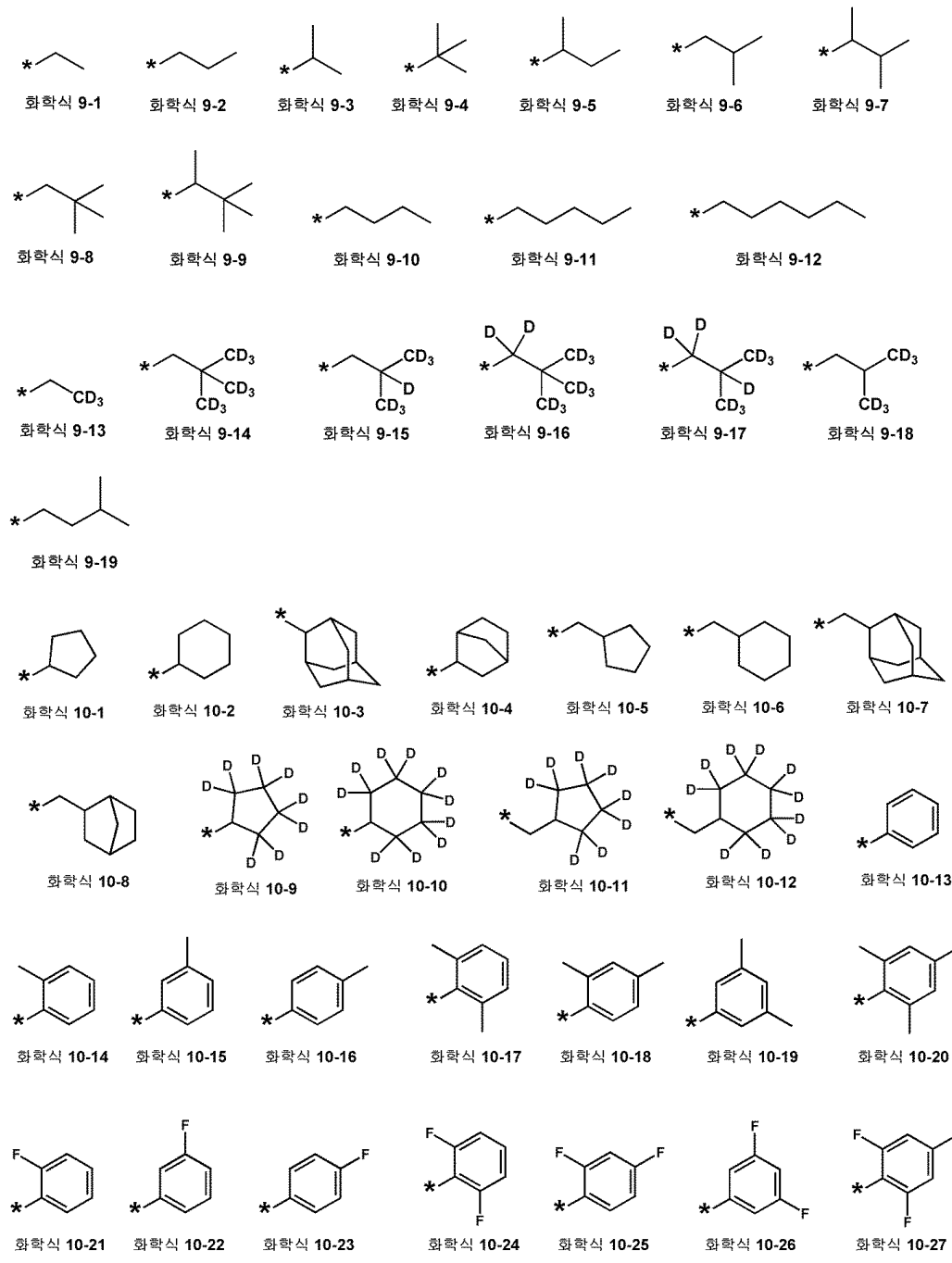
기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

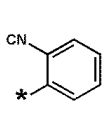
중수소, C₁-C₁₀알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

청구항 8

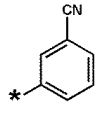
제1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₈은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF₅, -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 하기 화학식 9-1 내지 9-19로 표시되는 그룹, 하기 화학식 10-1 내지 10-156으로 표시되는 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 및 -P(=O)(Q₈)(Q₉) 중에서 선택된, 유기금속 화합물:

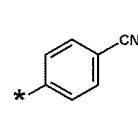




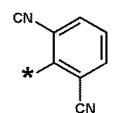
화학식 10-28



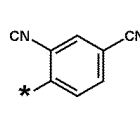
화학식 10-29



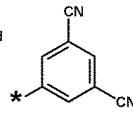
화학식 10-30



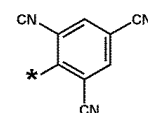
화학식 10-31



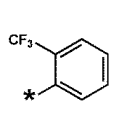
화학식 10-32



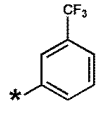
화학식 10-33



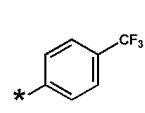
화학식 10-34



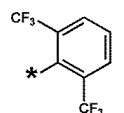
화학식 10-35



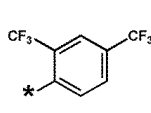
화학식 10-36



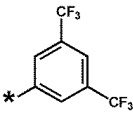
화학식 10-37



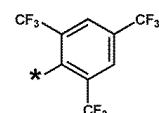
화학식 10-38



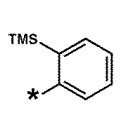
화학식 10-39



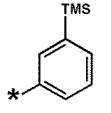
화학식 10-40



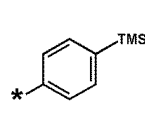
화학식 10-41



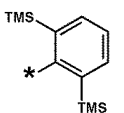
화학식 10-42



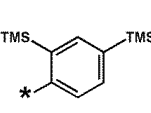
화학식 10-43



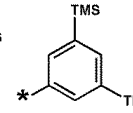
화학식 10-44



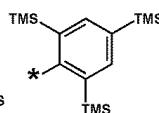
화학식 10-45



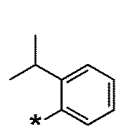
화학식 10-46



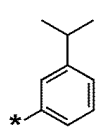
화학식 10-47



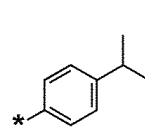
화학식 10-48



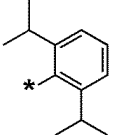
화학식 10-49



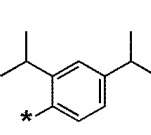
화학식 10-50



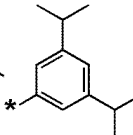
화학식 10-51



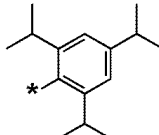
화학식 10-52



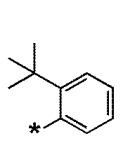
화학식 10-53



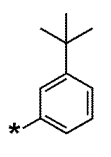
화학식 10-54



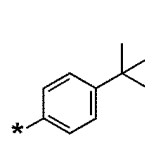
화학식 10-55



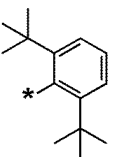
화학식 10-56



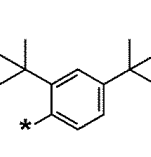
화학식 10-57



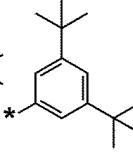
화학식 10-58



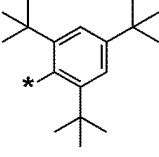
화학식 10-59



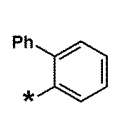
화학식 10-60



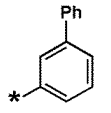
화학식 10-61



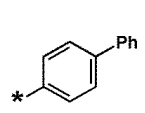
화학식 10-62



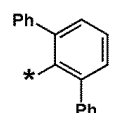
화학식 10-63



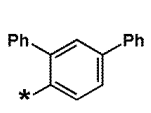
화학식 10-64



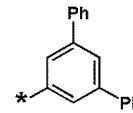
화학식 10-65



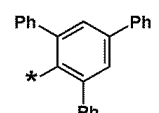
화학식 10-66



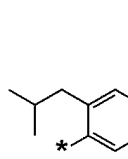
화학식 10-67



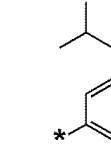
화학식 10-68



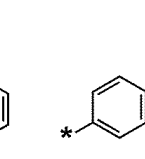
화학식 10-69



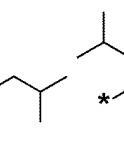
화학식 10-70



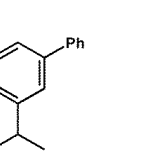
화학식 10-71



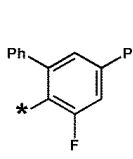
화학식 10-72



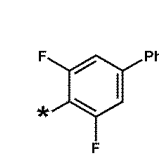
화학식 10-73



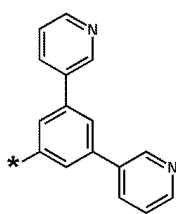
화학식 10-74



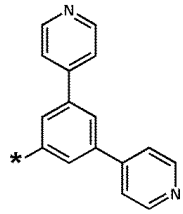
화학식 10-75



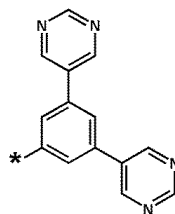
화학식 10-75



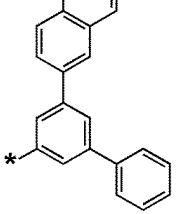
화학식 10-76



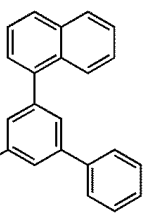
화학식 10-77



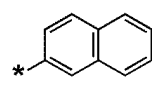
화학식 10-78



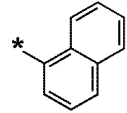
화학식 10-79



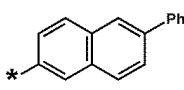
화학식 10-80



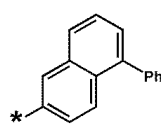
화학식 10-81



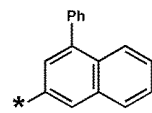
화학식 10-82



화학식 10-83



화학식 10-84



화학식 10-85



화학식 10-86



화학식 10-87



화학식 10-88



화학식 10-89



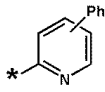
화학식 10-90



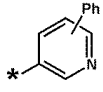
화학식 10-91



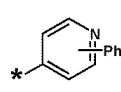
화학식 10-92



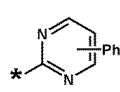
화학식 10-93



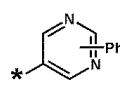
화학식 10-94



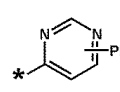
화학식 10-95



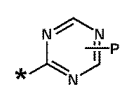
화학식 10-96



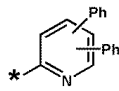
화학식 10-97



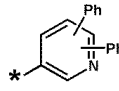
화학식 10-98



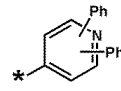
화학식 10-99



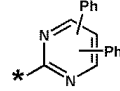
화학식 10-100



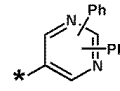
화학식 10-101



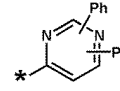
화학식 10-102



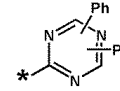
화학식 10-103



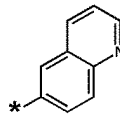
화학식 10-104



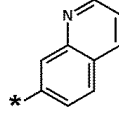
화학식 10-105



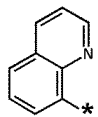
화학식 10-106



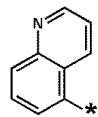
화학식 10-107



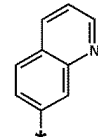
화학식 10-108



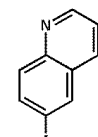
화학식 10-109



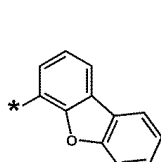
화학식 10-110



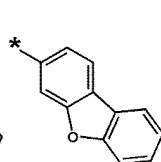
화학식 10-111



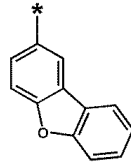
화학식 10-112



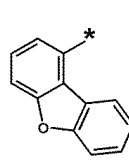
화학식 10-113



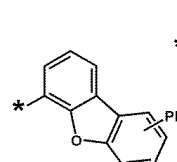
화학식 10-114



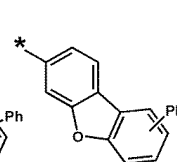
화학식 10-115



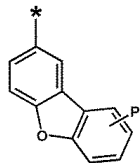
화학식 10-116



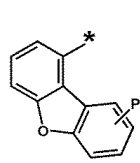
화학식 10-117



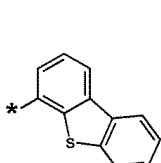
화학식 10-118



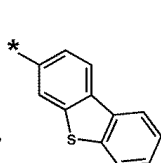
화학식 10-119



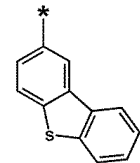
화학식 10-120



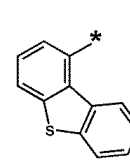
화학식 10-121



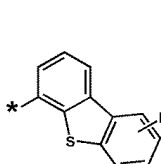
화학식 10-122



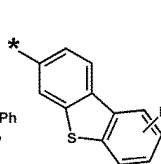
화학식 10-123



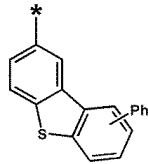
화학식 10-124



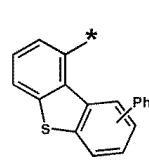
화학식 10-125



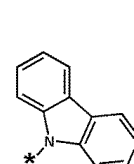
화학식 10-126



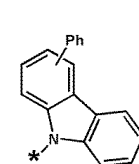
화학식 10-127



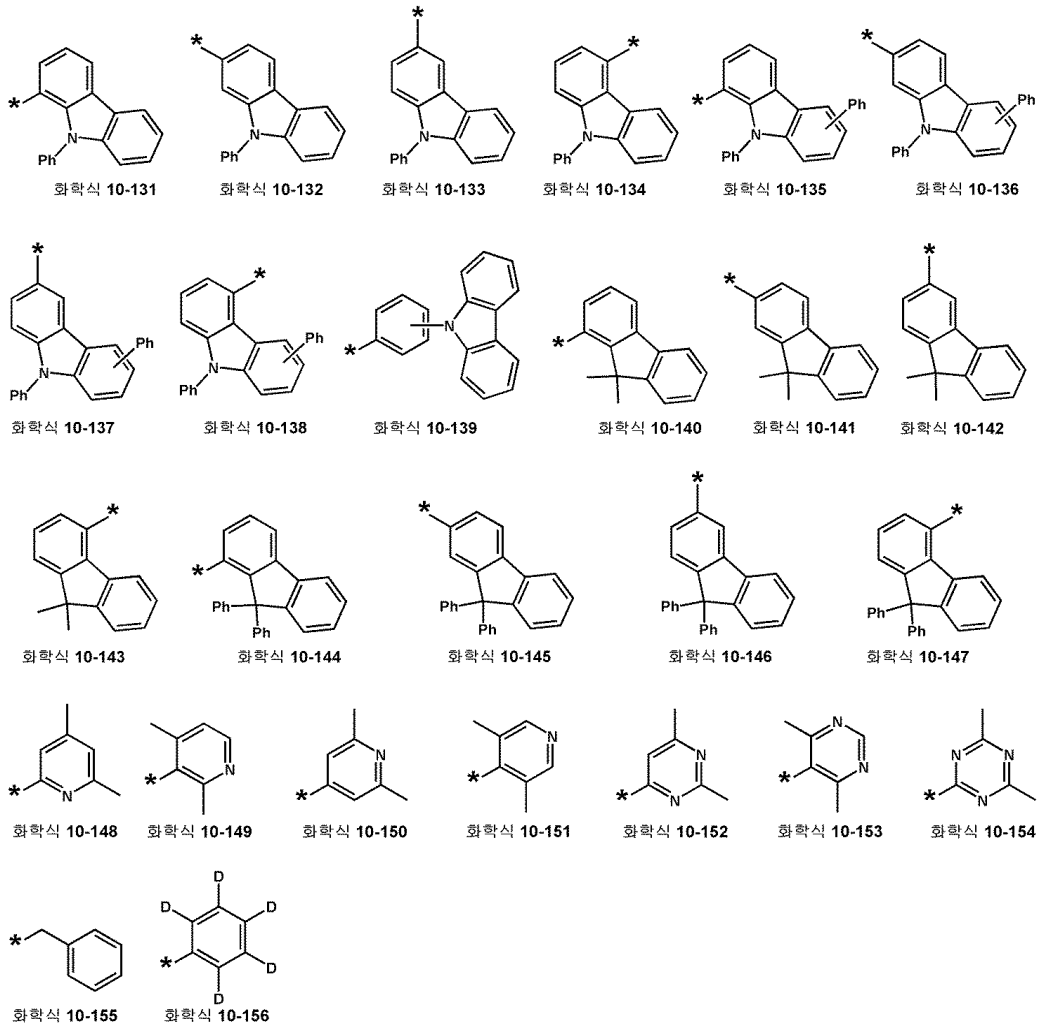
화학식 10-128



화학식 10-129



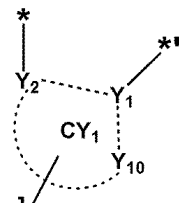
화학식 10-130



상기 화학식 9-1 내지 9-19 및 10-1 내지 10-156 중 Ph는 페닐기이고, TMS는 트리메틸실릴기이고, *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 9

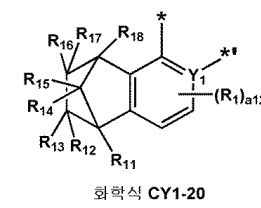
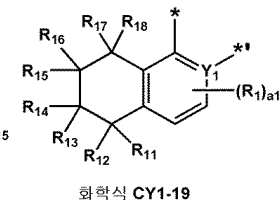
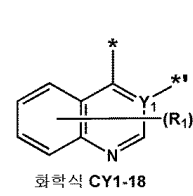
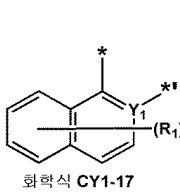
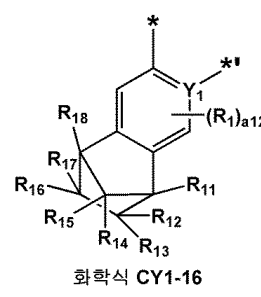
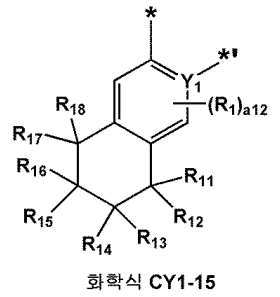
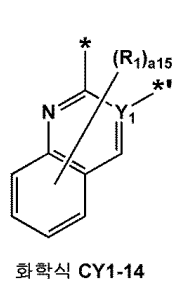
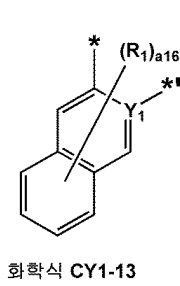
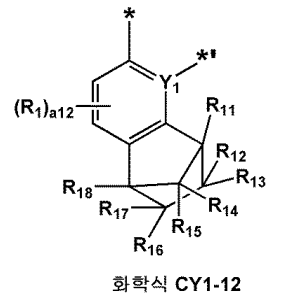
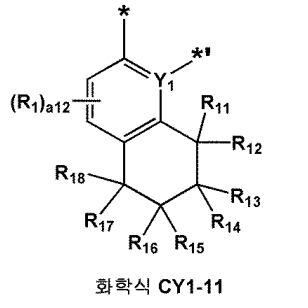
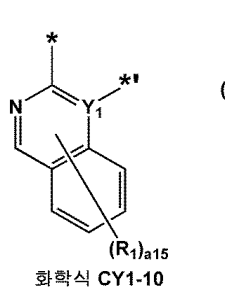
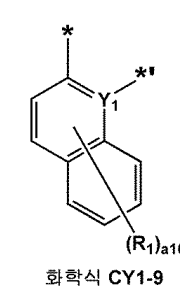
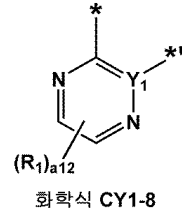
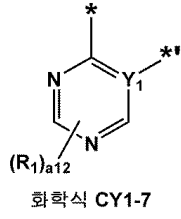
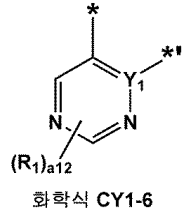
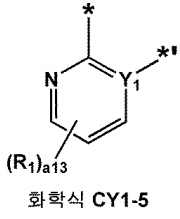
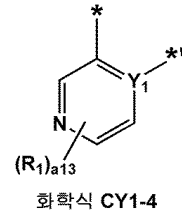
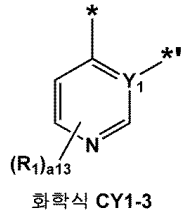
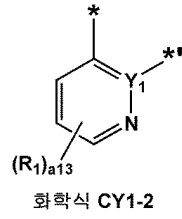
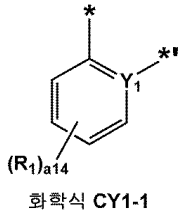
제1항에 있어서,

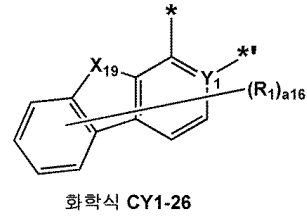
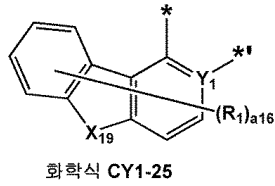
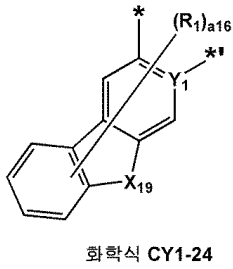
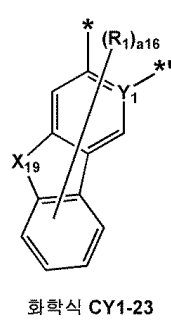
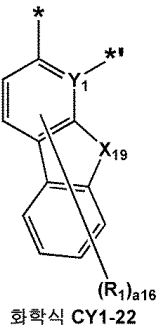
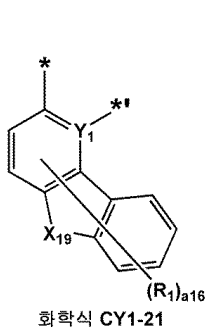


상기 화학식 1 중 $[(R_1)_{c1}-(L_1)_{b1}]_{a1}$

는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY1-1 내지 CY1-26로 표시되





상기 화학식 CY1-1 내지 CY1-26 중,

Y_1 및 R_1 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바를 참조하고,

X_{19} 는 $C(R_{19a})(R_{19b})$, $N[(L_{19})_{b19}-(R_{19})_{c19}]$, O, S 또는 $Si(R_{19a})(R_{19b})$ 이고,

L_{19} , b_{19} , R_{19} 및 c_{19} 에 대한 설명은 각각 제1항 중 L_1 , b_1 , R_1 및 c_1 에 대한 설명을 참조하고,

R_{11} 내지 R_{18} , R_{19a} 및 R_{19b} 에 대한 설명은 각각 제1항 중 R_1 에 대한 설명을 참조하고,

a_{12} 는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

a_{13} 는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a_{14} 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

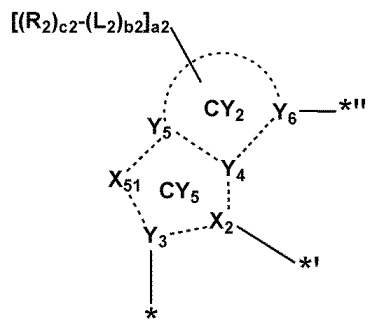
a_{15} 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a_{16} 는 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 10

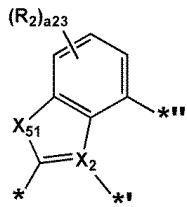
제1항에 있어서,



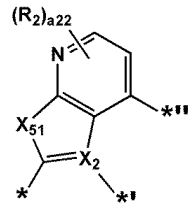
상기 화학식 1 중

표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:

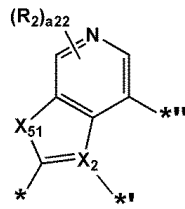
로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY2-1 내지 CY2-12로



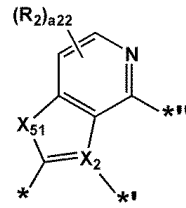
화학식 CY2-1



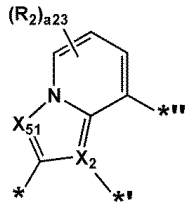
화학식 CY2-2



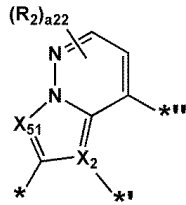
화학식 CY2-3



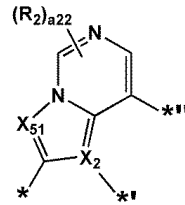
화학식 CY2-4



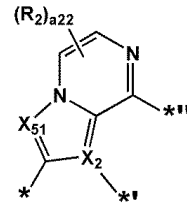
화학식 CY2-5



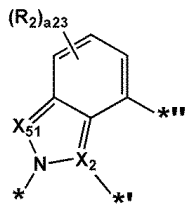
화학식 CY2-6



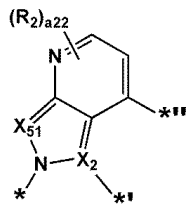
화학식 CY2-7



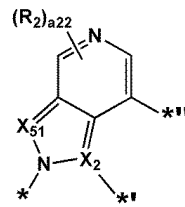
화학식 CY2-8



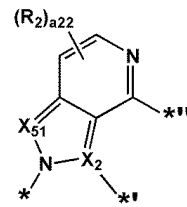
화학식 CY2-9



화학식 CY2-10



화학식 CY2-11



화학식 CY2-12

상기 화학식 CY2-1 내지 CY2-12 중,

R₂에 대한 설명은 제1항에 기재된 바를 참조하고,

화학식 CY2-1 내지 CY2-4 중 X₅₁은 O, S, N[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}], C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}], Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}] 또는 C(=O)이고,

화학식 CY2-5 내지 CY2-12 중 X₅₁은 N, C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}] 또는 Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}]이고,

상기 L₇, L₈, b₇, b₈, R₇, R₈, c₇ 및 c₈에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바를 참조하고,

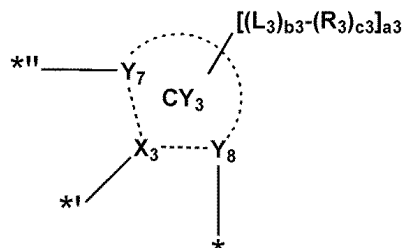
a₂₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

a₂₃는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

*, *' 및 **은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 11

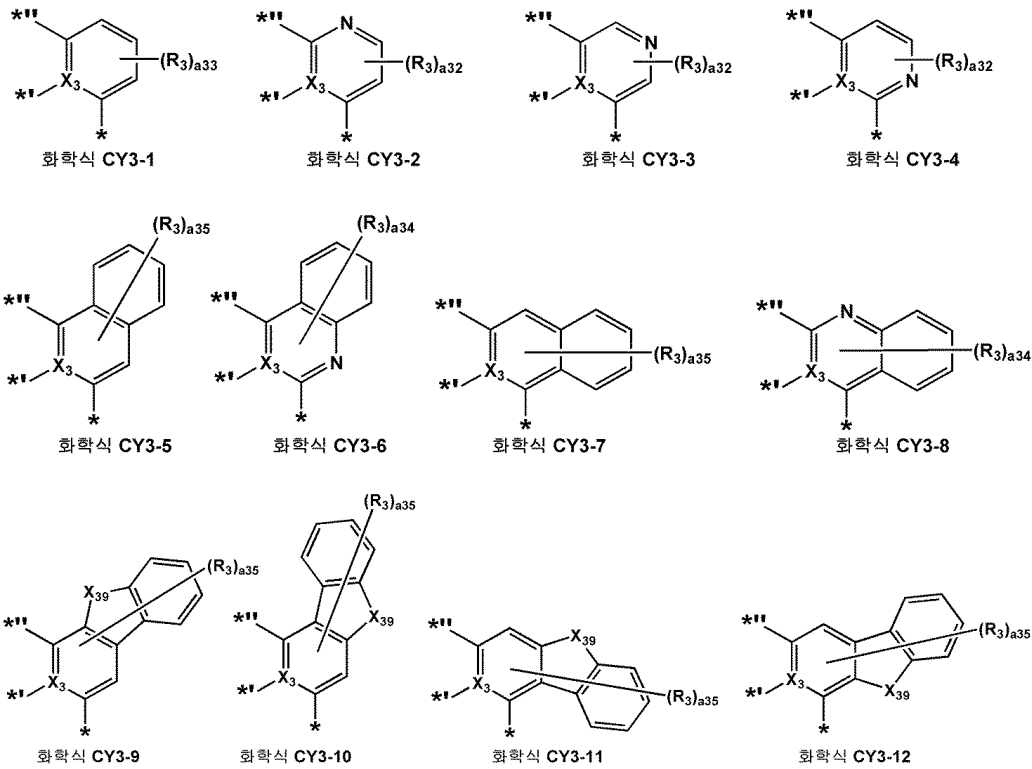
제1항에 있어서,



상기 화학식 1 중

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY3-1 내지 CY3-

12로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:



상기 화학식 CY3-1 내지 CY3-12 중,

X_3 및 R_3 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바를 참조하고,

X_{39} 는 $C(R_{39a})(R_{39b})$, $N[(L_{39})_{b39}-(R_{39})_{c39}]$, O, S 또는 $Si(R_{39a})(R_{39b})$ 이고,

L_{39} , b_{39} , R_{39} 및 c_{39} 에 대한 설명은 각각 제1항 중 L_3 , b_3 , R_3 및 c_3 에 대한 설명을 참조하고,

R_{39a} 및 R_{39b} 에 대한 설명은 각각 제1항 중 R_3 에 대한 설명을 참조하고,

a_{32} 는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

a_{33} 는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

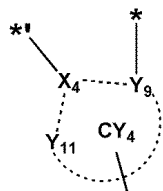
a_{34} 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a_{35} 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

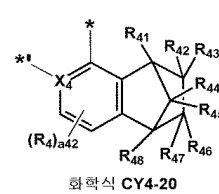
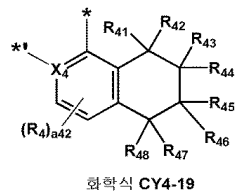
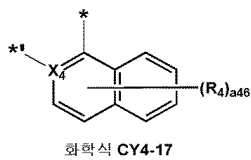
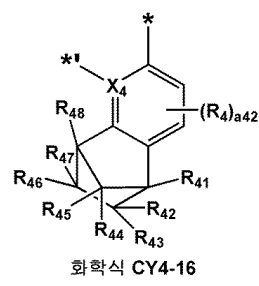
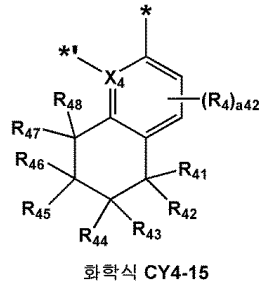
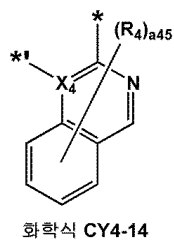
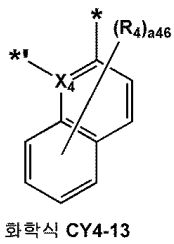
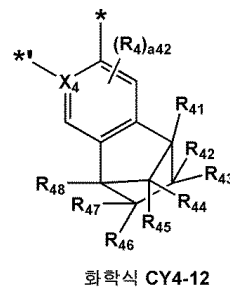
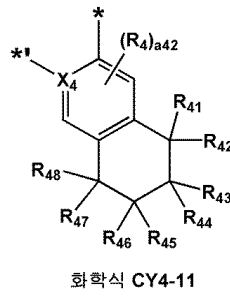
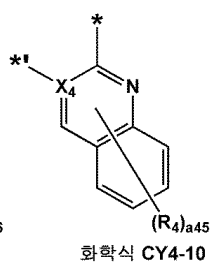
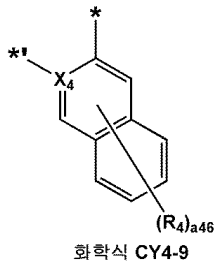
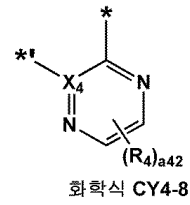
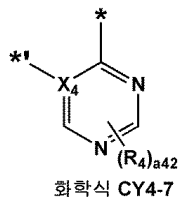
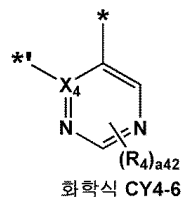
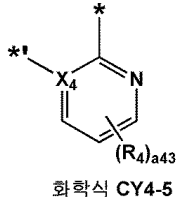
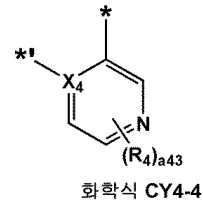
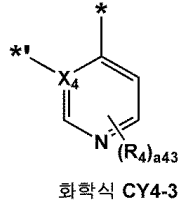
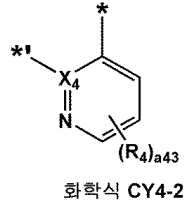
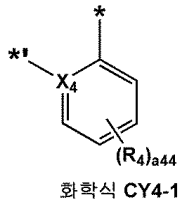
*, ' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

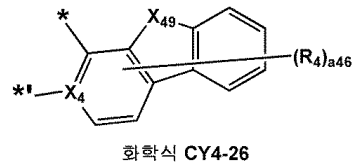
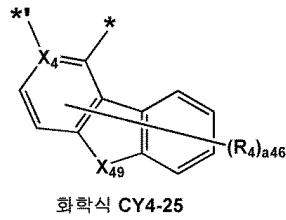
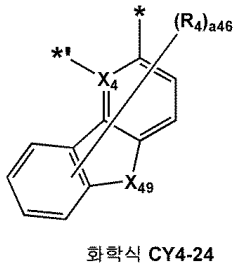
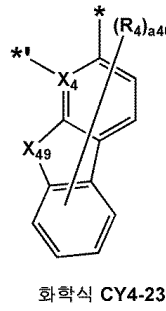
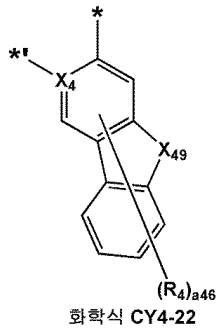
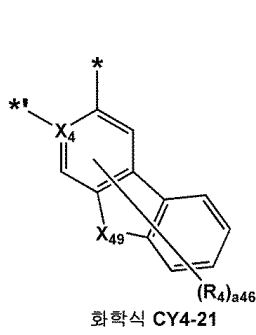
청구항 12

제1항에 있어서,



상기 화학식 1 중 $[(L_4)_{b4}-(R_4)_{c4}]_{a4}$ 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY4-1 내지 CY4-26으로 표시되는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:





상기 화학식 CY4-1 내지 CY4-26 중,

X₄ 및 R₄에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바를 참조하고,

X₄₉는 C(R_{49a})(R_{49b}), N[(L₄₉)_{b49}-(R₄₉)_{c49}], O, S 또는 Si(R_{49a})(R_{49b})이고,

L₄₉, b₄₉, R₄₉ 및 c₄₉에 대한 설명은 각각 제1항 중 L₄, b₄, R₄ 및 c₄에 대한 설명을 참조하고,

R₄₁ 내지 R₄₈, R_{49a} 및 R_{49b}에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₄에 대한 설명을 참조하고,

a₄₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

a₄₃는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a₄₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

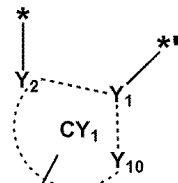
a₄₅는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a₄₆는 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

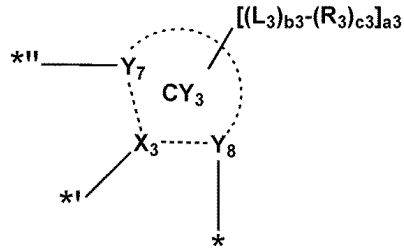
청구항 13

제1항에 있어서,



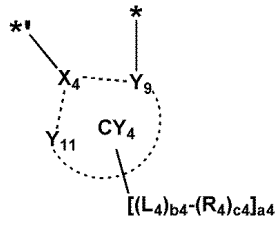
상기 화학식 1 중 [(R₁)_{c1}-(L₁)_{b1}]_{a1}로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY1(1) 내지 CY1(11)로 표시



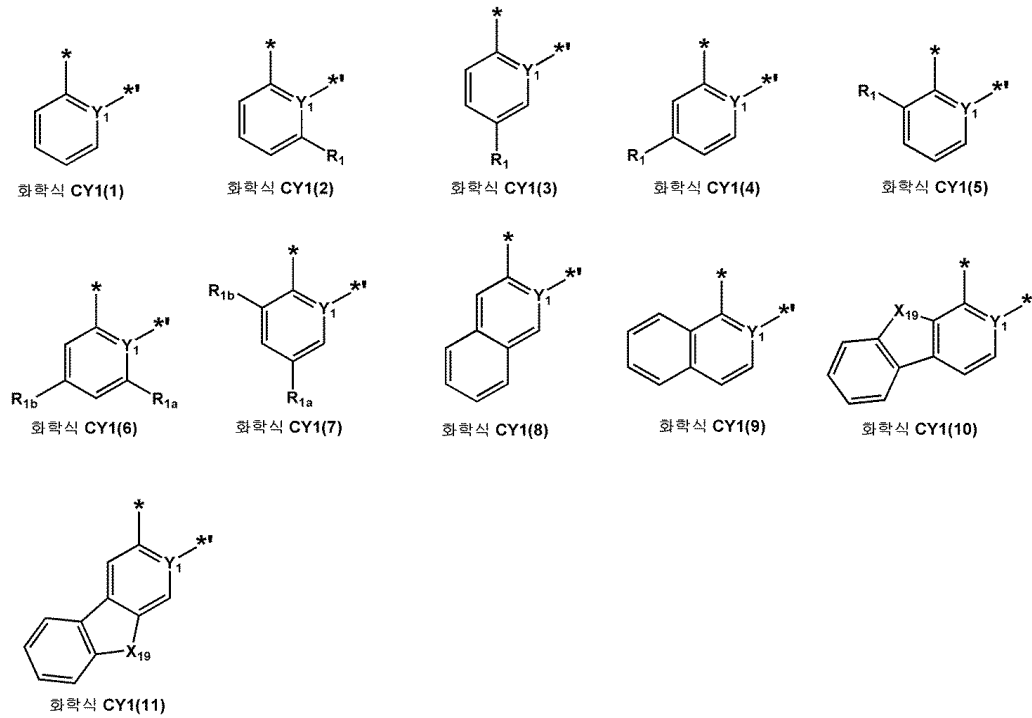
상기 화학식 1 중
CY3(12)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

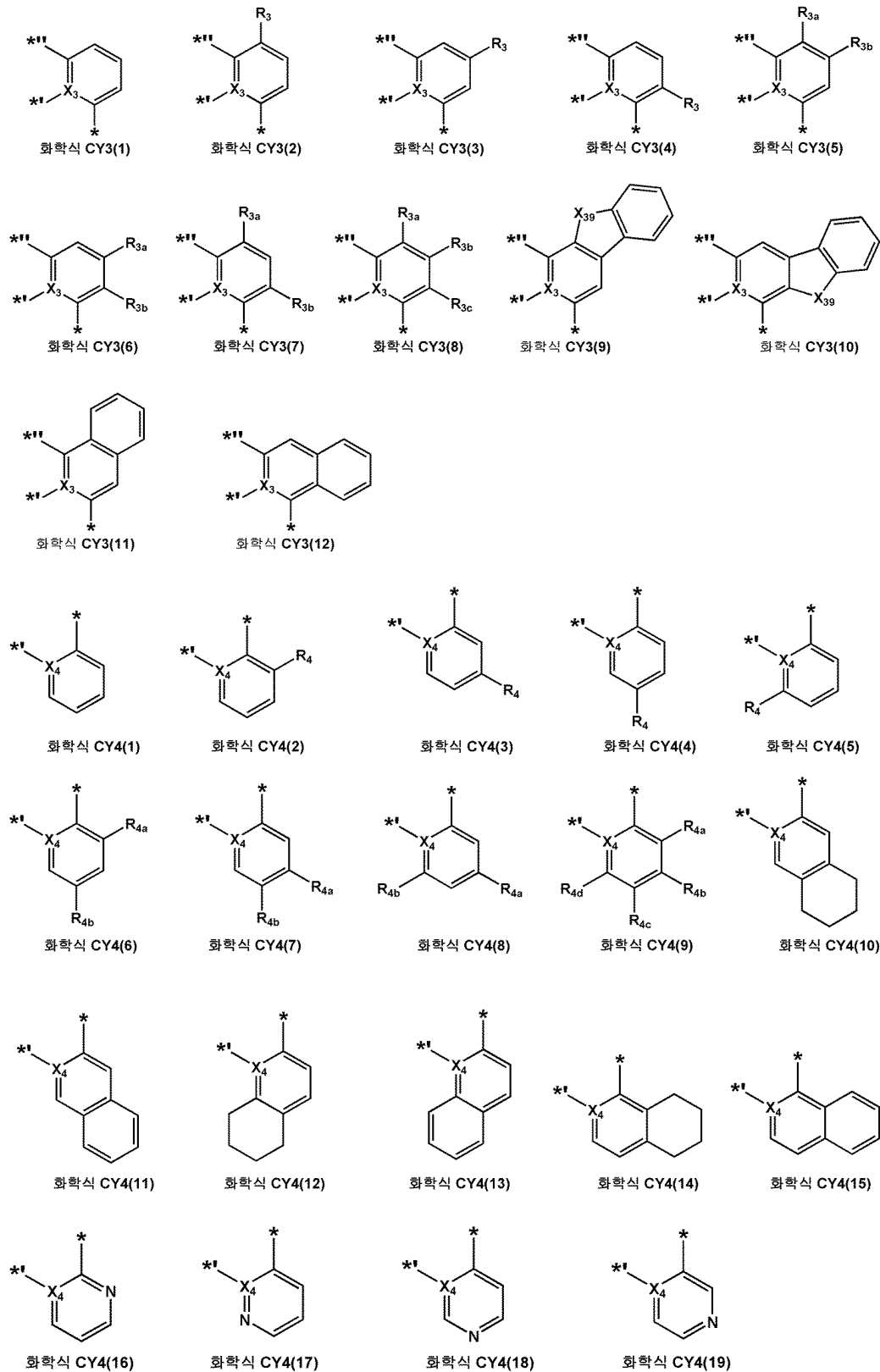
로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY3(1) 내지



상기 화학식 1 중
는 그룹 중에서 선택된, 유기금속 화합물:

[(L4)b4-(R4)c4]a4 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY4(1) 내지 CY4(19)로 표시되





상기 화학식 CY1(1) 내지 CY1(11), CY3(1) 내지 CY3(12) 및 CY4(1) 내지 CY4(19) 중,

X_{19} 는 $C(R_{19a})(R_{19b})$, $N[(L_{19})_{b19}-(R_{19})_{c19}]$, O, S 또는 $Si(R_{19a})(R_{19b})$ 이고,

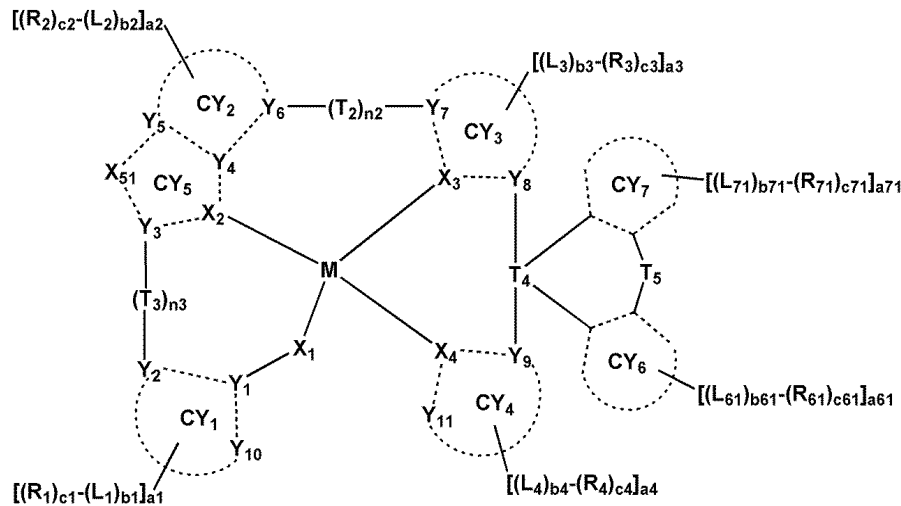
X_{39} 는 $C(R_{39a})(R_{39b})$, $N[(L_{39})_{b39}-(R_{39})_{c39}]$, O, S 또는 $Si(R_{39a})(R_{39b})$ 이고,

Y_1 , R_1 , X_3 , R_3 , X_4 및 R_4 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바를 참조하고,

L₁₉, b₁₉, R₁₉ 및 c₁₉에 대한 설명은 각각 제1항 중 L₁, b₁, R₁ 및 c₁에 대한 설명을 참조하고,
 L₃₉, b₃₉, R₃₉ 및 c₃₉에 대한 설명은 각각 제1항 중 L₃, b₃, R₃ 및 c₃에 대한 설명을 참조하고,
 R_{1a}, R_{1b}, R_{19a} 및 R_{19b}에 대한 설명은 각각 R₁에 대한 설명을 참조하고,
 R_{3a} 내지 R_{3d}, R_{39a} 및 R_{39b}에 대한 설명은 각각 R₃에 대한 설명을 참조하고,
 R_{4a} 내지 R_{4d}에 대한 설명은 각각 R₄에 대한 설명을 참조하고,
 *, *' 및 *''은 각각 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 14

제1항에 있어서,
 하기 화학식 1-1로 표시된, 유기금속 화합물:
 <화학식 1-1>



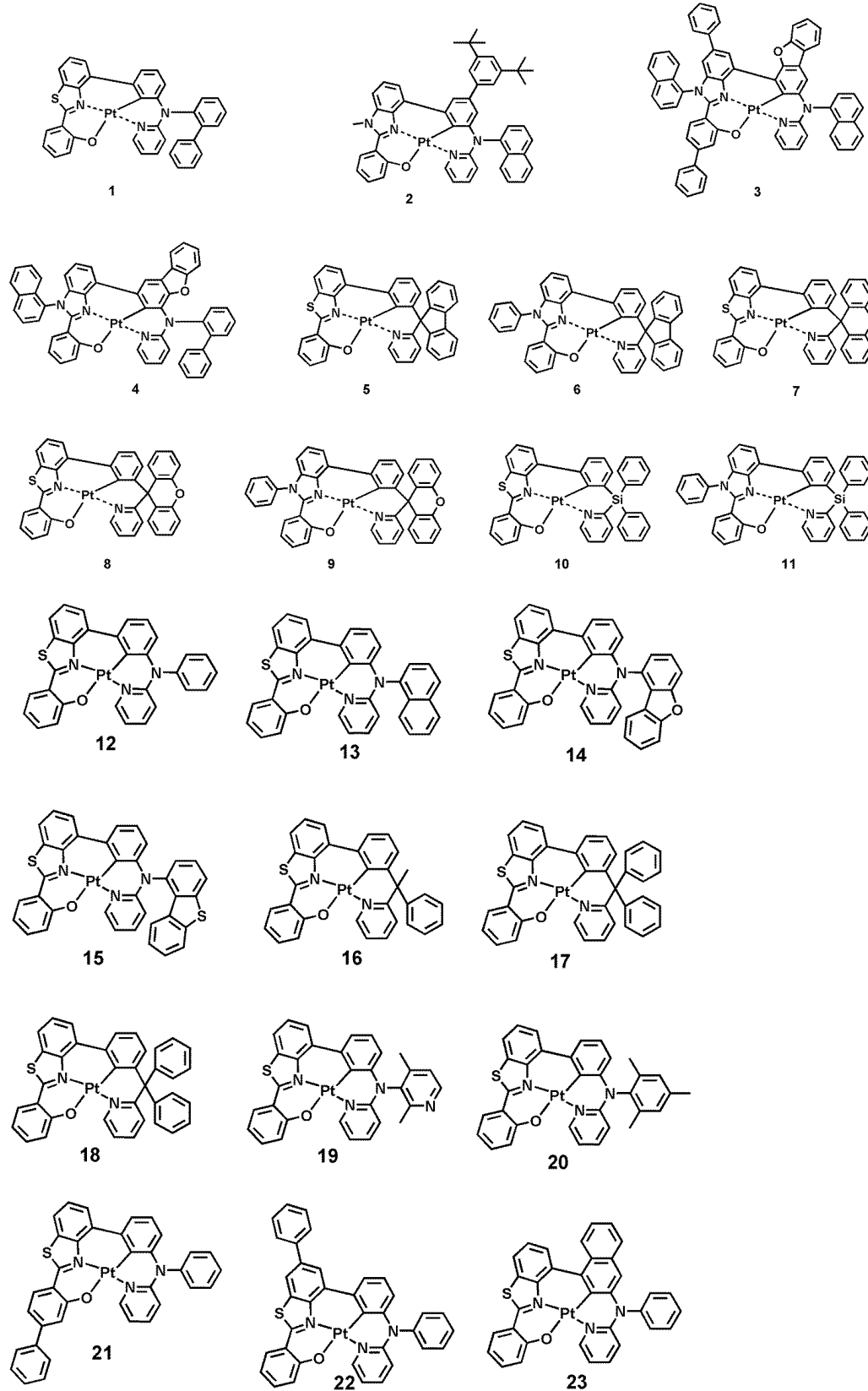
상기 화학식 1-1 중,
 M, X₁ 내지 X₄, Y₁ 내지 Y₁₁, CY₁ 내지 CY₅, T₁, T₂, n₁, n₂, X₅₁, L₁ 내지 L₄, b₁ 내지 b₄, R₁ 내지 R₄, c₁ 내지 c₄ 및 a₁ 내지 a₄에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바를 참조하고,
 CY₆ 및 CY₇은 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,
 T₄는 C, Si 또는 Ge이고,
 T₅는 단일 결합, *-N[(L₉)_{b9}-(R₉)]-*, *-B(R₉)-*, *-P(R₉)-*, *-C(R₉)(R₁₀)-*, *-Si(R₉)(R₁₀)-*, *-Ge(R₉)(R₁₀)-*, *-S-*, *-Se-*, *-O-*, *-C(=O)-*, *-S(=O)-*, *-S(=O)₂-*, *-C(R₉)=*, *=C(R₉)-*, *-C(R₉)=C(R₁₀)-*, *-C(=S)-* 및 *-C≡C-* 중에서 선택되고,
 L₆₁ 및 L₇₁에 대한 설명은 각각 제1항 중 L₁에 대한 설명을 참조하고,
 b₆₁ 및 b₇₁에 대한 설명은 각각 제1항 중 b₁에 대한 설명을 참조하고,
 R₆₁ 및 R₇₁에 대한 설명은 각각 제1항 중 R₁에 대한 설명을 참조하고,
 c₆₁ 및 c₇₁에 대한 설명은 각각 제1항 중 c₁에 대한 설명을 참조하고,
 a₆₁ 및 a₇₁에 대한 설명은 각각 제1항 중 a₁에 대한 설명을 참조하고,
 L₉, b₉ 및 R₉에 대한 설명은 각각 제1항 중 L₅, b₅ 및 R₅에 대한 설명을 참조하고,

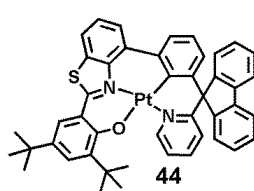
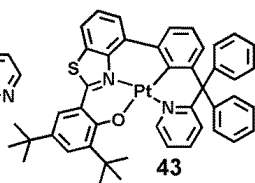
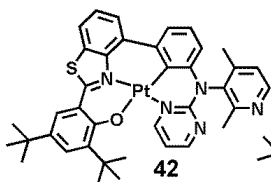
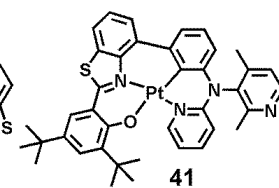
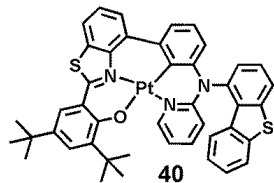
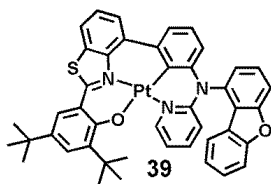
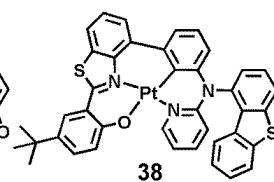
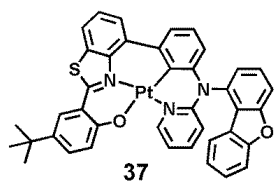
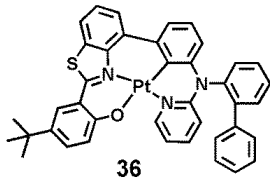
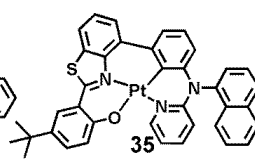
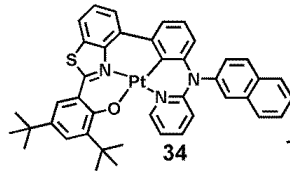
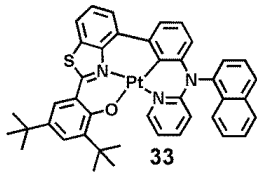
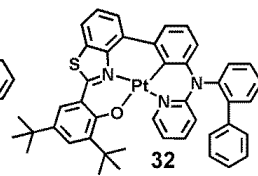
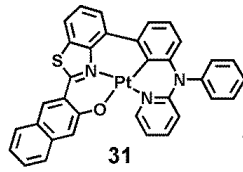
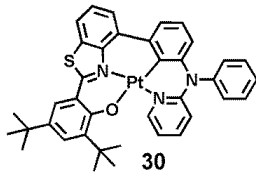
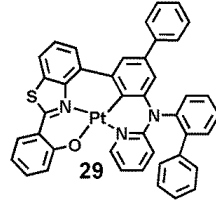
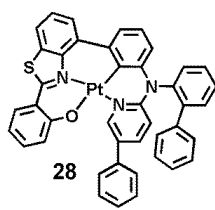
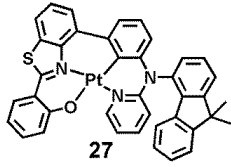
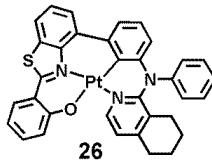
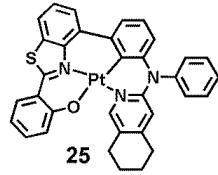
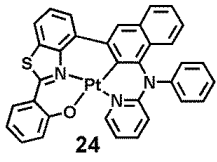
* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

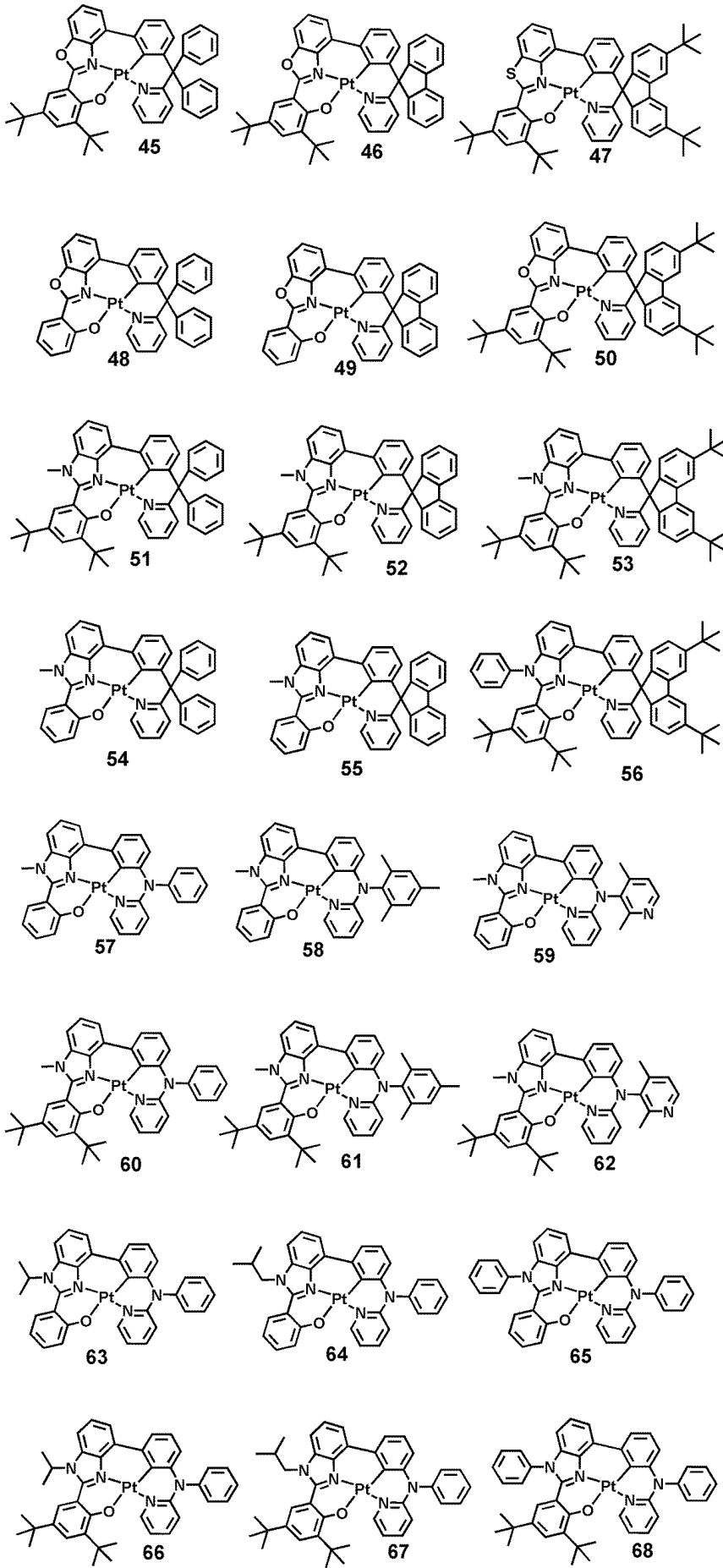
청구항 15

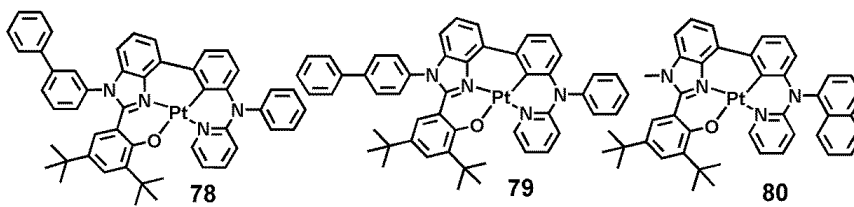
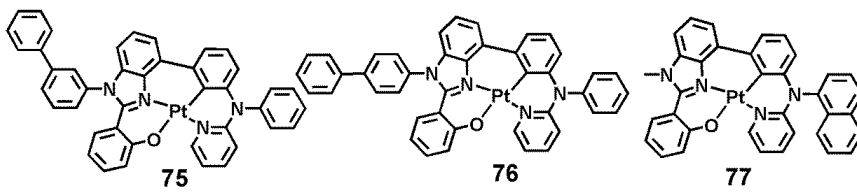
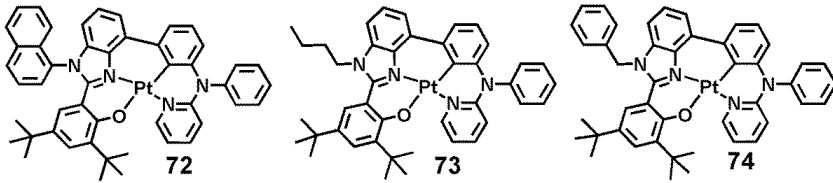
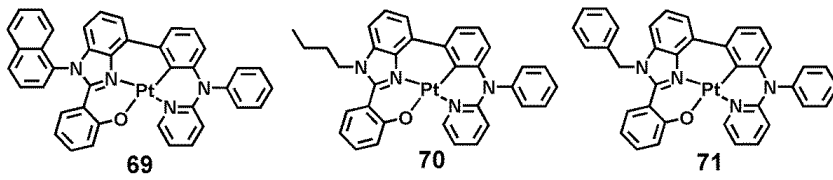
제1항에 있어서,

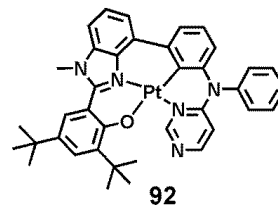
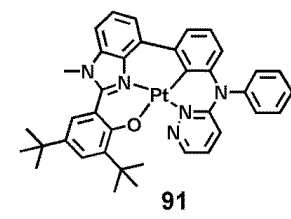
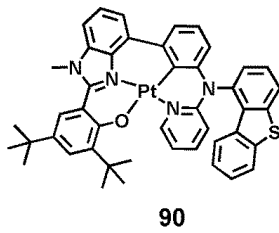
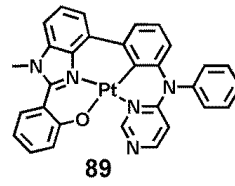
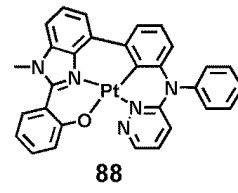
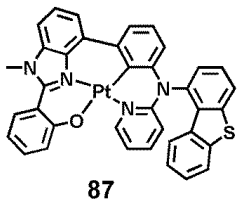
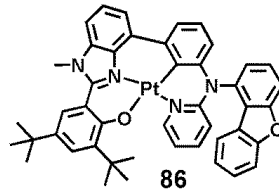
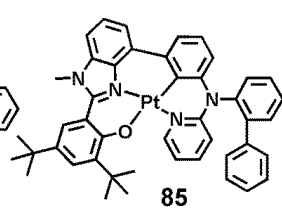
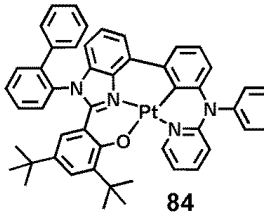
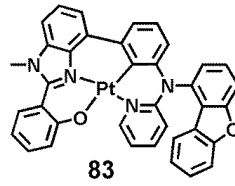
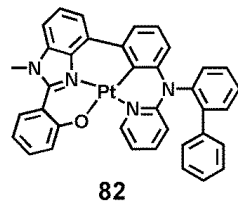
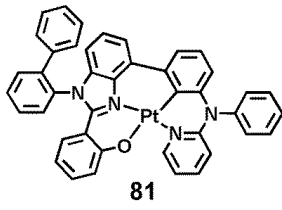
하기 화합물 1 내지 143 중 하나인, 유기금속 화합물:

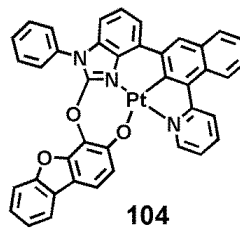
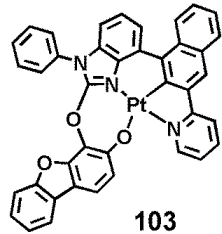
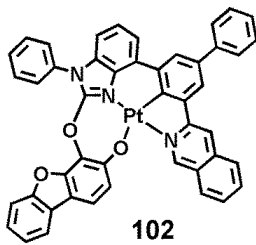
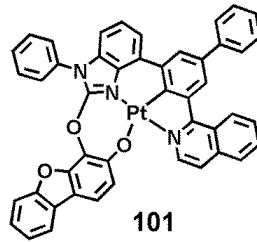
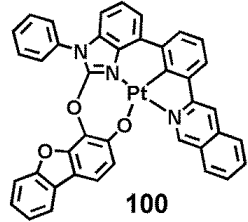
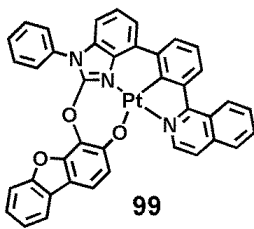
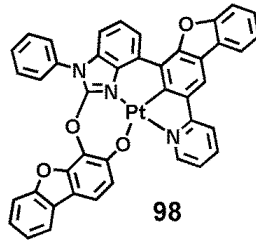
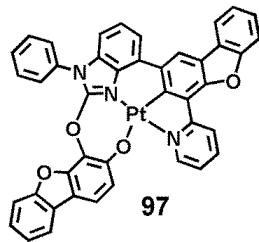
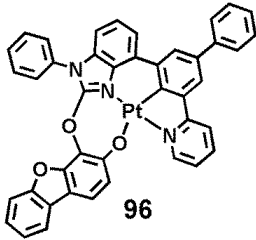
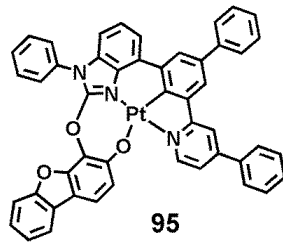
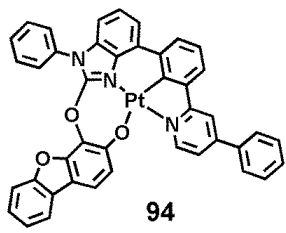
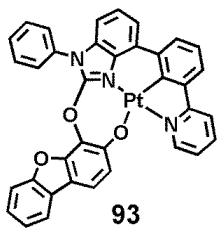


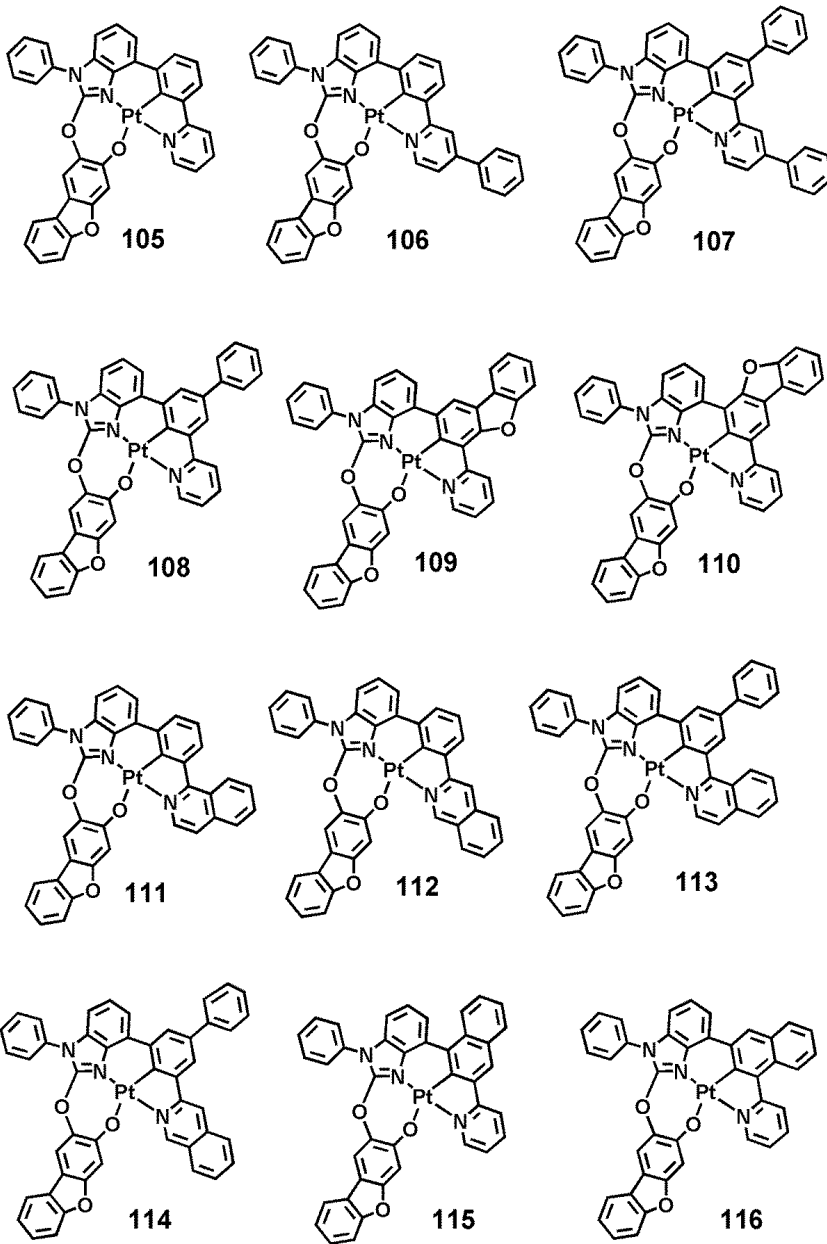


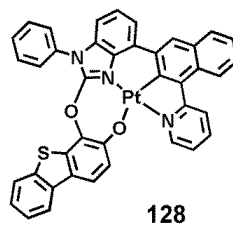
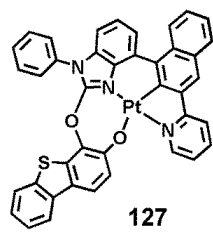
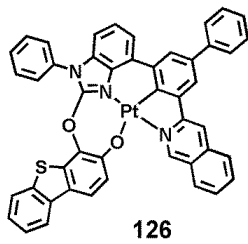
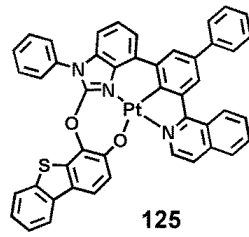
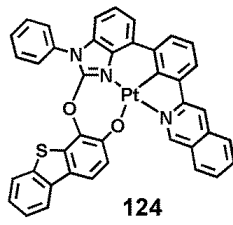
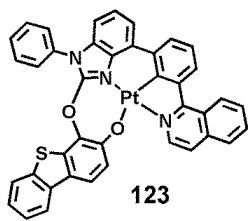
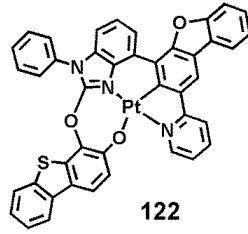
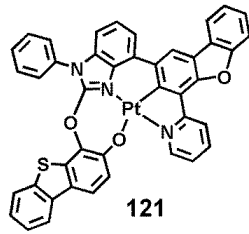
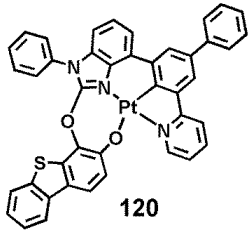
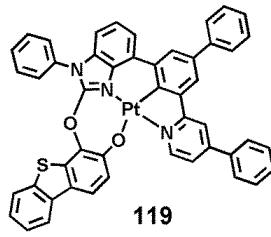
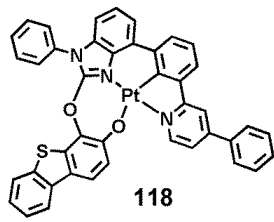
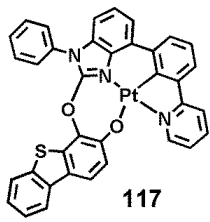


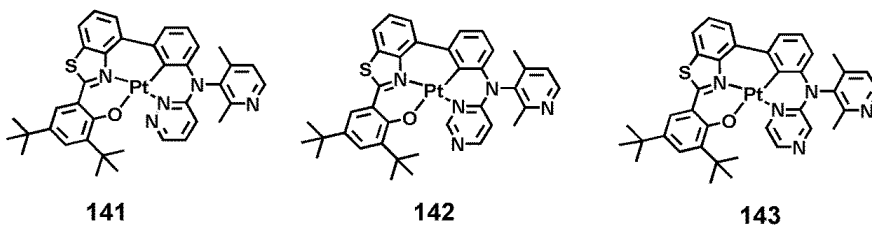
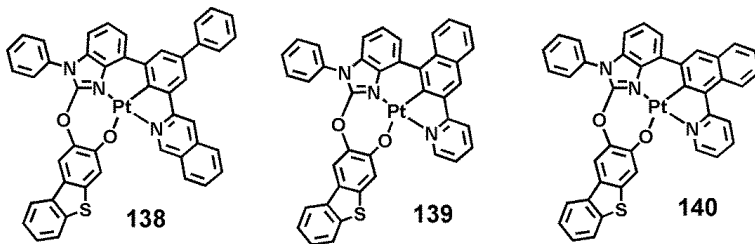
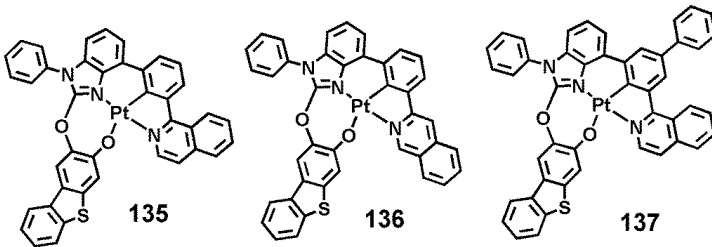
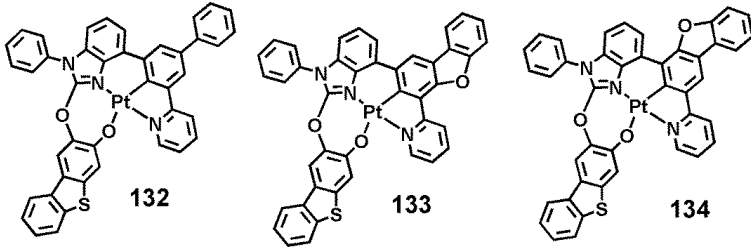
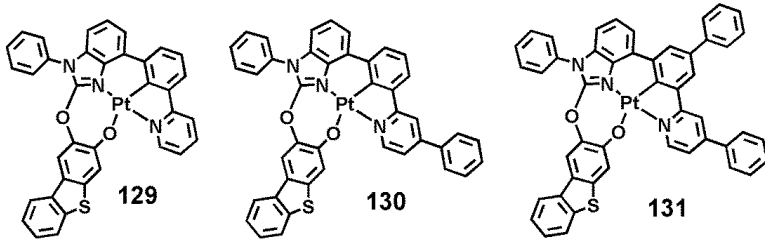












청구항 16

제1전극;

제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제15항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 제1전극은 애노드이고,

상기 제2전극은 캐소드이고,

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

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

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

청구항 18

제16항에 있어서,

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

청구항 19

제18항에 있어서,

상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 호스트의 함량이 상기 유기금속 화합물의 함량보다 큰, 유기 발광 소자.

청구항 20

제1항 내지 제15항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 진단용 조성물.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 이를 포함한 진단용 조성물이 제시된다.

배경 기술

[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.

[0004] 한편, 각종 세포, 단백질 등과 같은 생물학적 물질의 모니터링, 센싱, 검출 등에도 발광 화합물, 예를 들면, 인광 발광 화합물이 사용될 수 있다.

발명의 내용

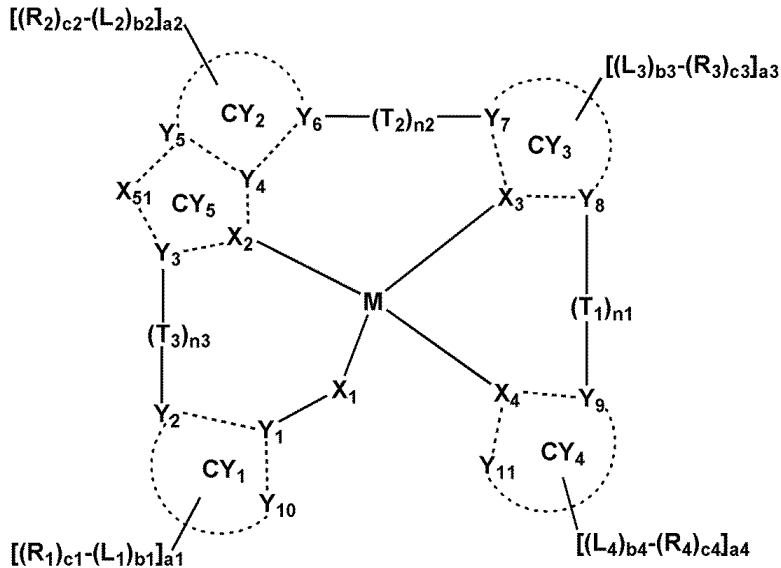
해결하려는 과제

[0005] 신규 유기금속 화합물, 이를 채용한 유기 발광 소자 및 이를 채용한 진단용 조성물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0006] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시된 유기금속(organometallic) 화합물이 제공된다:

[0007] <화학식 1>



[0008]
[0009] 상기 화학식 1 중

[0010] M은 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 칼슘(Ca), 티타늄(Ti), 망간(Mn), 코발트(Co), 구리(Cu), 아연(Zn), 갈륨(Ga), 게르마늄(Ge), 지르코늄(Zr), 루테튬(Lu), 로듐(Rh), 팔라듐(Pd), 은(Ag), 레늄(Re), 백금(Pt) 또는 금(Au)이고,

[0011] X₁은 O 또는 S이고, X₁과 M 사이의 결합은 공유 결합이고,

[0012] X₂ 내지 X₄는 서로 독립적으로, N 또는 C이고, X₂와 M 사이의 결합, X₃와 M 사이의 결합 및 X₄와 M 사이의 결합 중 1개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 2개의 결합은 배위 결합이고,

[0013] Y₁ 내지 Y₉는 서로 독립적으로, C 또는 N이고,

[0014] Y₁₀ 및 Y₁₁은 서로 독립적으로, C, N, O 또는 S이고,

[0015] Y₁과 Y₁₀, Y₁과 Y₂, X₂와 Y₃, X₂와 Y₄, Y₄와 Y₅, X₅₁과 Y₃, X₅₁과 Y₅, Y₄와 Y₆, X₃와 Y₇, X₃와 Y₈, X₄와 Y₉ 및 X₄와 Y₁₁는 각각, 화학 결합을 통하여 서로 연결되어 있고,

[0016] CY₁ 내지 CY₅는 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0017] CY₅, CY₂, CY₃ 및 M에 의하여 형성된 시클로메탈화 고리(cyclometallated ring)는 6원환, 7원환 또는 8원환이고,

[0018] T₁ 내지 T₃는 서로 독립적으로, *-N[(L₅)_{b5}-(R₅)]-*', *-B(R₅)-*', *-P(R₅)-*', *-C(R₅)(R₆)-*', *-Si(R₅)(R₆)-*', *-Ge(R₅)(R₆)-*', *-S-*', *-Se-*', *-O-*', *-C(=O)-*', *-S(=O)-*', *-S(=O)₂-*', *-C(R₅)=*', *=C(R₅)-*', *-C(R₅)=C(R₆)-*', *-C(=S)-*' 및 *-C≡C-*' 중에서 선택되고,

[0019] R₅ 및 R₆은 선택적으로, 단일 결합 또는 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

[0020] n₁ 내지 n₃는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고, n₁이 0일 경우 *(T₁)_{n1}-*'은 단일 결합이 되고, n₂가 0일 경우 *(T₂)_{n2}-*'는 단일 결합이 되고, n₃가 0일 경우 *(T₃)_{n3}-*'은 단일 결합이 되고,

[0021] n₁ + n₂ + n₃는 1 이상이고,

[0022] X₅₁은 O, S, N[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}], C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}], Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}], C(=O), N,

$C[(L_7)_{b7}-(R_7)_{c7}]$ 또는 $Si[(L_7)_{b7}-(R_7)_{c7}]$ 이고,

- [0023] R_7 및 R_8 은 선택적으로, 단일 결합 또는 제2연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0024] L_1 내지 L_5 , L_7 및 L_8 은 서로 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,
- [0025] b_1 내지 b_5 , b_7 및 b_8 은 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0026] R_1 내지 R_8 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 및 -P(=O)(Q₈)(Q₉) 중에서 선택되고,
- [0027] c_1 내지 c_4 , c_7 및 c_8 은 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택되고,
- [0028] a_1 내지 a_4 는 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수 중에서 선택되고,
- [0029] 서로 이웃한 복수의 R_1 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0030] 서로 이웃한 복수의 R_2 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0031] 서로 이웃한 복수의 R_3 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0032] 서로 이웃한 복수의 R_4 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0033] R_1 내지 R_4 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,
- [0034] 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 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,
- [0035] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 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 및 C_1-C_{60} 알콕시기;
- [0036] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C_3-

C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅), -B(Q₁₆)(Q₁₇) 및 -P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0037] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

[0038] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅), -B(Q₂₆)(Q₂₇) 및 -P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0039] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), -B(Q₃₆)(Q₃₇) 및 -P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉);

[0040] 중에서 선택되고,

[0041] 상기 Q₁ 내지 Q₉, Q₁₁ 내지 Q₁₉, Q₂₁ 내지 Q₂₉ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₉는 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, C₁-C₆₀알킬기, 중수소, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, 중수소, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0042] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0043] 상기 유기층 중 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 할 수 있다.

[0044] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

발명의 효과

[0045] 상기 유기금속 화합물은 우수한 전기적 특성 및 열적 안정성을 갖는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 우수한 구동 전압, 효율, 전력, 색순도 및 수명 특성을 갖는다. 또한, 상기 유기금속 화합물은 우수한 인광 발광 특성을 가지므로, 이를 이용하면, 높은 진단 효율을 갖는 진단용 조성물을 제공할 수 있다.

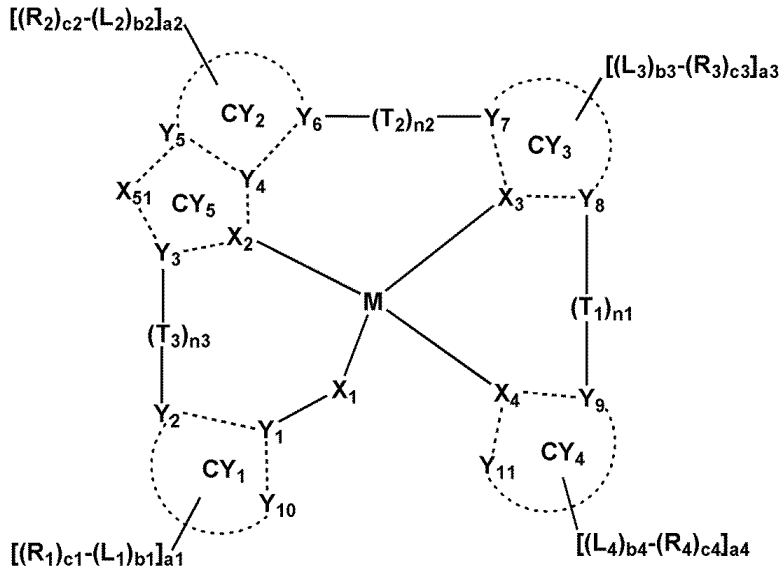
도면의 간단한 설명

[0046] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0047] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0048] <화학식 1>



[0049]

[0050] 상기 화학식 1 중 M은 베릴륨(Be), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 칼슘(Ca), 티타늄(Ti), 망간(Mn), 코발트(Co), 구리(Cu), 아연(Zn), 갈륨(Ga), 게르마늄(Ge), 지르코늄(Zr), 루테튬(Ru), 로듐(Rh), 팔라듐(Pd), 은(Ag), 레늄(Re), 백금(Pt) 또는 금(Au)일 수 있다.

[0051] 일 구현예에 따르면, 상기 M은 백금일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0052] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 양이온과 음이온의 이온쌍으로 이루어지지 않은 중성(neutral)일 수 있다.

[0053] 상기 화학식 1 중 X1은 O 또는 S이고, X1과 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X2 내지 X4는 서로 독립적으로, N 또는 C이고, X2와 M 사이의 결합, X3와 M 사이의 결합 및 X4와 M 사이의 결합 중 1개의 결합은 공유 결합이고, 나머지 2개의 결합은 배위 결합일 수 있다.

[0054] 예를 들어, 상기 화학식 1 중,

[0055] X2는 C이고, X3 및 X4는 N이고, X2와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X3와 M 사이의 결합 및 X4와 M 사이의 결합은 배위 결합이거나;

[0056] X3는 C이고, X2 및 X4는 N이고, X3와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X2와 M 사이의 결합 및 X4와 M 사이의 결합은 배위 결합이거나; 또는

[0057] X4는 C이고, X2 및 X3는 N이고, X4와 M 사이의 결합은 공유 결합이고, X2와 M 사이의 결합 및 X3와 M 사이의 결합은 배위 결합;

[0058] 일 수 있다.

[0059] 상기 화학식 1 중 Y1 내지 Y9는 서로 독립적으로, C 또는 N이고, Y10 및 Y11은 서로 독립적으로, C, N, O 또는 S이고, Y1과 Y10, Y1과 Y2, X2와 Y3, X2와 Y4, Y4와 Y5, X51과 Y3, X51과 Y5, Y4와 Y6, X3와 Y7, X3와 Y8, X4와 Y9 및 X4와 Y11는 각각, 화학 결합을 통하여 서로 연결되어 있을 수 있다.

[0060] 상기 화학식 1 중 CY1 내지 CY5는 서로 독립적으로, C5-C30카보시클릭 그룹 및 C1-C30헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고, CY5, CY2, CY3 및 M에 의하여 형성된 시클로메탈화 고리(cyclometallated ring)는 6원환, 7원환 또는 8원환이다.

[0061] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 CY1 내지 CY4는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인텐 그룹, 플루오렌 그룹, 인

돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 키나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 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 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹 중에서 선택될 수 있다.

[0062] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 CY_1 내지 CY_4 는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0063] 상기 화학식 1 중 T_1 내지 T_3 는 서로 독립적으로, $*-N[(L_5)_{b5}-(R_5)]-*'$, $*-B(R_5)-*'$, $*-P(R_5)-*'$, $*-C(R_5)(R_6)-*'$, $*-Si(R_5)(R_6)-*'$, $*-Ge(R_5)(R_6)-*'$, $*-S-*'$, $*-Se-*'$, $*-O-*'$, $*-C(=O)-*'$, $*-S(=O)-*'$, $*-S(=O)_2-*'$, $*-C(R_5)=*'$, $*=C(R_5)-*'$, $*-C(R_5)=C(R_6)-*'$, $*-C(=S)-*'$ 및 $*-C\equiv C-*'$ 중에서 선택될 수 있다. L_5 , b_5 , R_5 및 R_6 에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다.

[0064] 상기 R_5 및 R_6 은 선택적으로, 단일 결합 또는 제1연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.

[0065] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 T_1 내지 T_3 는 서로 독립적으로, $*-N[(L_5)_{b5}-(R_5)]-*'$, $*-C(R_5)(R_6)-*'$, $*-Si(R_5)(R_6)-*'$, $*-Ge(R_5)(R_6)-*'$, $*-S-*'$ 및 $*-O-*'$ 중에서 선택될 수 있다.

[0066] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 T_1 내지 T_3 는 서로 독립적으로, $*-C(R_5)(R_6)-*'$, $*-Si(R_5)(R_6)-*'$ 및 $*-Ge(R_5)(R_6)-*'$ 중에서 선택되고, 상기 R_5 와 R_6 은 단일 결합 또는 제1연결기를 통하여 서로 결합되어 있을 수 있다. 상기 제1연결기는 $*-N[(L_9)_{b9}-(R_9)]-*'$, $*-B(R_9)-*'$, $*-P(R_9)-*'$, $*-C(R_9)(R_{10})-*'$, $*-Si(R_9)(R_{10})-*'$, $*-Ge(R_9)(R_{10})-*'$, $*-S-*'$, $*-Se-*'$, $*-O-*'$, $*-C(=O)-*'$, $*-S(=O)-*'$, $*-S(=O)_2-*'$, $*-C(R_9)=*'$, $*=C(R_9)-*'$, $*-C(R_9)=C(R_{10})-*'$, $*-C(=S)-*'$ 및 $*-C\equiv C-*'$ 중에서 선택되고, 상기 L_9 및 b_9 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L_5 및 b_5 에 대한 설명을 참조하고, 상기 R_9 및 R_{10} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_5 에 대한 설명을 참조하고, * 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0067] 상기 화학식 1 중 n_1 내지 n_3 는 서로 독립적으로, 0, 1, 2 또는 3이고, n_1 이 0일 경우 $*-(T_1)_{n_1}-*'$ 은 단일 결합이 되고, n_2 가 0일 경우 $*-(T_2)_{n_2}-*'$ 는 단일 결합이 되고, n_3 가 0일 경우 $*-(T_3)_{n_3}-*'$ 은 단일 결합이 되고, $n_1 + n_2 + n_3$ 는 1 이상일 수 있다.

[0068] 예를 들어, 상기 $n_1 + n_2 + n_3$ 는 1 또는 2일 수 있다.

[0069] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,

[0070] n_1 은 1이고, n_2 및 n_3 는 0이거나;

[0071] n_2 는 1이고, n_1 및 n_3 는 0이거나; 또는

[0072] n_3 는 1이고, n_1 및 n_2 는 0인;

[0073] 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

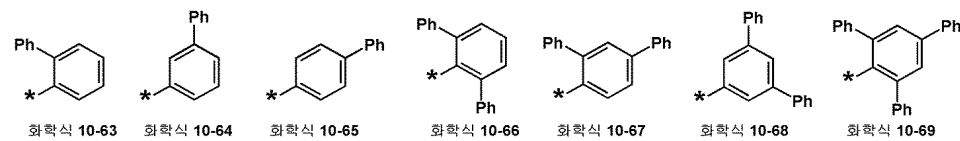
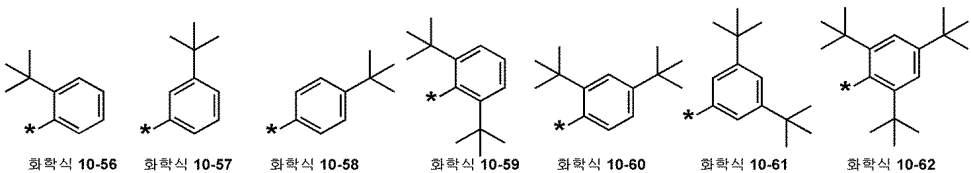
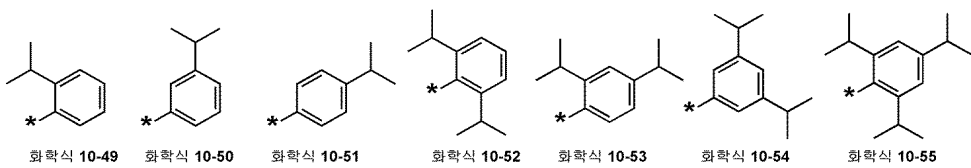
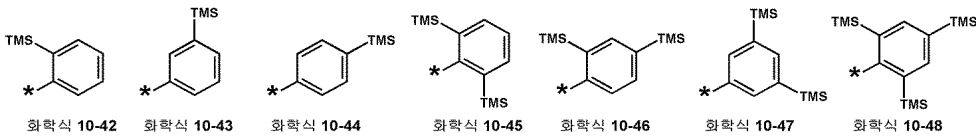
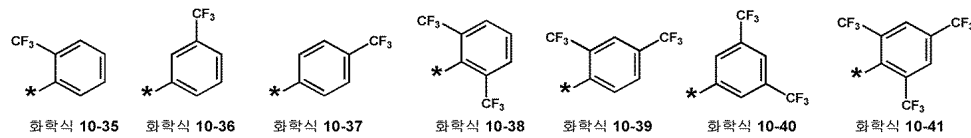
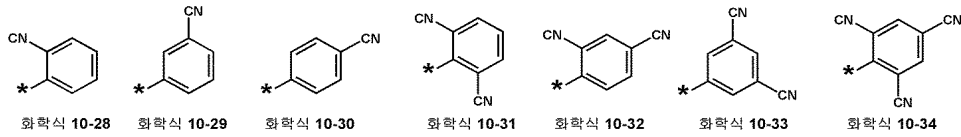
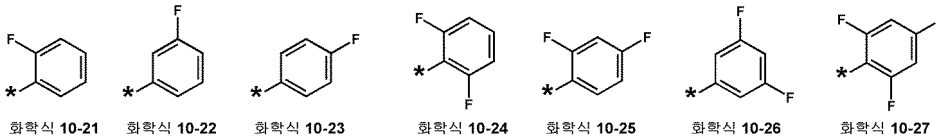
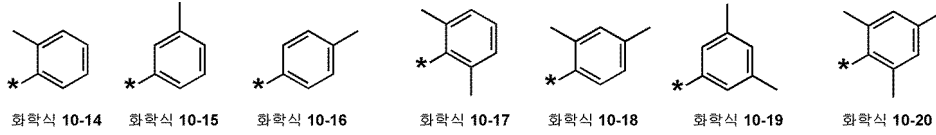
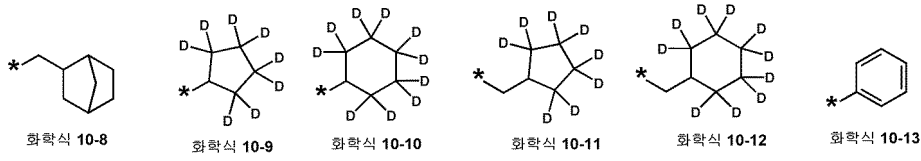
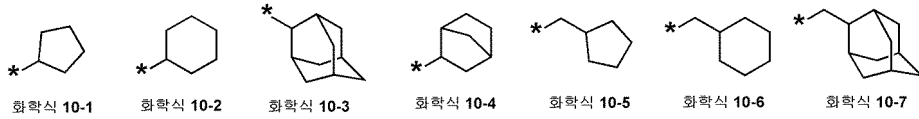
[0074] 상기 화학식 1 중 X_{51} 은 0, S, $N[(L_7)_{b7}-(R_7)_{c7}]$, $C[(L_7)_{b7}-(R_7)_{c7}][(L_8)_{b8}-(R_8)_{c8}]$, $Si[(L_7)_{b7}-(R_7)_{c7}][(L_8)_{b8}-(R_8)_{c8}]$, $C(=O)$, N, $C[(L_7)_{b7}-(R_7)_{c7}]$ 또는 $Si[(L_7)_{b7}-(R_7)_{c7}]$ 일 수 있다. 여기서, 상기 L_7 , L_8 , b_7 , b_8 , R_7 , R_8 , c_7 및 c_8 에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다.

[0075] 상기 R_7 및 R_8 은 선택적으로, 단일 결합 또는 제2연결기를 통하여 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보

시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다. 상기 제2연결기에 대한 설명은 본 명세서 중 제1연결기에 대한 설명을 참조한다.

- [0076] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,
- [0077] i) Y₃ 및 Y₅는 C이고, X₅₁과 Y₃ 사이의 결합 및 X₅₁과 Y₅ 사이의 결합은 단일 결합이고, X₅₁은 O, S, N[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}], C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}], Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}] 또는 C(=O)이거나,
- [0078] ii) Y₃는 C이고, Y₅는 N이고, X₅₁과 Y₃ 사이의 결합은 이중 결합이고, X₅₁과 Y₅ 사이의 결합은 단일 결합이고, X₅₁은 N, C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}] 또는 Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}]이거나, 또는
- [0079] iii) Y₃는 N이고, Y₅는 C이고, X₅₁과 Y₃ 사이의 결합은 단일 결합이고, X₅₁과 Y₅ 사이의 결합은 이중 결합이고, X₅₁은 N, C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}] 또는 Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}]일 수 있다.
- [0080] 상기 화학식 1 중 L₁ 내지 L₅, L₇ 및 L₈은 서로 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택될 수 있다.
- [0081] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 L₁ 내지 L₅, L₇ 및 L₈은 서로 독립적으로,
- [0082] 단일 결합, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인텐 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 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 및 벤조티아디아졸 그룹;
- [0083] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 플루오레닐기, 디메틸플루오레닐기, 디페닐플루오레닐기, 카바졸일기, 페닐카바졸일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 디메틸디벤조실롤일기, 디페닐디벤조실롤일기, -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), -B(Q₃₆)(Q₃₇) 및 -P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 실롤 그룹, 인텐 그룹, 플루오렌 그룹, 인돌 그룹, 카바졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 벤조실롤 그룹, 디벤조실롤 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 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 및 벤조티아디아졸 그룹;
- [0084] 중에서 선택되고,
- [0085] Q₃₁ 내지 Q₃₉는 서로 독립적으로,
- [0086] -CH₃, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CH₂CH₃, -CH₂CD₃, -CH₂CD₂H, -CH₂CDH₂, -CHDCH₃, -CHDCD₂H, -CHDCHD₂, -CHDCH₃, -CD₂CD₃, -CD₂CD₂H 및 -CD₂CDH₂;
- [0087] n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기; 및

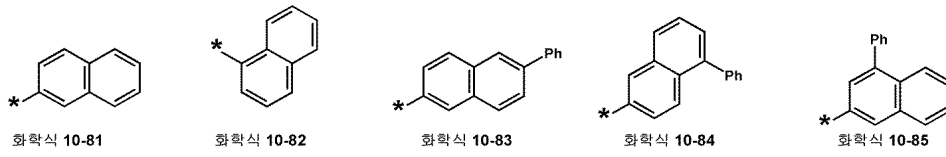
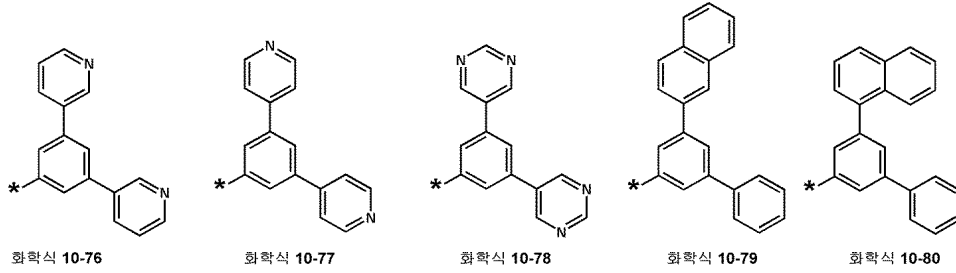
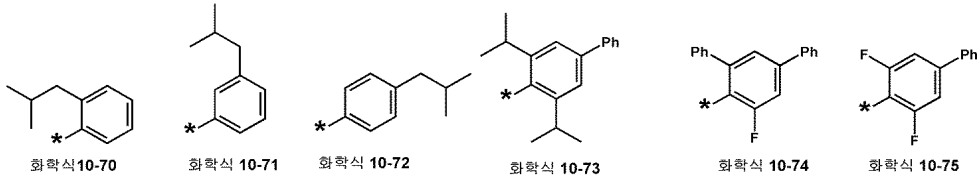
- [0088] 중수소, C₁-C₁₀알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 및 나프틸기;
- [0089] 중에서 선택될 수 있다.
- [0090] 상기 화학식 1 중 b₁ 내지 b₅, b₇ 및 b₈은 각각 L₁ 내지 L₅, L₇ 및 L₈의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택된다. 상기 b₁ 내지 b₅, b₇ 및 b₈이 각각 2 이상일 경우, 2 이상의 L₁ 내지 L₅, L₇ 및 L₈은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 예를 들어, 상기 b₁ 내지 b₅, b₇ 및 b₈은 서로 독립적으로, 1 또는 2일 수 있다.
- [0091] 상기 화학식 1 중 R₁ 내지 R₈은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF₅, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁)(Q₂), -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅), -B(Q₆)(Q₇) 및 -P(=O)(Q₈)(Q₉) 중에서 선택되고, 상기 Q₁ 내지 Q₉에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.
- [0092] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 R₁ 내지 R₈은 서로 독립적으로,
- [0093] 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, -SF₅, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0094] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C₁-C₂₀알킬기 및 C₁-C₂₀알콕시기;
- [0095] 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 디벤조실롤일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 및 이미다조피리미디닐기;
- [0096] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantan-1-yl), 노르보나닐기(norbornan-1-yl), 노르보네닐기(norbornen-1-yl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이



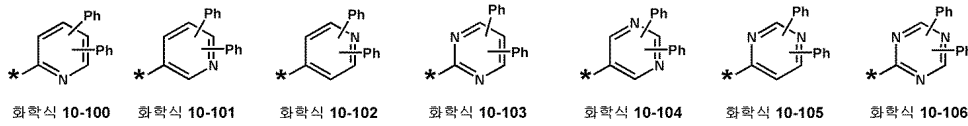
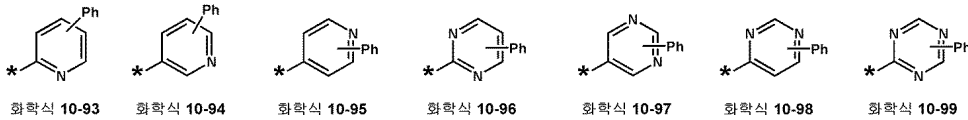
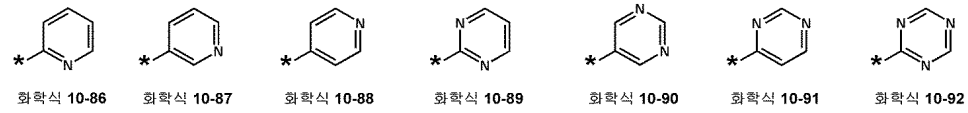
[0102]

[0103]

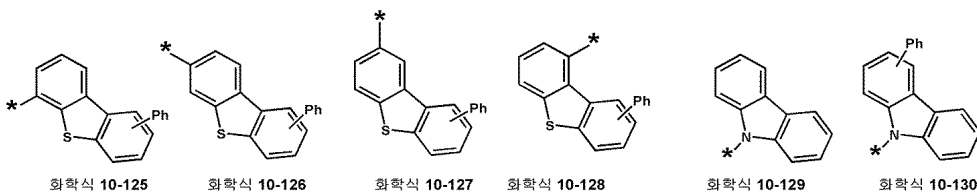
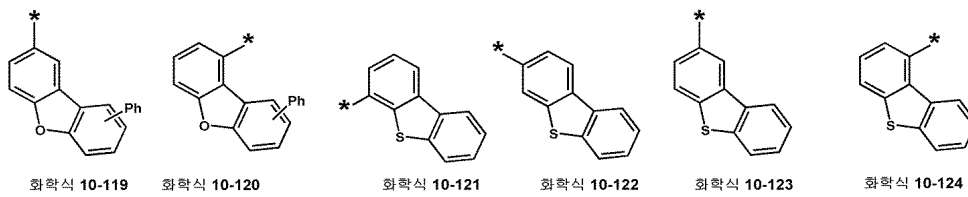
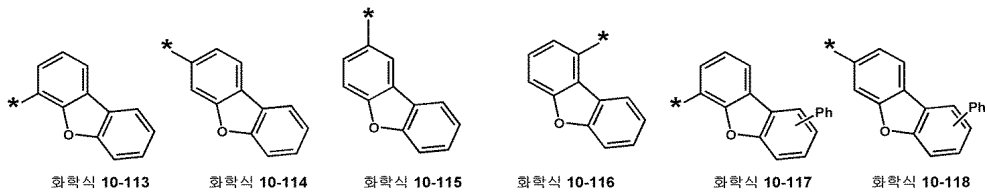
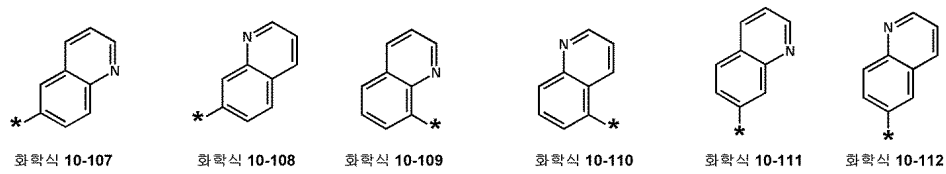
[0104]



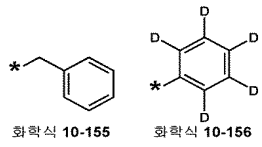
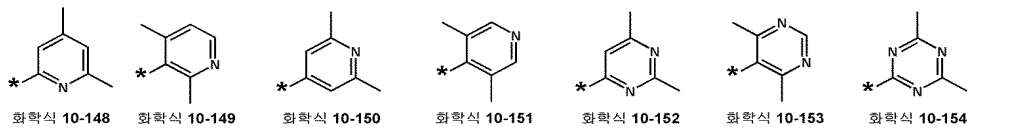
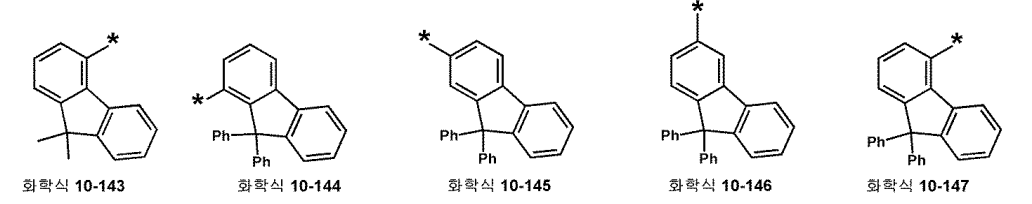
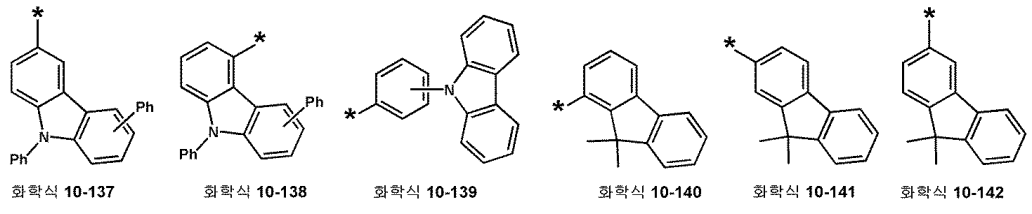
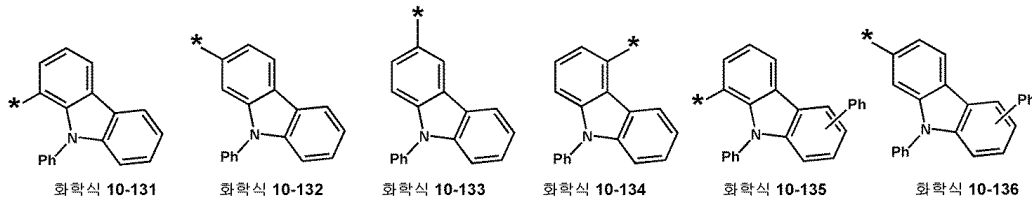
[0105]



[0106]



[0107]



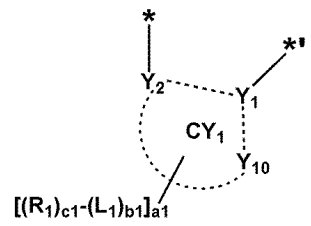
[0108]
[0109]
[0110]
[0111]

상기 화학식 9-1 내지 9-19 및 10-1 내지 10-156 중 Ph는 페닐기이고, TMS는 트리메틸실릴기이고, *는 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

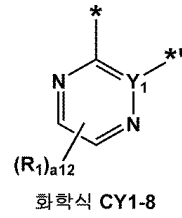
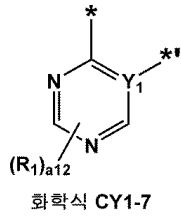
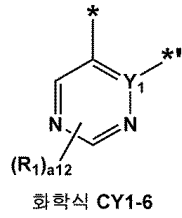
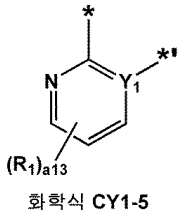
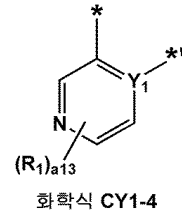
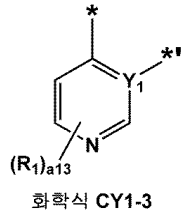
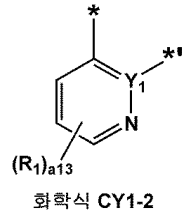
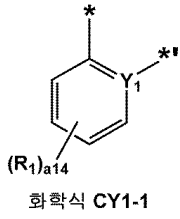
상기 화학식 1 중 c1 내지 c4, c7 및 c8은 각각 R₁ 내지 R₄, R₇ 및 R₈의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 1 내지 5의 정수 중에서 선택될 수 있다. 상기 c1 내지 c4, c7 및 c8이 각각 2 이상일 경우, 2 이상의 R₁ 내지 R₄, R₇ 및 R₈은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 예를 들어, 상기 c1 내지 c4, c7 및 c8은 서로 독립적으로, 1 또는 2일 수 있다.

상기 화학식 1 중 a1 내지 a4는 각각 *-[(L₁)_{b1}-(R₁)_{c1}], *-[(L₂)_{b2}-(R₂)_{c2}], *-[(L₃)_{b3}-(R₃)_{c3}] 및 *-[(L₄)_{b4}-(R₄)_{c4}]의 개수는 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 0 내지 20의 정수 중에서 선택될 수 있다. 상기 a1 내지 a4가 각각 2 이상일 경우, 2 이상의 *-[(L₁)_{b1}-(R₁)_{c1}], *-[(L₂)_{b2}-(R₂)_{c2}], *-[(L₃)_{b3}-(R₃)_{c3}] 및 *-[(L₄)_{b4}-(R₄)_{c4}]는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 예를 들어, 상기 a1 내지 a4는 서로 독립적으로, 1 또는 2일 수 있다.

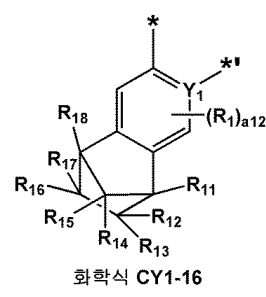
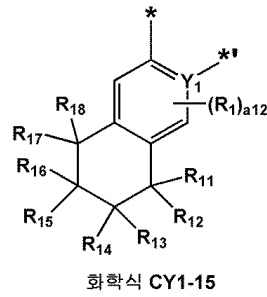
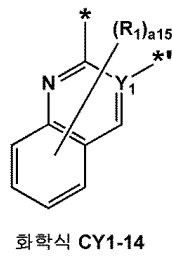
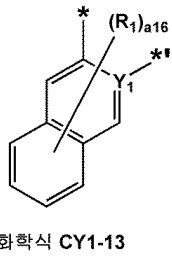
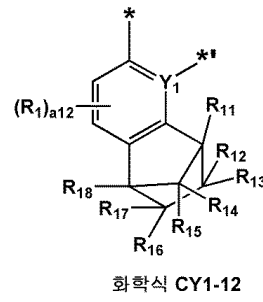
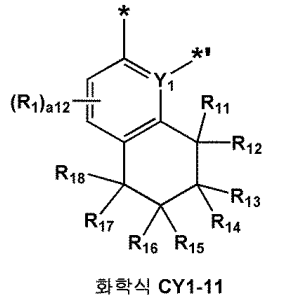
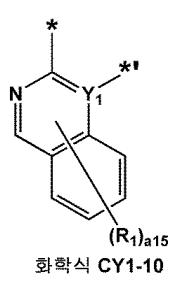
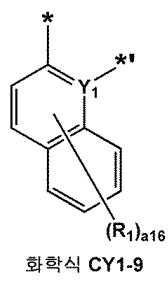
[0113]



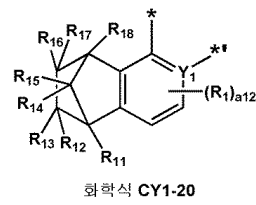
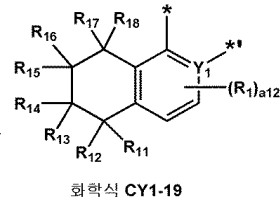
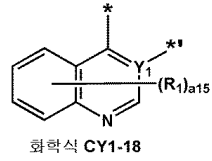
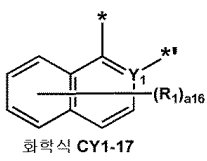
일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 $[(R_1)_{c1}-(L_1)_{b1}]_{a1}$ 로 표시되는 모이어티는 하기 화학식 CY1-1 내지 CY1-26로 표시되는 그룹(예를 들면, 화학식 CY1-1, CY1-13, CY1-24 및 CY1-26으로 표시되는 그룹) 중에서 선택될 수 있다:



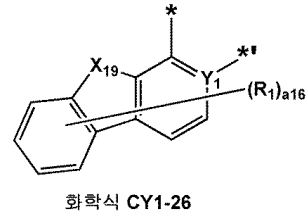
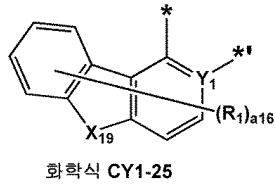
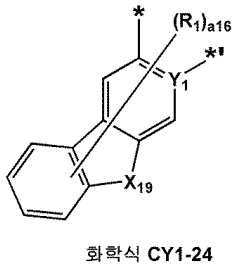
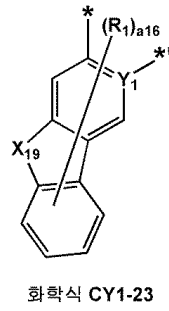
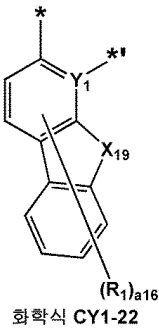
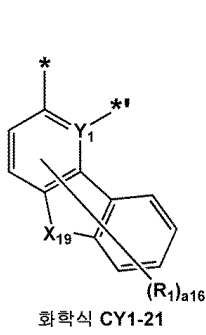
[0114]



[0115]



[0116]



[0117]

상기 화학식 CY1-1 내지 CY1-26 중,

[0118]

Y_1 및 R_1 에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0119]

X_{19} 는 $C(R_{19a})(R_{19b})$, $N[(L_{19})_{b19}-(R_{19})_{c19}]$, O, S 또는 $Si(R_{19a})(R_{19b})$ 이고,

[0120]

L_{19} , b_{19} , R_{19} 및 c_{19} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L_1 , b_1 , R_1 및 c_1 에 대한 설명을 참조하고,

[0121]

R_{11} 내지 R_{18} , R_{19a} 및 R_{19b} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_1 에 대한 설명을 참조하고,

[0122]

a_{12} 는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

[0123]

a_{13} 는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

[0124]

a_{14} 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0125]

a_{15} 는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

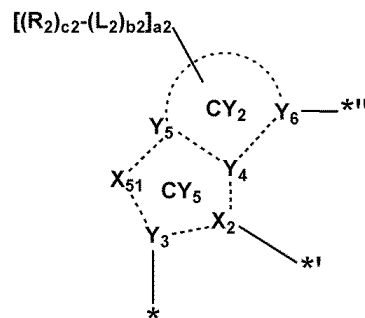
[0126]

a_{16} 는 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

[0127]

* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0128]

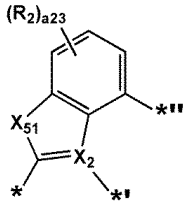


[0129]

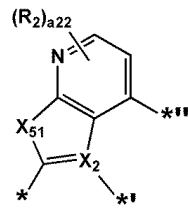
다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중

로 표시되는 모이어티는 하기 화학식

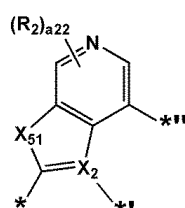
CY2-1 내지 CY2-12로 표시되는 그룹(예를 들면, 하기 화학식 CY2-1로 표시되는 그룹) 중에서 선택될 수 있다:



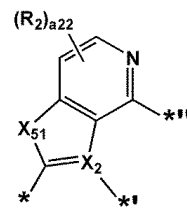
화학식 CY2-1



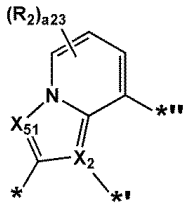
화학식 CY2-2



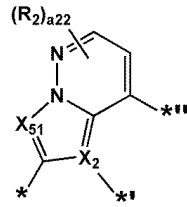
화학식 CY2-3



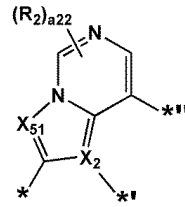
화학식 CY2-4



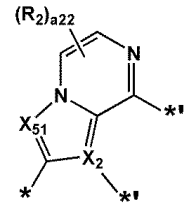
화학식 CY2-5



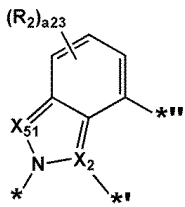
화학식 CY2-6



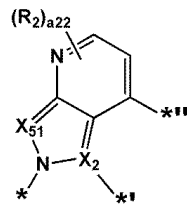
화학식 CY2-7



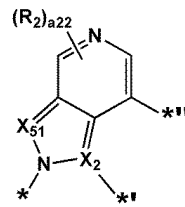
화학식 CY2-8



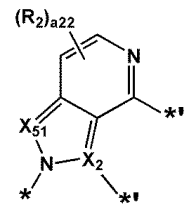
화학식 CY2-9



화학식 CY2-10



화학식 CY2-11



화학식 CY2-12

[0130]

[0131]

[0132]

[0133]

[0134]

[0135]

[0136]

[0137]

[0138]

[0139]

상기 화학식 CY2-1 내지 CY2-12 중,

R₂에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

화학식 CY2-1 내지 CY2-4 중 X₅₁은 O, S, N[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}], C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}], Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}][(L₈)_{b8}-(R₈)_{c8}] 또는 C(=O)이고,

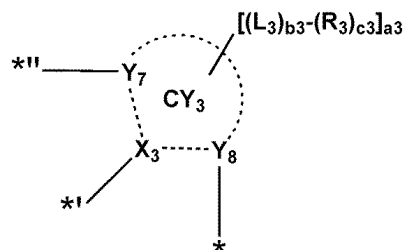
화학식 CY2-5 내지 CY2-12 중 X₅₁은 N, C[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}] 또는 Si[(L₇)_{b7}-(R₇)_{c7}]이고,

상기 L₇, L₈, b₇, b₈, R₇, R₈, c₇ 및 c₈에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

a₂₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

a₂₃는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

*, *' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

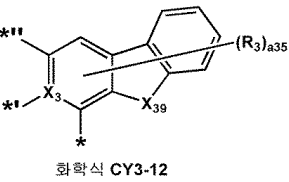
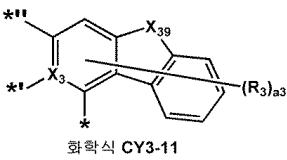
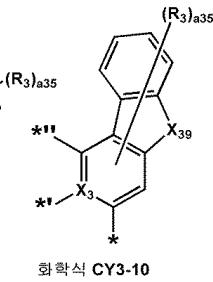
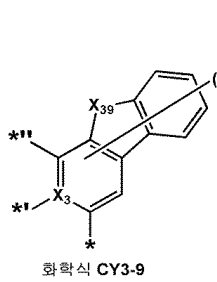
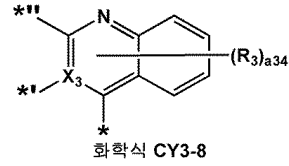
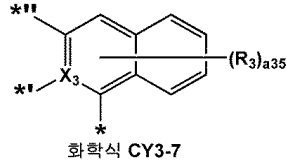
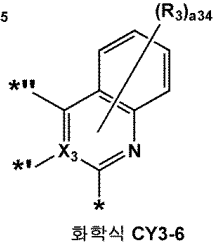
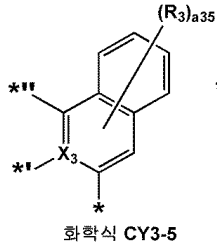
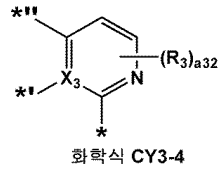
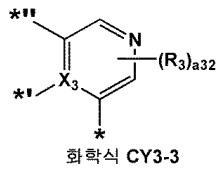
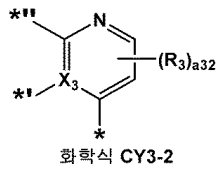
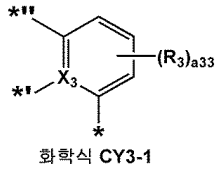


[0140]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중

로 표시되는 모이어티가 하기

화학식 CY3-1 내지 CY3-12로 표시되는 그룹(예를 들면, 하기 화학식 CY3-1, CY3-5, CY3-7, CY3-8 및 CY3-12로 표시되는 그룹) 중에서 선택될 수 있다:



[0141]

[0142]

[0143]

[0144]

[0145]

[0146]

[0147]

[0148]

[0149]

[0150]

[0151]

[0152]

상기 화학식 CY3-1 내지 CY3-12 중,

X₃ 및 R₃에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

X₃₉는 C(R_{39a})(R_{39b}), N[(L₃₉)_{b39}-(R₃₉)_{c39}], O, S 또는 Si(R_{39a})(R_{39b})이고,

L₃₉, b₃₉, R₃₉ 및 c₃₉에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L₃, b₃, R₃ 및 c₃에 대한 설명을 참조하고,

R_{39a} 및 R_{39b}에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₃에 대한 설명을 참조하고,

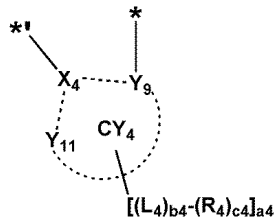
a₃₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

a₃₃은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a₃₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a₃₅는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

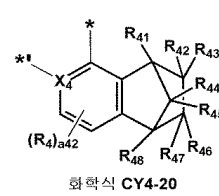
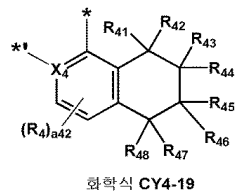
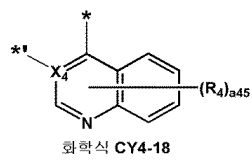
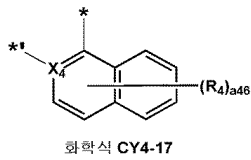
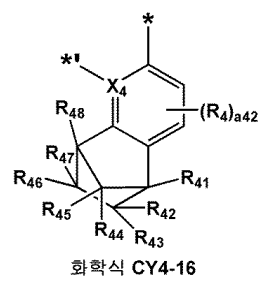
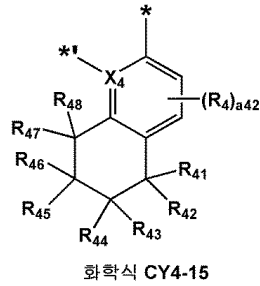
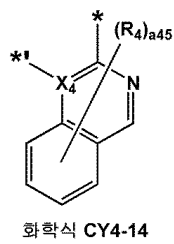
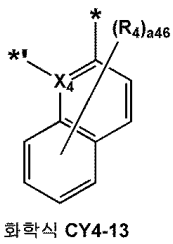
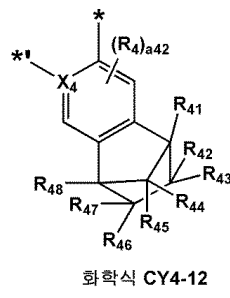
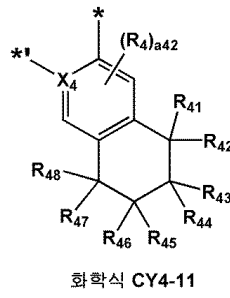
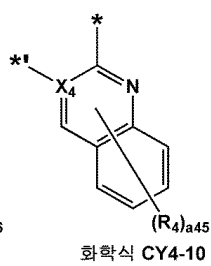
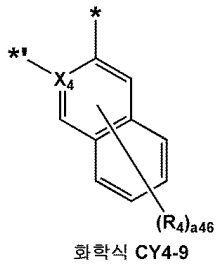
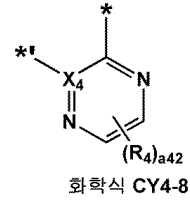
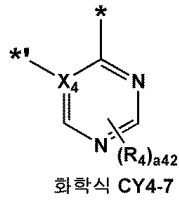
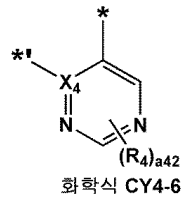
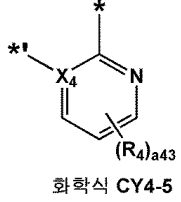
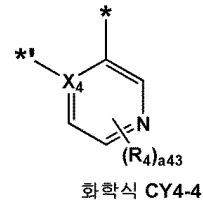
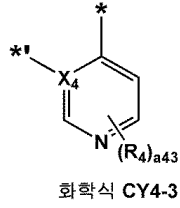
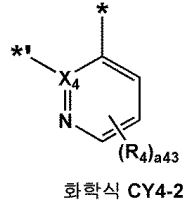
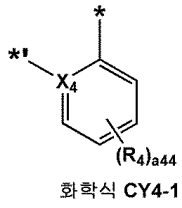
*, *' 및 *''은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.



[0153]

또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중

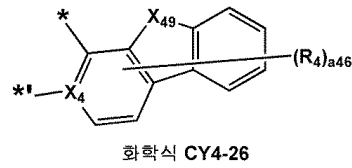
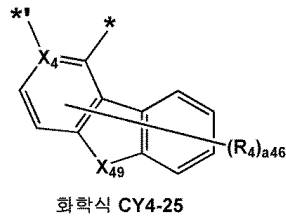
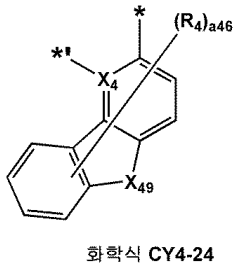
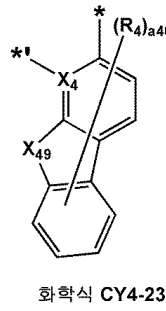
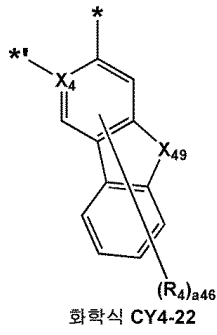
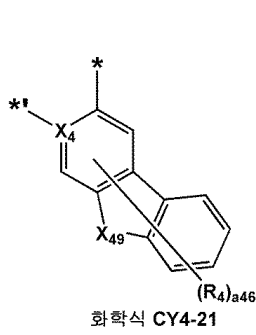
1 내지 CY4-26으로 표시되는 그룹 (예를 들면, 하기 화학식 CY4-1 내지 CY4-5, CY4-9, CY4-11, CY4-18 및 CY4-19로 표시되는 그룹) 중에서 선택될 수 있다:



[0154]

[0155]

[0156]



[0157]

[0158]

[0159]

[0160]

[0161]

[0162]

[0163]

[0164]

[0165]

[0166]

[0167]

[0168]

[0169]

상기 화학식 CY4-1 내지 CY4-26 중,

X₄ 및 R₄에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

X₄₉는 C(R_{49a})(R_{49b}), N[(L₄₉)_{b49}-(R₄₉)_{c49}], O, S 또는 Si(R_{49a})(R_{49b})이고,

L₄₉, b₄₉, R₄₉ 및 c₄₉에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L₄, b₄, R₄ 및 c₄에 대한 설명을 참조하고,

R₄₁ 내지 R₄₈, R_{49a} 및 R_{49b}에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₄에 대한 설명을 참조하고,

a₄₂는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

a₄₃는 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

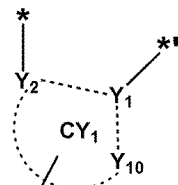
a₄₄는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a₄₅는 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

a₄₆는 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

* 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

또 다른 구현예에 따르면,

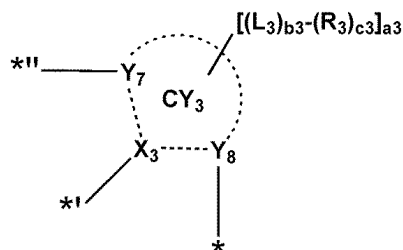


[0170]

상기 화학식 1 중 [(R₁)_{c1}-(L₁)_{b1}]_{a1}

로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY1(1) 내지 CY1(11)로 표시

되는 그룹 중에서 선택되고 (선택되거나),

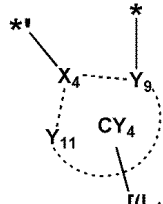


[0171]

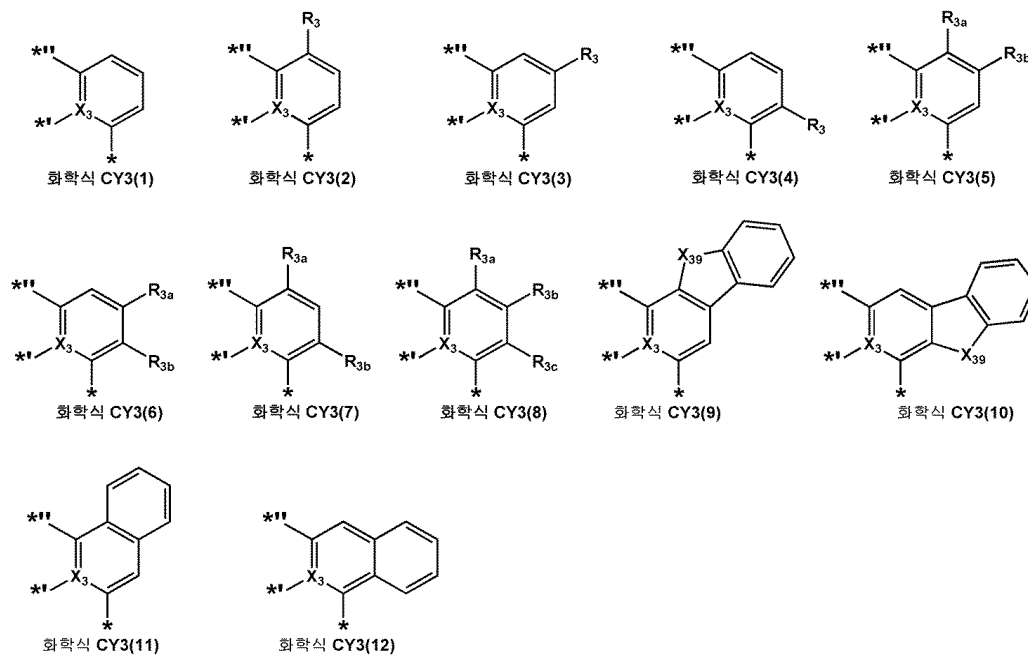
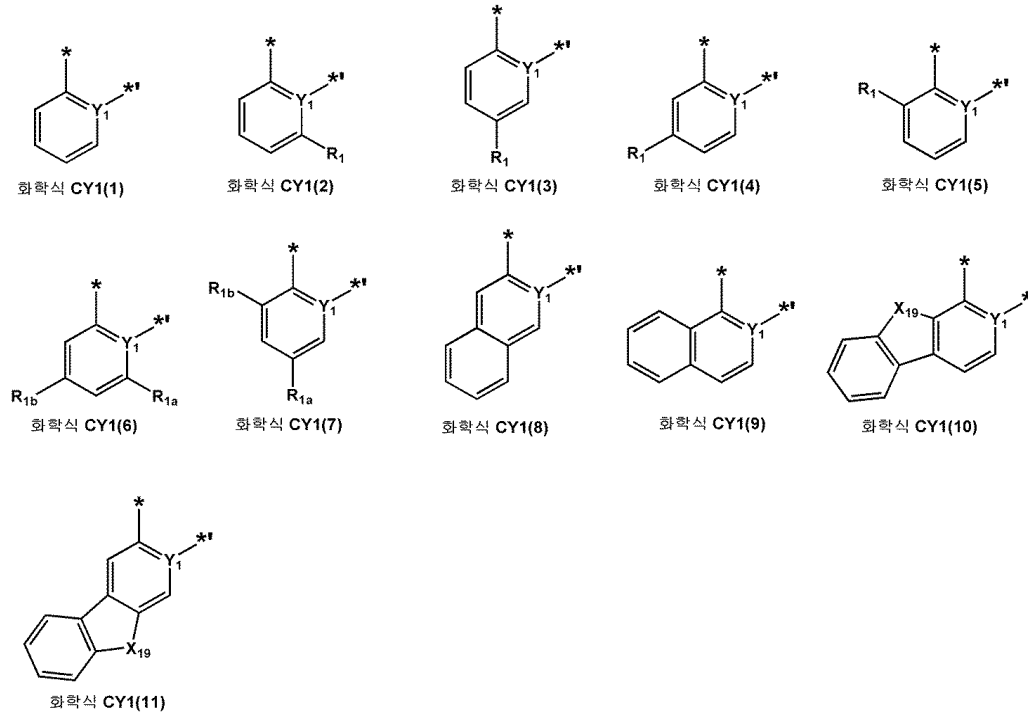
상기 화학식 1 중

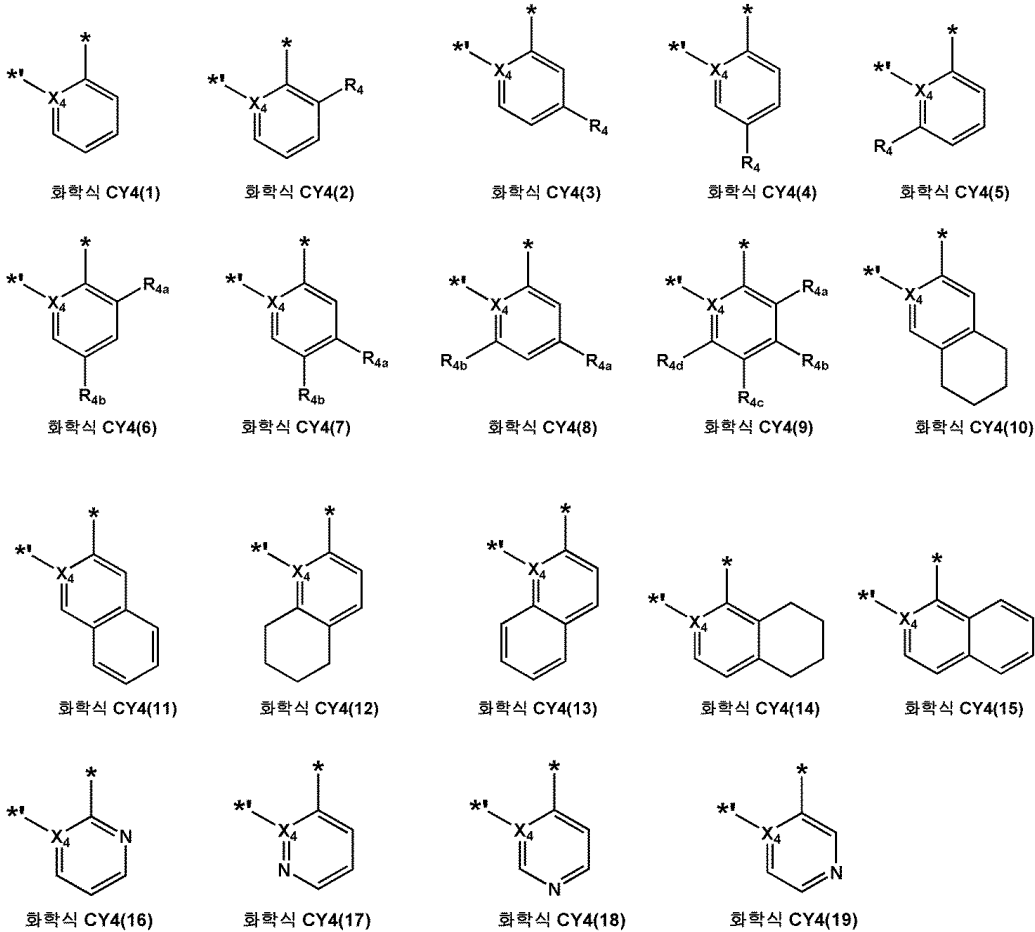
로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY3(1) 내지

CY3(12)로 표시되는 그룹 중에서 선택되고 (선택되거나),



상기 화학식 1 중 $[(L_4)_{b_4}-(R_4)_{c_4}]_{a_4}$ 로 표시되는 모이어티가 하기 화학식 CY4(1) 내지 CY4(19)로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:





[0175]

[0176]

[0177]

[0178]

[0179]

[0180]

[0181]

[0182]

[0183]

[0184]

[0185]

[0186]

[0187]

상기 화학식 CY1(1) 내지 CY1(11), CY3(1) 내지 CY3(12) 및 CY4(1) 내지 CY4(19) 중,

X_{19} 는 $C(R_{19a})(R_{19b})$, $N[(L_{19})_{b19}-(R_{19})_{c19}]$, O, S 또는 $Si(R_{19a})(R_{19b})$ 이고,

X_{39} 는 $C(R_{39a})(R_{39b})$, $N[(L_{39})_{b39}-(R_{39})_{c39}]$, O, S 또는 $Si(R_{39a})(R_{39b})$ 이고,

Y_1 , R_1 , X_3 , R_3 , X_4 및 R_4 에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

L_{19} , b_{19} , R_{19} 및 c_{19} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L_1 , b_1 , R_1 및 c_1 에 대한 설명을 참조하고,

L_{39} , b_{39} , R_{39} 및 c_{39} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L_3 , b_3 , R_3 및 c_3 에 대한 설명을 참조하고,

R_{1a} , R_{1b} , R_{19a} 및 R_{19b} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_1 에 대한 설명을 참조하고,

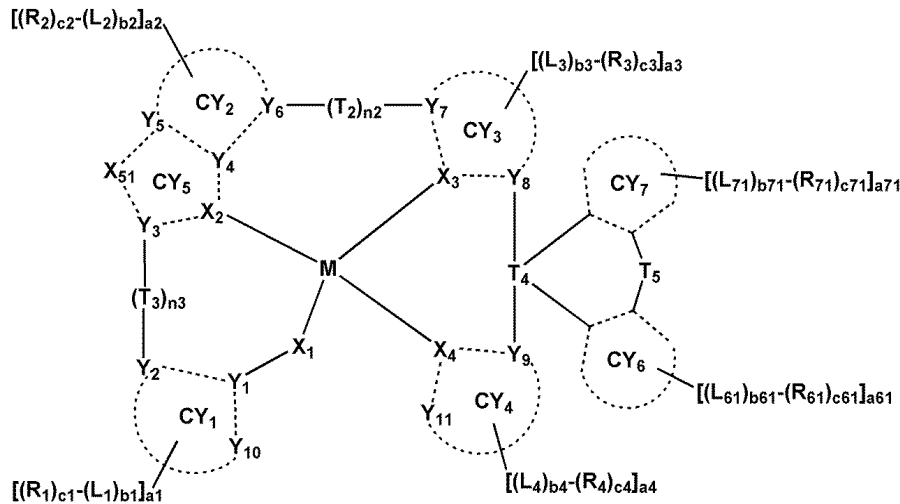
R_{3a} 내지 R_{3d} , R_{39a} 및 R_{39b} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_3 에 대한 설명을 참조하고,

R_{4a} 내지 R_{4d} 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R_4 에 대한 설명을 참조하고,

*, *' 및 *''은 각각 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

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

[0188] <화학식 1-1>



[0189] 상기 화학식 1-1 중,
 [0190]

[0191] M, X₁ 내지 X₄, Y₁ 내지 Y₁₁, CY₁ 내지 CY₅, T₁, T₂, n₁, n₂, X₅₁, L₁ 내지 L₄, b₁ 내지 b₄, R₁ 내지 R₄, c₁ 내지 c₄ 및 a₁ 내지 a₄에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

[0192] CY₆ 및 CY₇은 서로 독립적으로, C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 및 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중에서 선택되고,

[0193] T₄는 C, Si 또는 Ge이고,

[0194] T₅는 단일 결합, *-N[(L₉)_{b9}-(R₉)]-*, *-B(R₉)-*, *-P(R₉)-*, *-C(R₉)(R₁₀)-*, *-Si(R₉)(R₁₀)-*, *-Ge(R₉)(R₁₀)-*, *-S-*, *-Se-*, *-O-*, *-C(=O)-*, *-S(=O)-*, *-S(=O)₂-*, *-C(R₉)=*, *=C(R₉)-*, *-C(R₉)=C(R₁₀)-*, *-C(=S)-* 및 *-C≡C-* 중에서 선택되고,

[0195] L₆₁ 및 L₇₁에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L₁에 대한 설명을 참조하고,

[0196] b₆₁ 및 b₇₁에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 b₁에 대한 설명을 참조하고,

[0197] R₆₁ 및 R₇₁에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R₁에 대한 설명을 참조하고,

[0198] c₆₁ 및 c₇₁에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 c₁에 대한 설명을 참조하고,

[0199] a₆₁ 및 a₇₁에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 a₁에 대한 설명을 참조하고,

[0200] L₉, b₉ 및 R₉에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 L₅, b₅ 및 R₅에 대한 설명을 참조하고,

[0201] * 및 *'은 서로 독립적으로, 이웃한 원자와의 결합 사이트이다.

[0202] 예를 들어, 상기 CY₆ 및 CY₇는 서로 독립적으로, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 및 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0203] 상기 화학식 1 중 i) 서로 이웃한 복수의 R₁ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, ii) 서로 이웃한 복수의 R₂ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, iii) 서로 이웃한 복수의 R₃ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, iv) 서로 이웃한 복수의 R₄ 중 2개는 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹 또

는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고, v) R_1 내지 R_4 중 이웃한 2 이상은 선택적으로, 서로 결합하여, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있다.

[0204] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 i) 서로 이웃한 복수의 R_1 중 2개가 서로 결합하여 형성된, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹, ii) 서로 이웃한 복수의 R_2 중 2개가 서로 결합하여 형성된, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹, iii) 서로 이웃한 복수의 R_3 중 2개가 서로 결합하여 형성된, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹, iv) 서로 이웃한 복수의 R_4 중 2개가 서로 결합하여 형성된, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹, 및 v) R_1 내지 R_4 중 이웃한 2 이상이 서로 결합하여 형성된, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 카보시클릭 그룹 또는 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 헤테로시클릭 그룹은, 서로 독립적으로,

[0205] 펜타디엔 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헵탄 그룹, 아다만탄 그룹, 비시클로-헵탄(bicycle-heptanes) 그룹, 비시클로-옥탄 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 테트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 디하이드로나프탈렌 그룹, 페날렌 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 인덴 그룹, 인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자인덴 그룹, 아자인돌 그룹 및 아자벤조실롤 그룹;

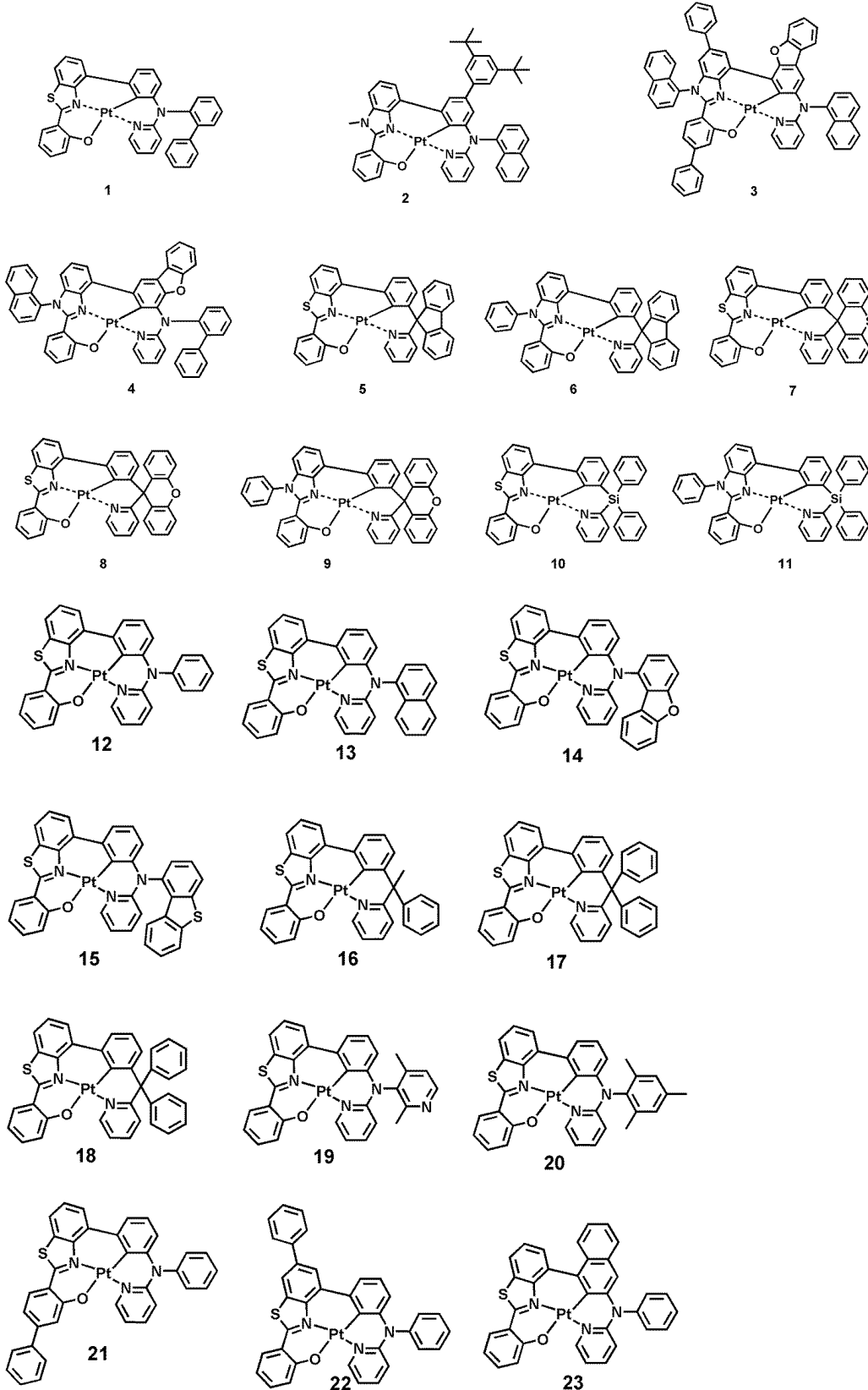
[0206] 적어도 하나의 R_{11} 로 치환된, 펜타디엔 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헵탄 그룹, 아다만탄 그룹, 비시클로-헵탄(bicycle-heptanes) 그룹, 비시클로-옥탄 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 테트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 디하이드로나프탈렌 그룹, 페날렌 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 인덴 그룹, 인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자인덴 그룹, 아자인돌 그룹 및 아자벤조실롤 그룹;

[0207] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0208] 상기 R_{11} 에 대한 설명은 본 명세서 중 R_1 에 대한 설명을 참조한다.

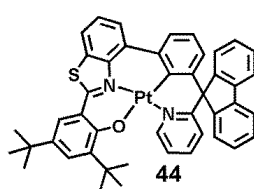
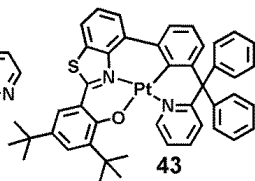
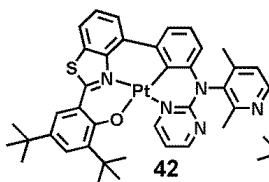
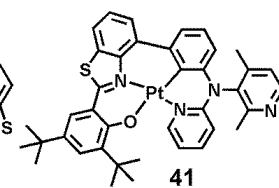
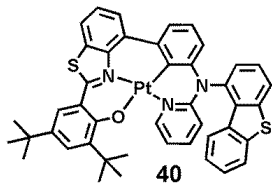
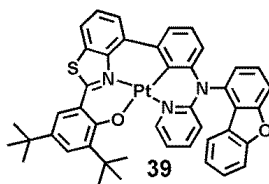
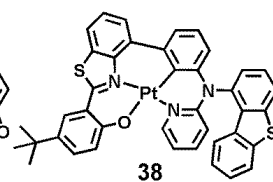
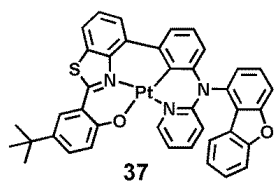
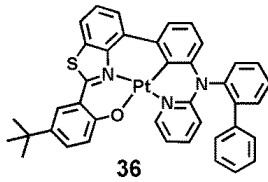
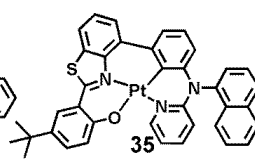
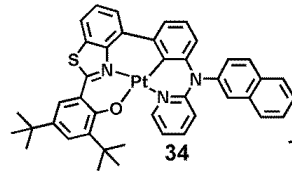
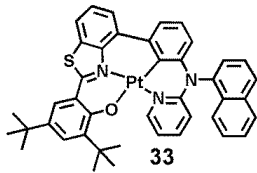
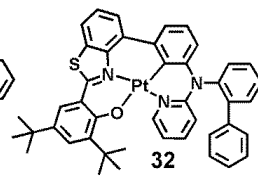
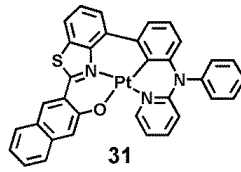
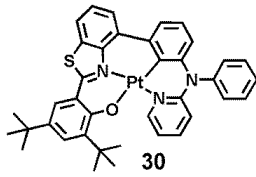
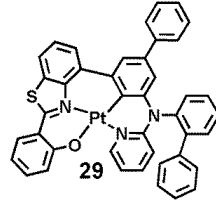
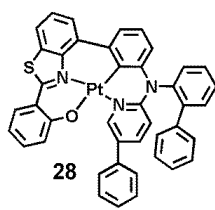
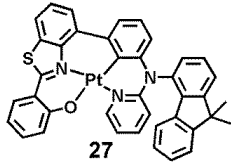
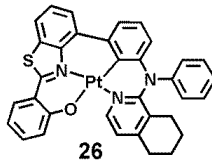
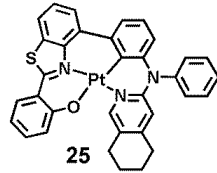
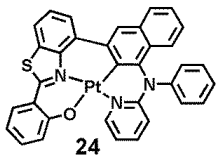
[0209] 본 명세서 중 "아자벤조티오펜, 아자벤조퓨란, 아자인덴, 아자인돌, 아자벤조실롤, 아자디벤조티오펜, 아자디벤조퓨란, 아자플루오렌, 아자카바졸 및 아자디벤조실롤"은 각각, "벤조티오펜, 벤조퓨란, 인덴, 인돌, 아자벤조실롤, 디벤조티오펜, 디벤조퓨란, 플루오렌, 카바졸 및 디벤조실롤"과 동일한 백본을 갖되, 이들의 고리를 형성하는 탄소들 중 적어도 하나가 질소로 치환된, 헤테로환을 의미한다.

[0210] 예를 들어, 상기 유기금속 화합물은 하기 화합물 1 내지 143 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



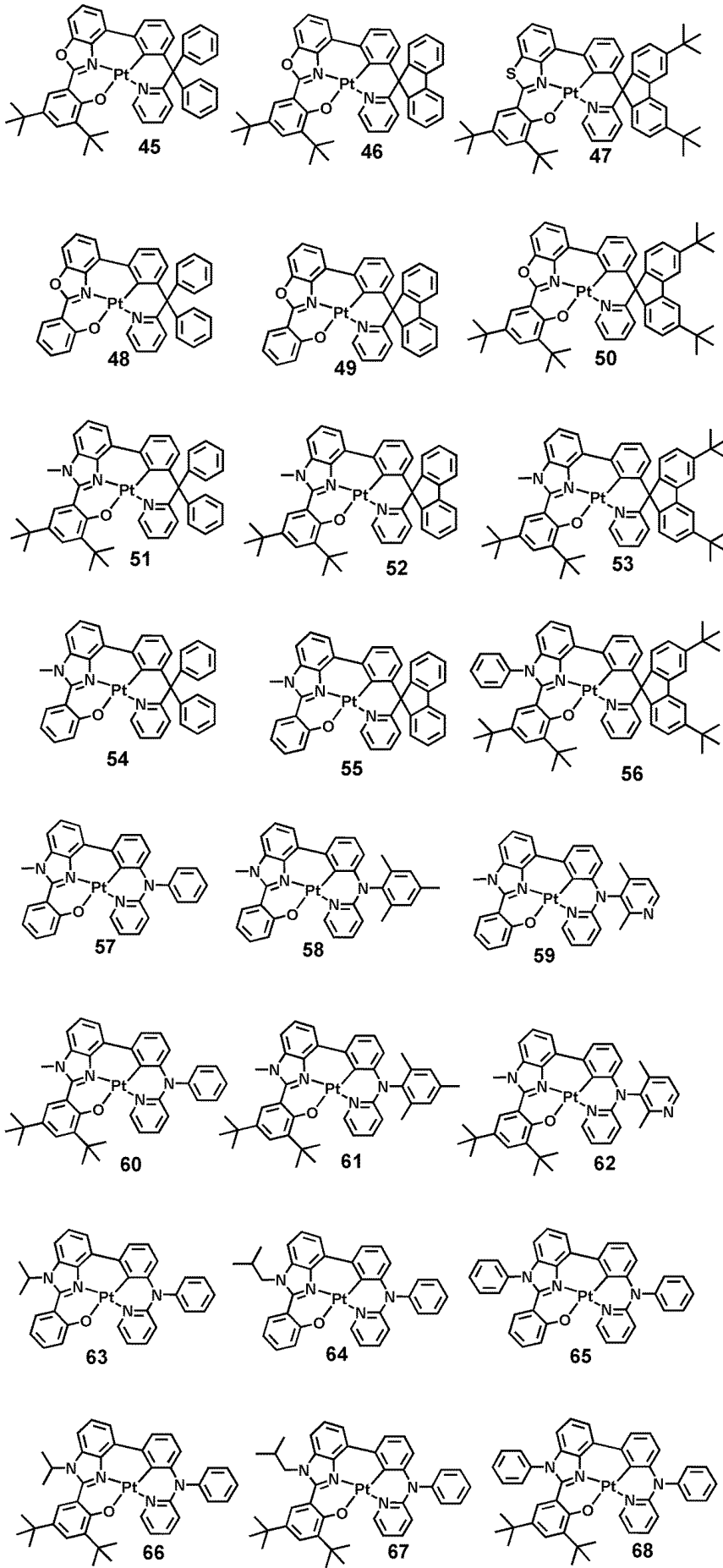
[0211]

[0212]



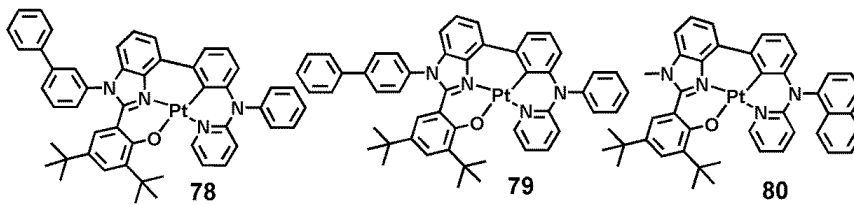
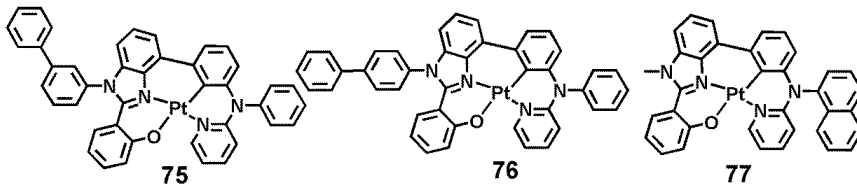
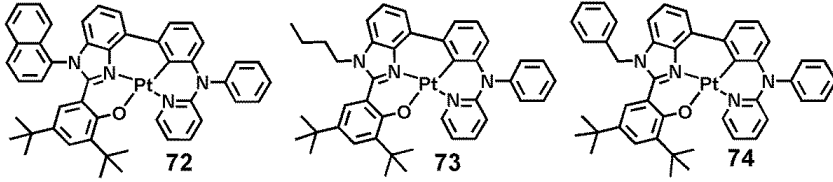
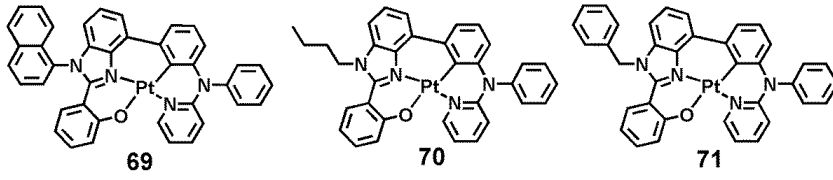
[0213]

[0214]

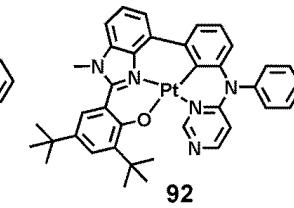
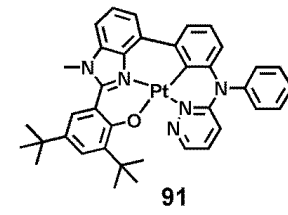
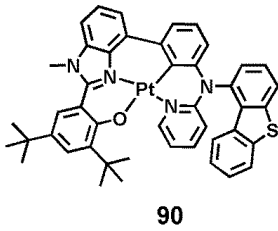
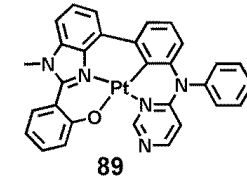
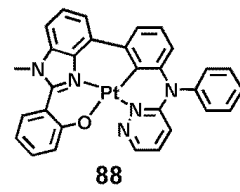
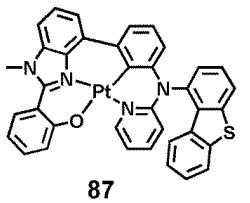
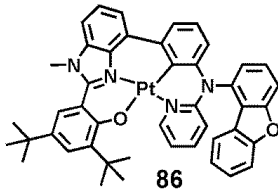
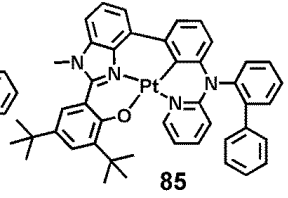
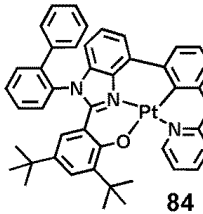
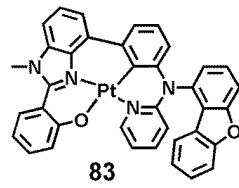
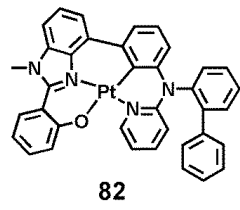
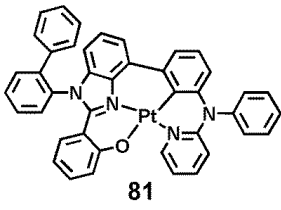


[0215]

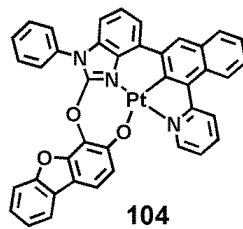
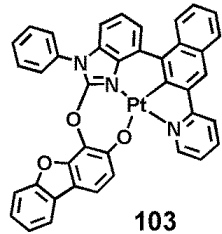
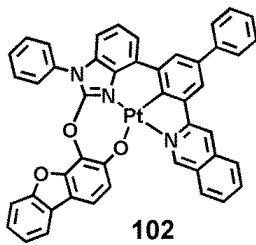
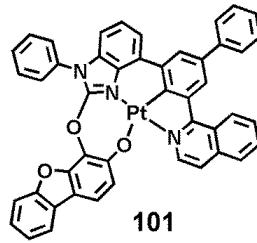
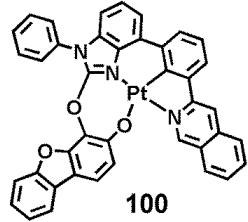
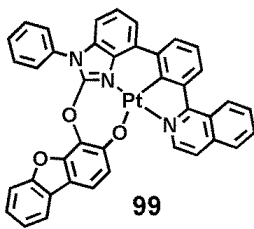
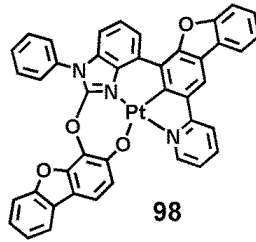
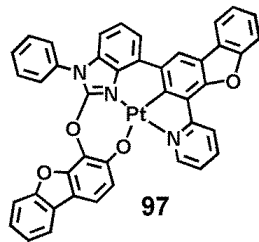
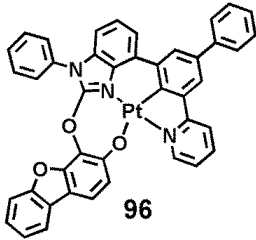
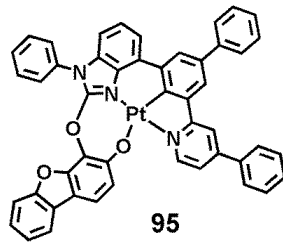
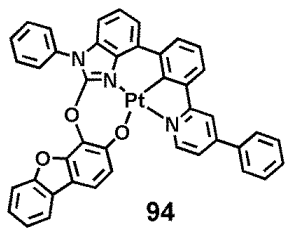
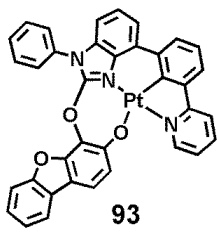
[0216]



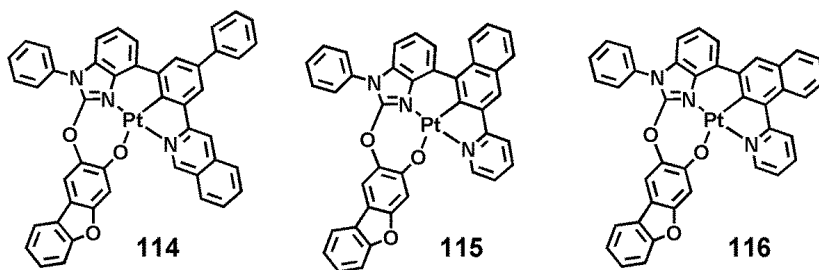
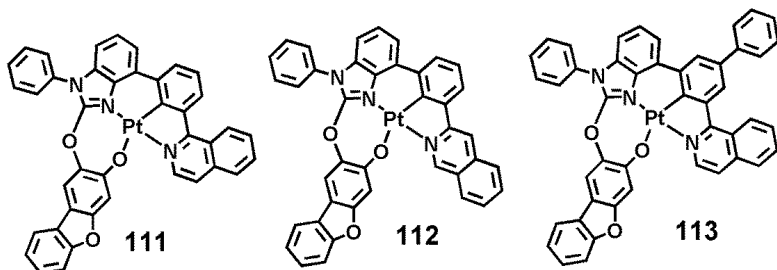
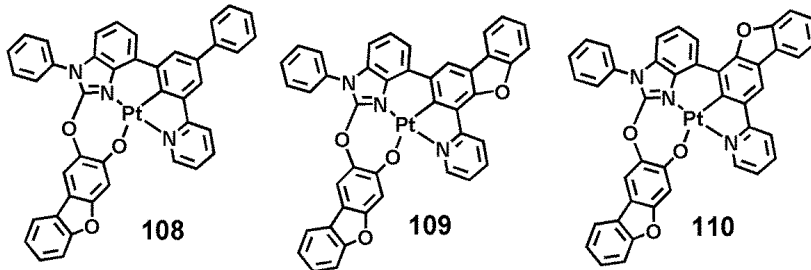
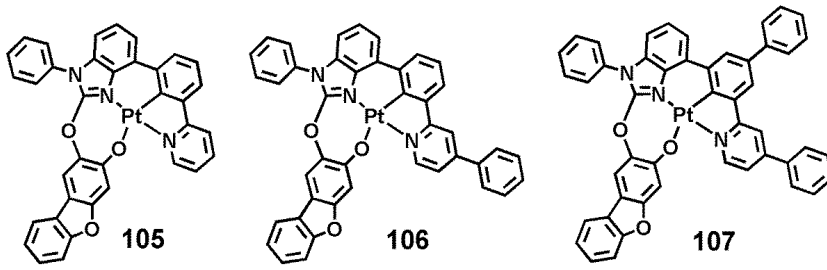
[0217]



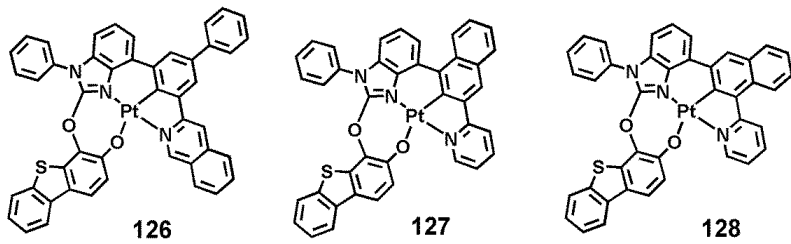
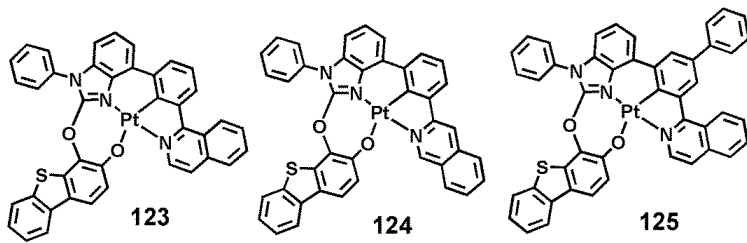
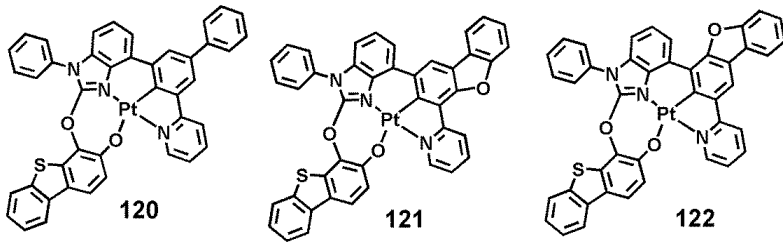
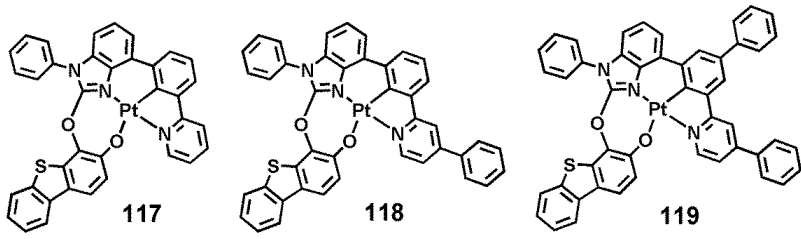
[0218]



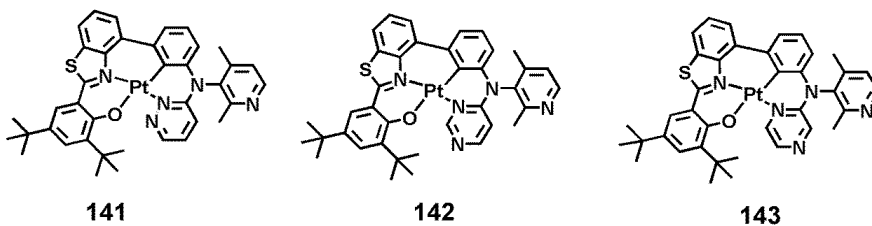
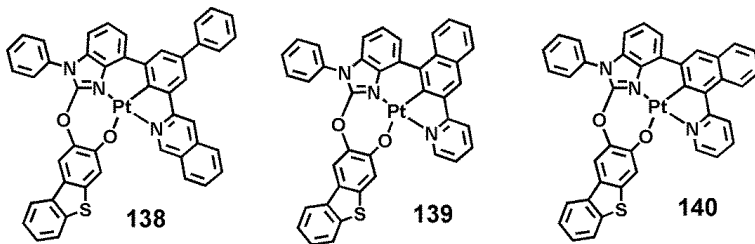
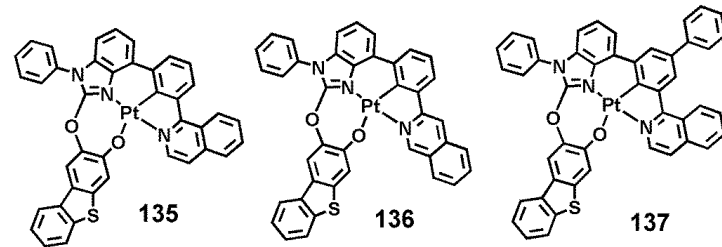
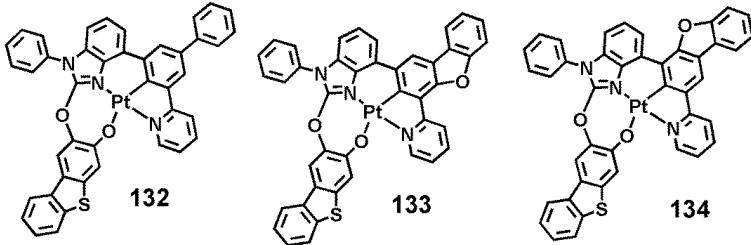
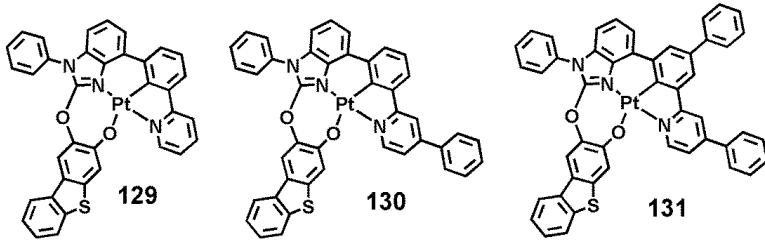
[0219]



[0220]



[0221]



[0222]

[0223]

[0224]

상기 화학식 1 중 $n_1 + n_2 + n_3$ 는 1 이상이다. 즉, 상기 화학식 1 중 $*(T_1)_{n_1}-*$, $*(T_2)_{n_2}-*$ 및 $*(T_3)_{n_3}-*$ 중 적어도 하나는 단일 결합이 아니다. 이로써, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한 필름 성막 시, 상기 유기금속 화합물 간의 스택킹(stackings)이 방지될 수 있고, 상기 화학식 1 중 단일 결합이 아닌 $*(T_1)_{n_1}-*$, $*(T_2)_{n_2}-*$ 또는 $*(T_3)_{n_3}-*$ 는 자가-퀀칭 감소 그룹(self quenching reduction group)의 역할을 할 수 있는 바, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 롤-오프(roll-off)비가 감소되고 효율이 향상될 수 있다.

[0225]

또한, 상기 화학식 1은 CY_5 로 표시되는 5원환을 반드시 포함하고, 상기 화학식 1 중 CY_5 , CY_2 , CY_3 및 M에 의하여 형성된 시클로메탈화 고리(cyclometallated ring)는 6원환, 7원환 또는 8원환이다(5원환이 아님). 이로써, 상기 유기금속 화합물은 ring strain이 제거되어 우수한 분자 안정성을 가질 수 있는 바, 이와 같은 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 우수한 내구성을 가질 수 있다.

[0226] 예를 들어, 상기 화합물 1 내지 11에 대한 HOMO, LUMO, 단일항(S₁) 및 삼중항(T₁) 에너지 레벨을 Gaussian 프로그램의 DFT 방법을 이용하여 (B3LYP, 6-31G(d,p) 수준에서 구조 최적화함) 평가한 결과는 하기 표 1과 같다.

표 1

화합물 No.	HOMO(eV)	LUMO(eV)	S ₁ 에너지 레벨(eV)	T ₁ 에너지 레벨(eV)
1	-5.086	-1.682	2.882	2.272
2	-4.736	-1.435	2.783	2.554
3	-4.778	-1.46	2.801	2.439
4	-4.723	-1.439	2.77	2.555
5	-4.991	-1.564	2.877	2.307
6	-4.801	-1.335	2.869	2.576
7	-4.843	-1.385	2.874	2.563
8	-5.019	-1.599	2.867	2.304
9	-4.83	-1.38	2.859	2.571
10	-4.935	-1.545	2.801	2.288
11	-4.757	-1.402	2.761	2.574

[0228] 상기 표 1로부터, 상기 화학식 1로 표시된 유기 금속 화합물은 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 도펀트로 사용하기에 적합한 전기적 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0229] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 인식할 수 있다.

[0230] 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물은 유기 발광 소자의 유기층, 예를 들면, 상기 유기층 중 발광층의 도펀트로 사용하기 적합할 수 있는 바, 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 적어도 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0231] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물을 포함한 유기층을 구비함으로써, 저구동 전압, 고효율, 고전력, 고양자 효율, 장수명 및 낮은 물-오프비와 우수한 색순도를 가질 수 있다.

[0232] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있다. 이 때, 상기 유기 금속 화합물은 도펀트의 역할을 하고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함할 수 있다(즉, 상기 화학식 1로 표시되는 유기 금속 화합물의 함량은 상기 호스트의 함량보다 작음).

[0233] 본 명세서 중 "(유기층이) 유기 금속 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 유기 금속 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 유기 금속 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0234] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 유기 금속 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 유기 금속 화합물로서, 상기 화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)할 수 있다.

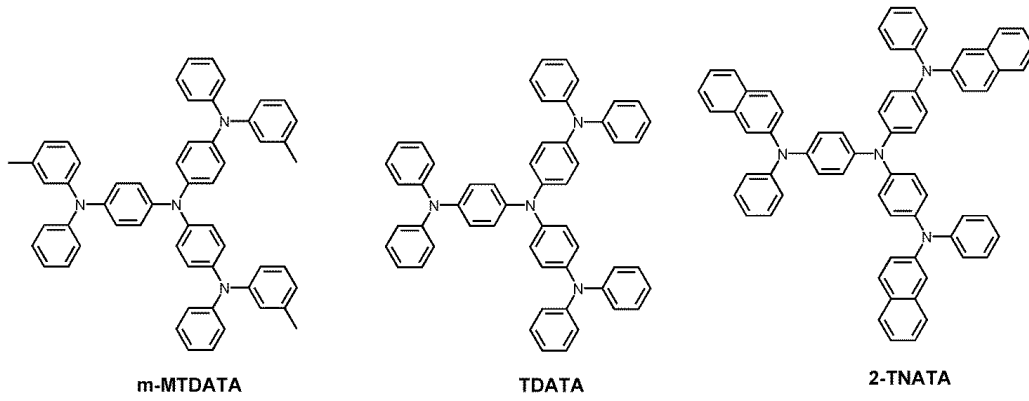
[0235] 상기 제1전극은 정공 주입 전극인 애노드이고 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드이거나, 상기 제1전극은 전자 주입 전극인 캐소드이고 상기 제2전극은 정공 주입 전극인 애노드이다.

[0236] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자 중 상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재된 전자 수송 영역을 더 포함하고, 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고, 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

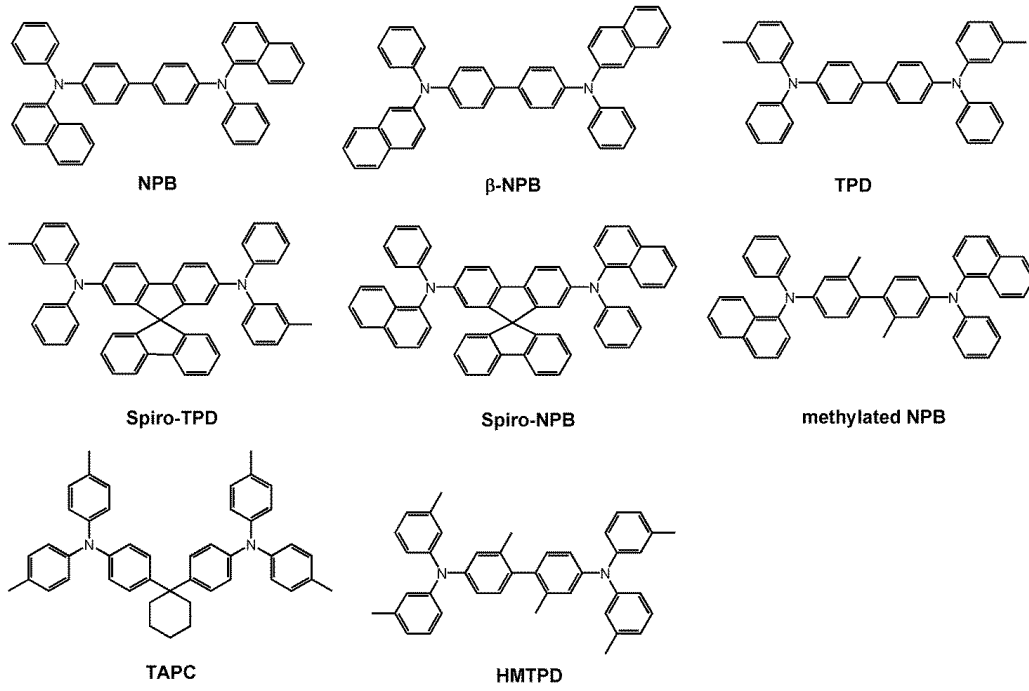
[0237] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리

키는 용어이다. 상기 "유기층"은 유기 화합물뿐만 아니라, 금속을 포함한 유기금속 착체 등도 포함할 수 있다.

- [0238] 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.
- [0239] 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.
- [0240] 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(SnO₂), 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.
- [0241] 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.
- [0242] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.
- [0243] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.
- [0244] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.
- [0245] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 버퍼층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0246] 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.
- [0247] 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(11) 상부에 진공증착법, 스프인 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0248] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500°C, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0249] 스프인 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0250] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.
- [0251] 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/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캄페롤술포산), 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:



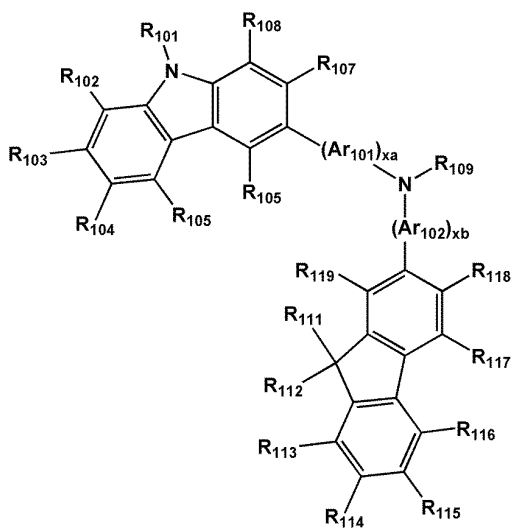
[0252]



[0253]

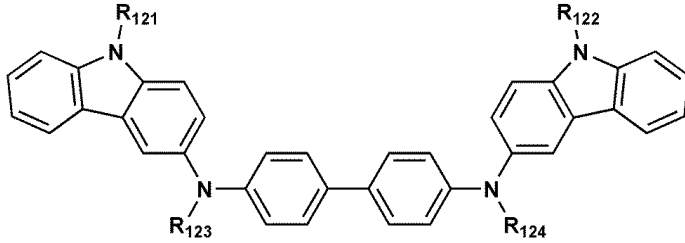
[0254]

<화학식 201>



[0255]

[0256] <화학식 202>



[0257]

[0258] 상기 화학식 201 중, Ar₁₀₁ 및 Ar₁₀₂는 서로 독립적으로,

[0259] 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기; 및

[0260] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기;

[0261] 중에서 선택될 수 있다.

[0262] 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.

[0263] 상기 화학식 201 및 202 중, 상기 R₁₀₁ 내지 R₁₀₈, R₁₁₁ 내지 R₁₁₉ 및 R₁₂₁ 내지 R₁₂₄는 서로 독립적으로,

[0264] 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, C₁-C₁₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등) 및 C₁-C₁₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등);

[0265] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 하나 이상으로 치환된, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기;

[0266] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 및

[0267] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기;

[0268] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0269] 상기 화학식 201 중, R₁₀₉는,

[0270] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기; 및

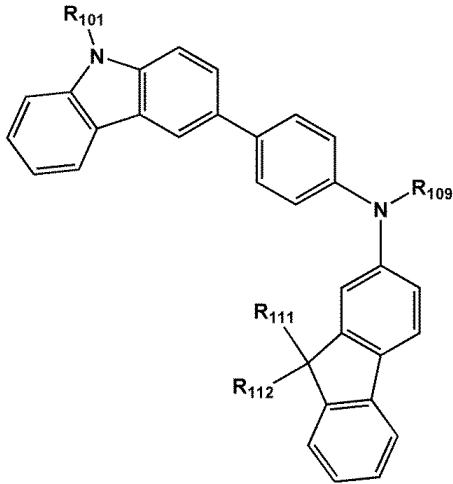
[0271] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₂₀알킬기, C₁-C₂₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및

피리디닐기;

[0272] 중에서 선택될 수 있다.

[0273] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

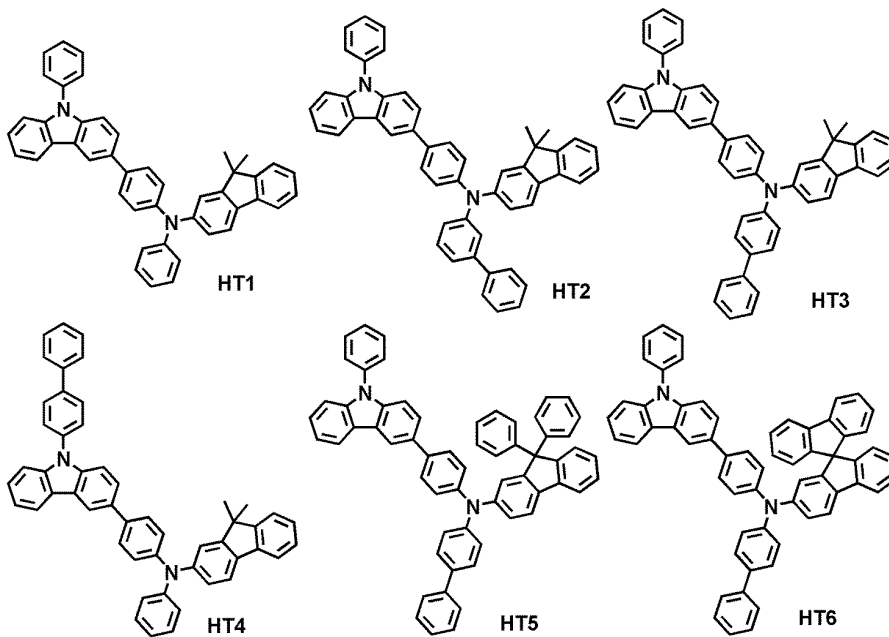
[0274] <화학식 201A>



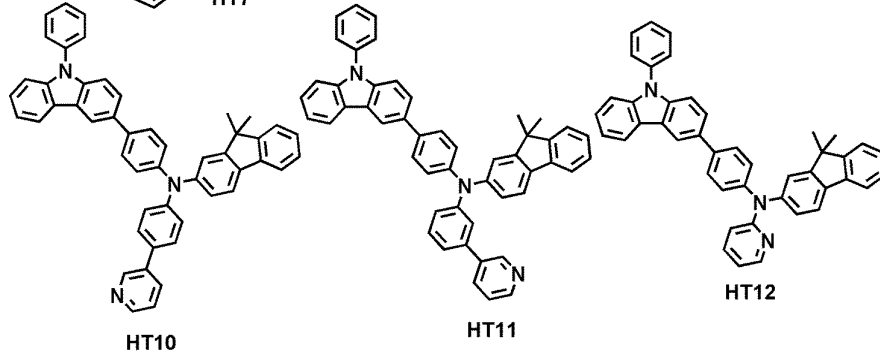
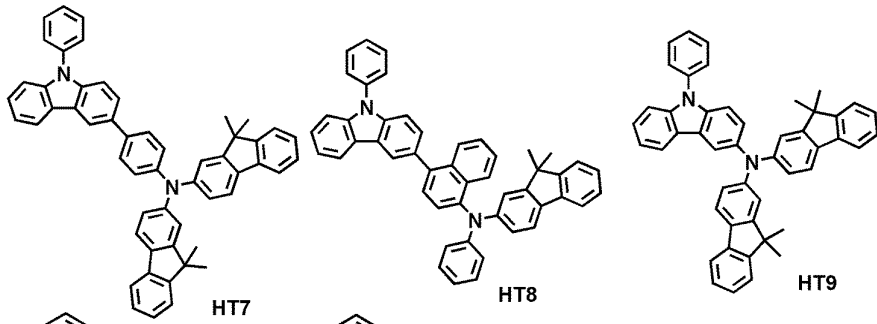
[0275]

[0276] 상기 화학식 201A 중, R₁₀₁, R₁₁₁, R₁₁₂ 및 R₁₀₉에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

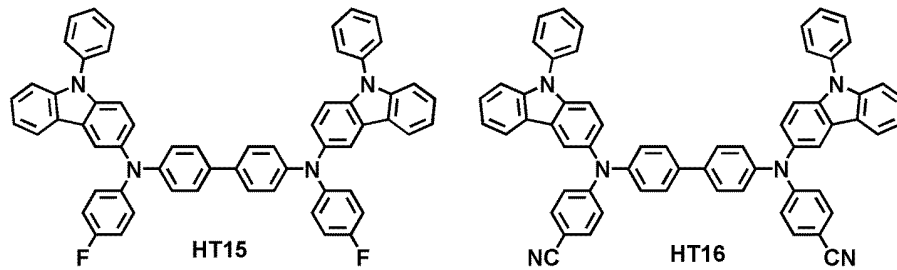
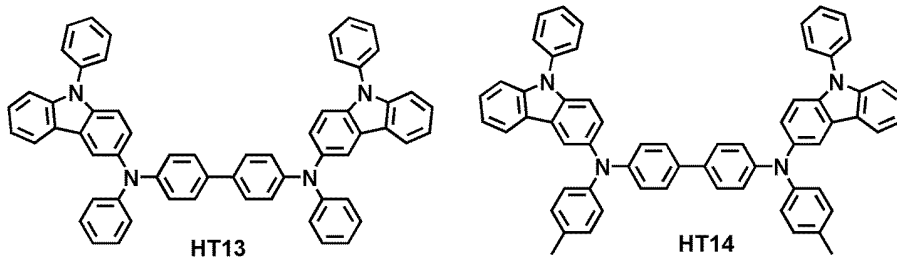
[0277] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



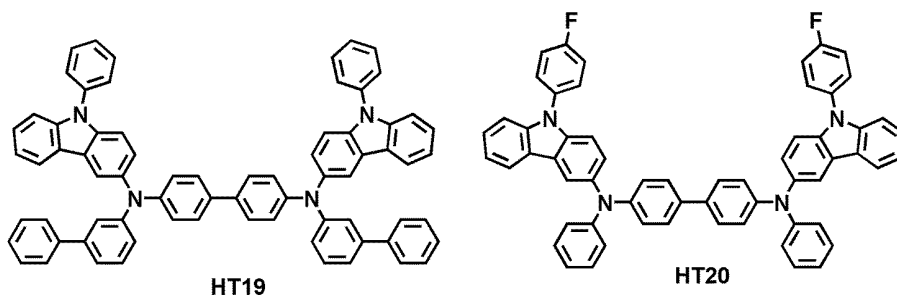
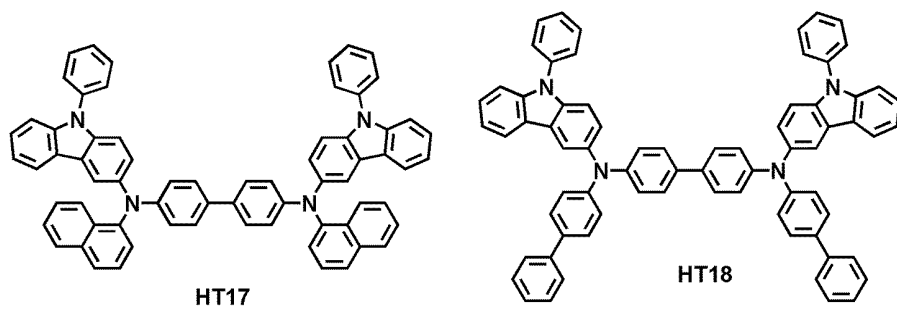
[0278]



[0279]



[0280]

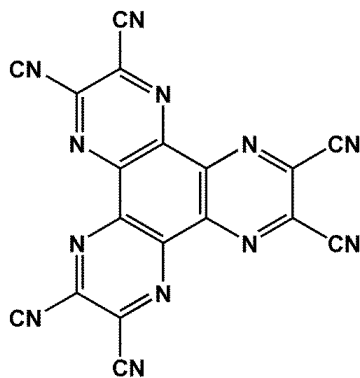


[0281]

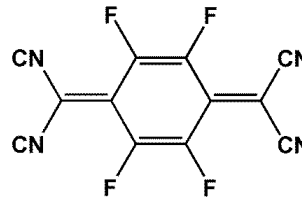
[0282] 상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 하나를 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0283] 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.

[0284] 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, 테트라시아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 HT-D1 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



HT-D1



F4-TCNQ

[0285]

상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

[0286]

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

[0287]

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 선택 될 수 있다.

[0288]

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.

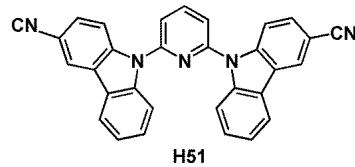
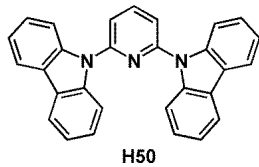
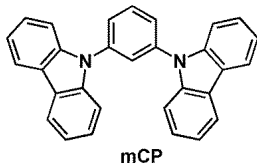
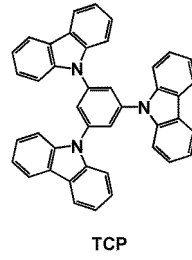
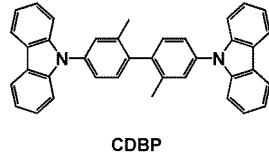
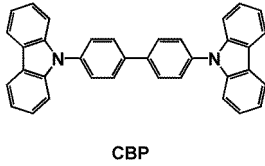
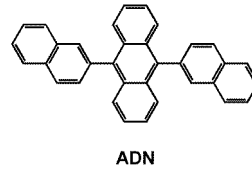
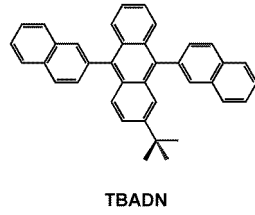
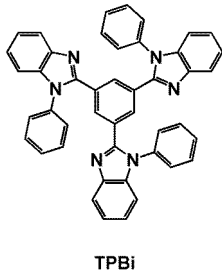
[0289]

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한다.

[0290]

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

[0291]



[0292]

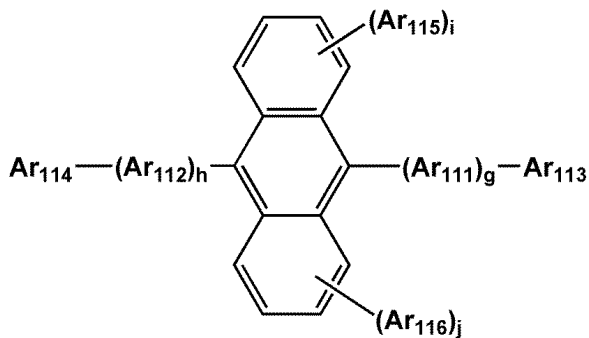
[0293]

[0294]

[0295]

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

<화학식 301>



[0296]

[0297]

[0298]

[0299]

[0300]

[0301]

[0302]

[0303]

[0304]

[0305]

[0306]

상기 화학식 301 중, Ar₁₁₁ 및 Ar₁₁₂는 서로 독립적으로,

페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 및 파이레닐렌기; 및

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

중에서 선택될 수 있다.

상기 화학식 301 중 상기 Ar₁₁₃ 내지 Ar₁₁₆은 서로 독립적으로,

C₁-C₁₀알킬기, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기 및 파이레닐기; 및

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

중에서 선택될 수 있다.

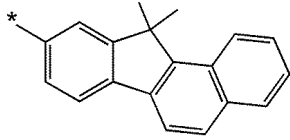
상기 화학식 301 중 g, h, i 및 j는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수, 예를 들면, 0, 1 또는 2일 수 있다.

상기 화학식 301 중, Ar₁₁₃ 내지 Ar₁₁₆은 서로 독립적으로,

[0307] 페닐기, 나프틸기 및 안트라세닐기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기;

[0308] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기;

[0309] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기; 및

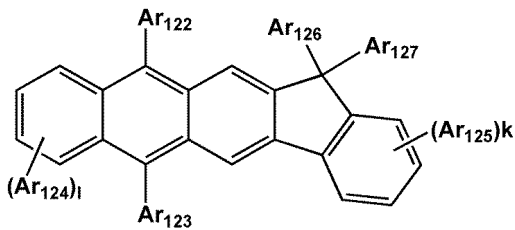


[0310] ;

[0311] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0312] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 302로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

[0313] <화학식 302>



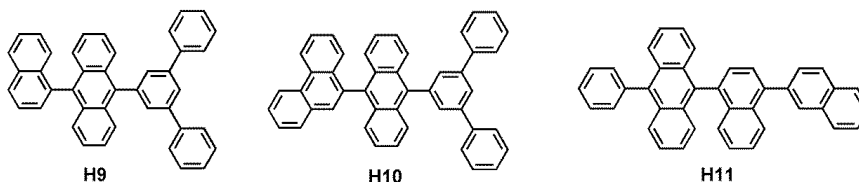
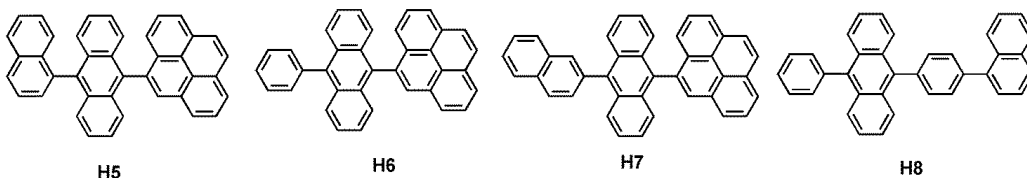
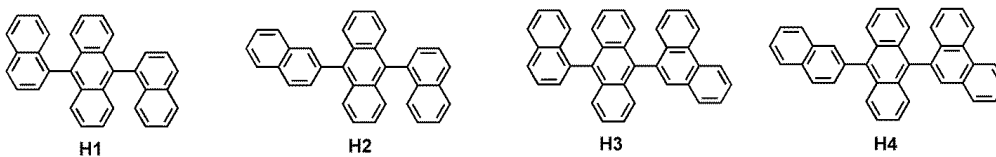
[0314]

[0315] 상기 화학식 302 중 Ar₁₂₂ 내지 Ar₁₂₅에 대한 상세한 설명은 상기 화학식 301의 Ar₁₁₃에 대한 설명을 참조한다.

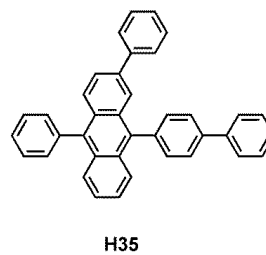
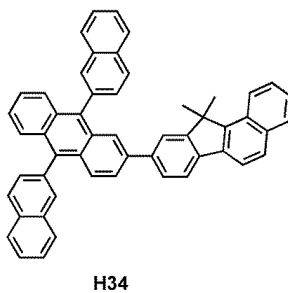
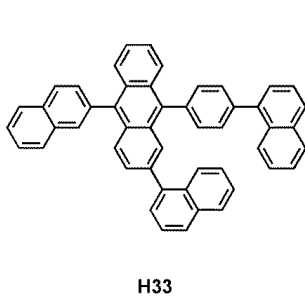
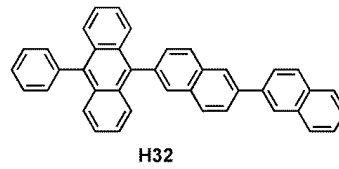
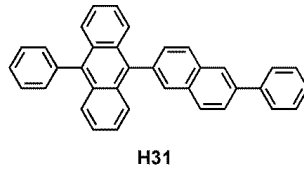
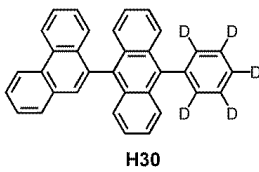
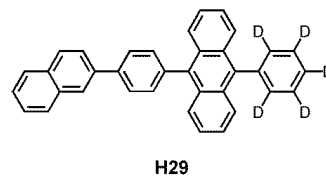
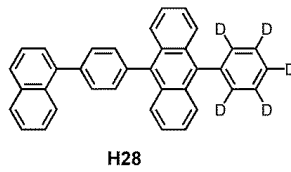
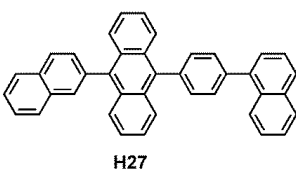
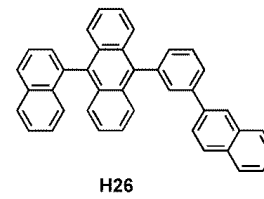
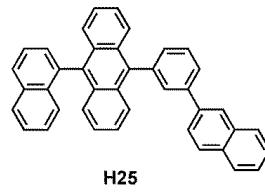
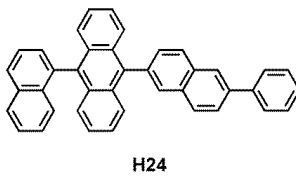
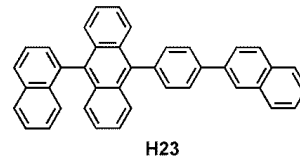
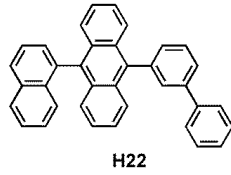
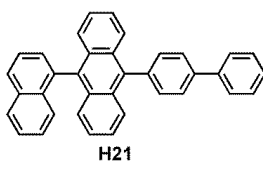
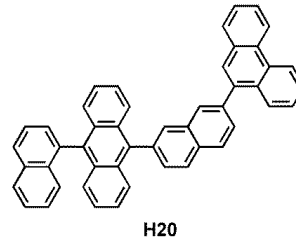
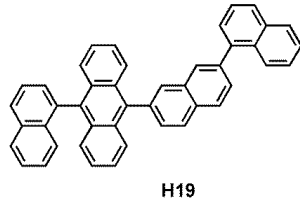
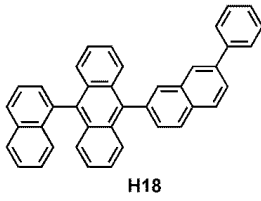
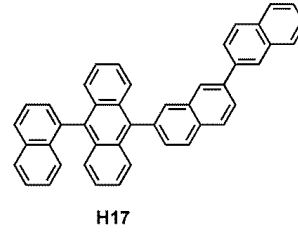
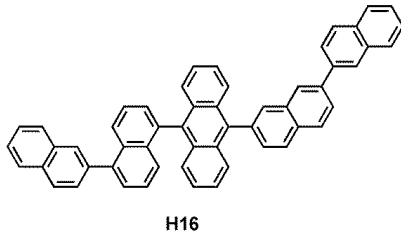
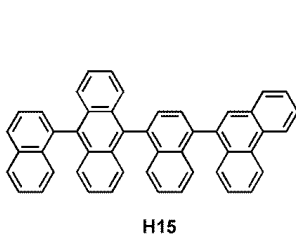
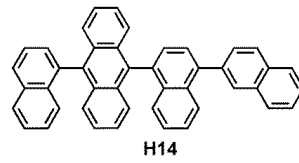
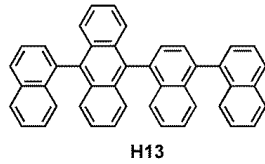
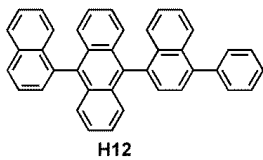
[0316] 상기 화학식 302 중 Ar₁₂₆ 및 Ar₁₂₇은 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기 또는 프로필기)일 수 있다.

[0317] 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.

[0318] 상기 화학식 301로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 302로 표시되는 화합물은 하기 화합물 H1 내지 H4를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



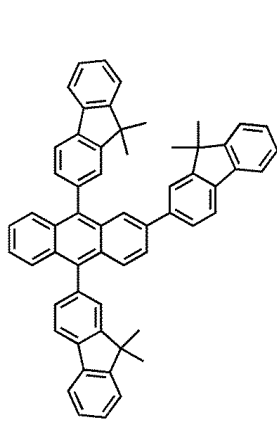
[0319]



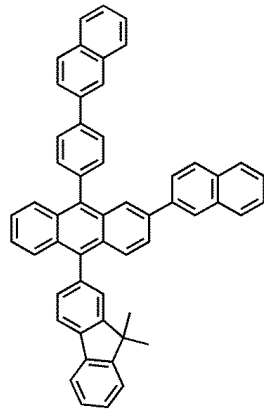
[0320]

[0321]

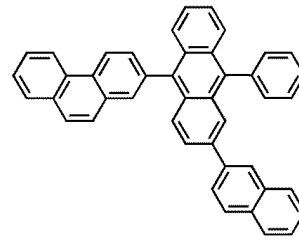
[0322]



H36

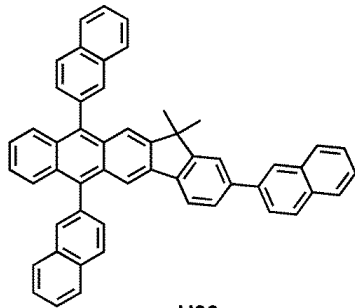


H37

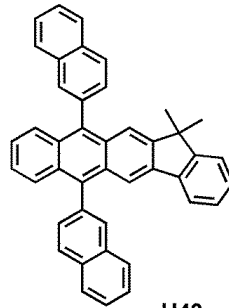


H38

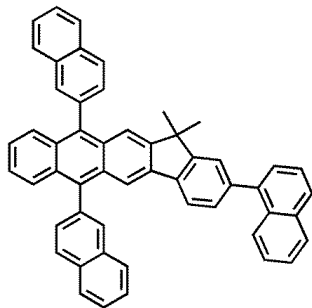
[0323]



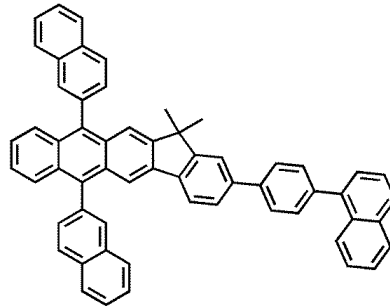
H39



H40



H41



H42

[0324]

[0325]

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

[0326]

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

[0327]

상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0328]

다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.

[0329]

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

[0330]

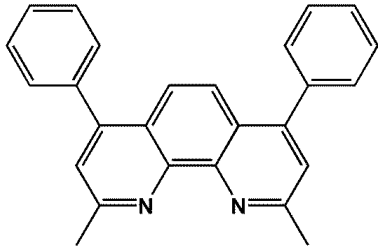
예를 들어, 전자 수송 영역은 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층 또는 전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 전자 수송층은 단일층 또는 2 이상의 서로 다른 물질을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

[0331]

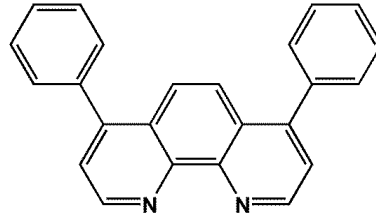
상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참

조한다.

[0332] 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.



BCP

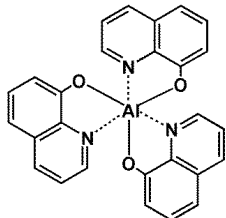


Bphen

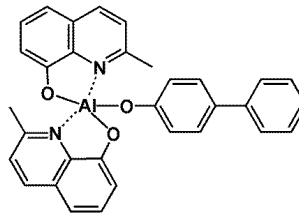
[0333]

[0334] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 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.

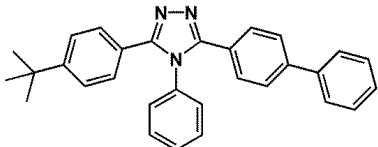
[0335] 상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen 및 하기 Alq₃, Balq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.



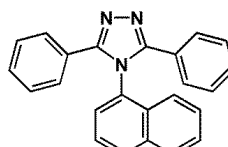
Alq₃



Balq



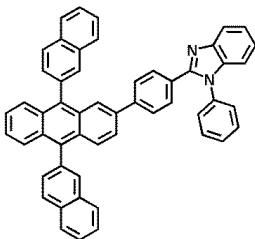
TAZ



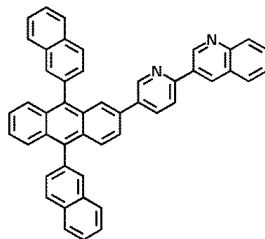
NTAZ

[0336]

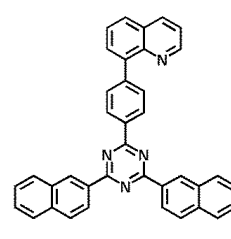
[0337] 또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 내지 ET5 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



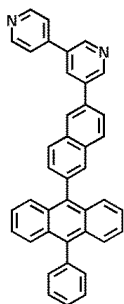
ET1



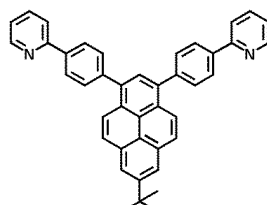
ET2



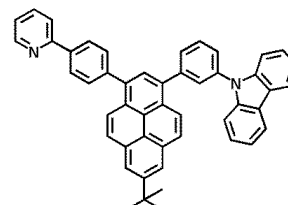
ET3



ET4

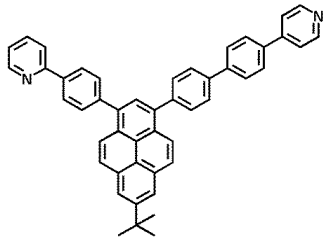


ET5

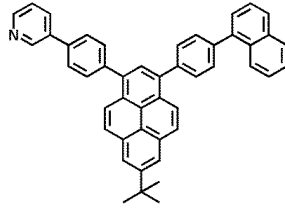


ET6

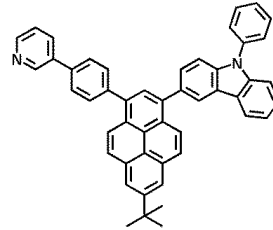
[0338]



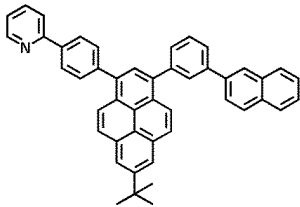
ET7



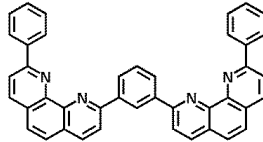
ET8



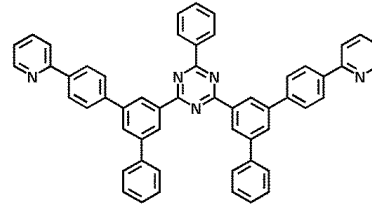
ET9



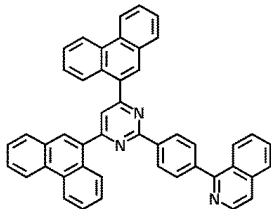
ET10



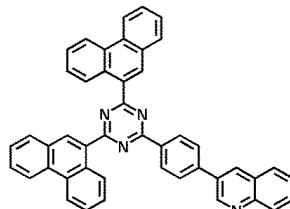
ET11



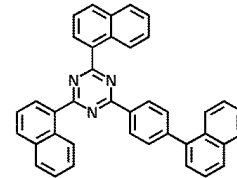
ET12



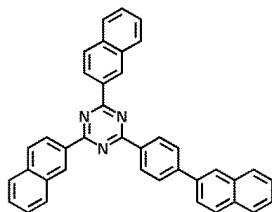
ET13



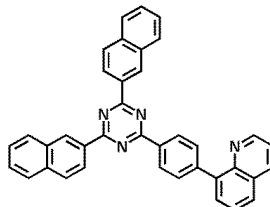
ET14



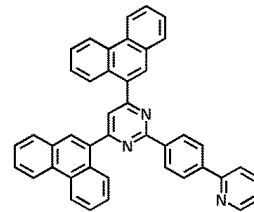
ET15



ET16



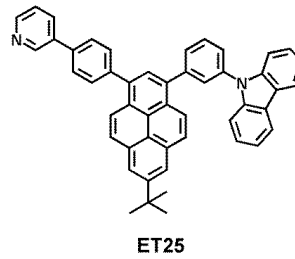
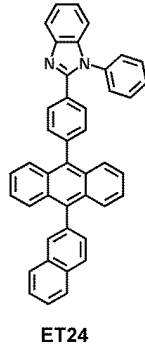
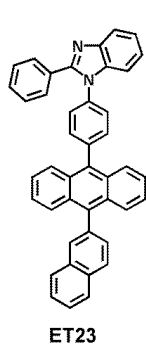
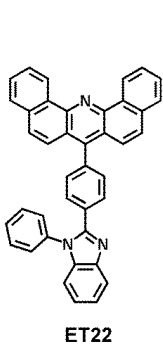
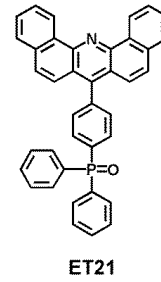
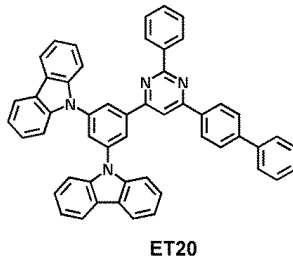
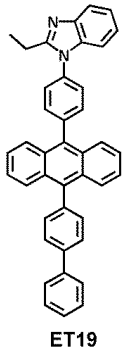
ET17



ET18

[0339]

[0340]



[0341]

[0342]

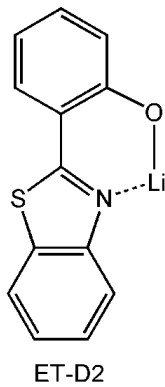
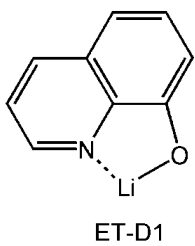
상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0343]

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

[0344]

상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(리튬 퀴놀레이트, LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다.



[0345]

[0346]

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

[0347]

상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li₂O 및 BaO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0348]

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

[0349]

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 소자

를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용하여 투과형 제2전극(19)을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

- [0350] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0351] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.
- [0352] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 고발광 효율을 제공할 수 있으므로, 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물은 높은 진단 효율을 가질 수 있다.
- [0353] 상기 진단용 조성물은, 각종 진단용 키트, 진단 시약, 바이오 센서, 바이오 마커 등에 다양하게 응용될 수 있다.
- [0354] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알킬기는 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 C₁-C₆₀알킬렌기는 상기 C₁-C₆₀알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.
- [0355] 본 명세서 중 C₁-C₆₀알콕시기는 -OA₁₀₁(여기서, A₁₀₁은 상기 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.
- [0356] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알케닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0357] 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐기는 상기 C₂-C₆₀알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세서 중 C₂-C₆₀알키닐렌기는 상기 C₂-C₆₀알키닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0358] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알킬렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0359] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기는 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 테트라히드로푸라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0360] 본 명세서 중 C₃-C₁₀시클로알케닐기는 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 C₃-C₁₀시클로알케닐렌기는 상기 C₃-C₁₀시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0361] 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-디히드로푸라닐기, 2,3-디히드로티오펜기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0362] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C₆-C₆₀아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기,

파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C₆-C₆₀아릴기 및 C₆-C₆₀아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0363] 본 명세서 중 C₁-C₆₀헤테로아릴기는 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, C₁-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, P 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C₁-C₆₀헤테로아릴기 및 C₁-C₆₀헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.

[0364] 본 명세서 중 C₆-C₆₀아릴옥시기는 -OA₁₀₂(여기서, A₁₀₂는 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 C₆-C₆₀아릴티오기(arylthio)는 -SA₁₀₃(여기서, A₁₀₃은 상기 C₆-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.

[0365] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 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.

[0366] 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)을 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.

[0367] 본 명세서 중 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 5 내지 30개의 탄소만을 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.

[0368] 본 명세서 중 C₁-C₃₀헤테로시클릭 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 C₁-C₃₀헤테로시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.

[0369] 상기 치환된 C₅-C₃₀카보시클릭 그룹, 치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알케닐기, 치환된 C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴티오기, 치환된 C₁-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기 중 적어도 하나는,

[0370] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0371] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₁₁)(Q₁₂), -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅), -B(Q₁₆)(Q₁₇) 및 -P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기;

[0372] C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로 축합다환 그룹;

[0373] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD₃, -CD₂H, -CDH₂, -CF₃, -CF₂H, -CFH₂, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q₂₁)(Q₂₂), -Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅), -B(Q₂₆)(Q₂₇) 및 -P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹; 및

[0374] -N(Q₃₁)(Q₃₂), -Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅), -B(Q₃₆)(Q₃₇) 및 -P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉);

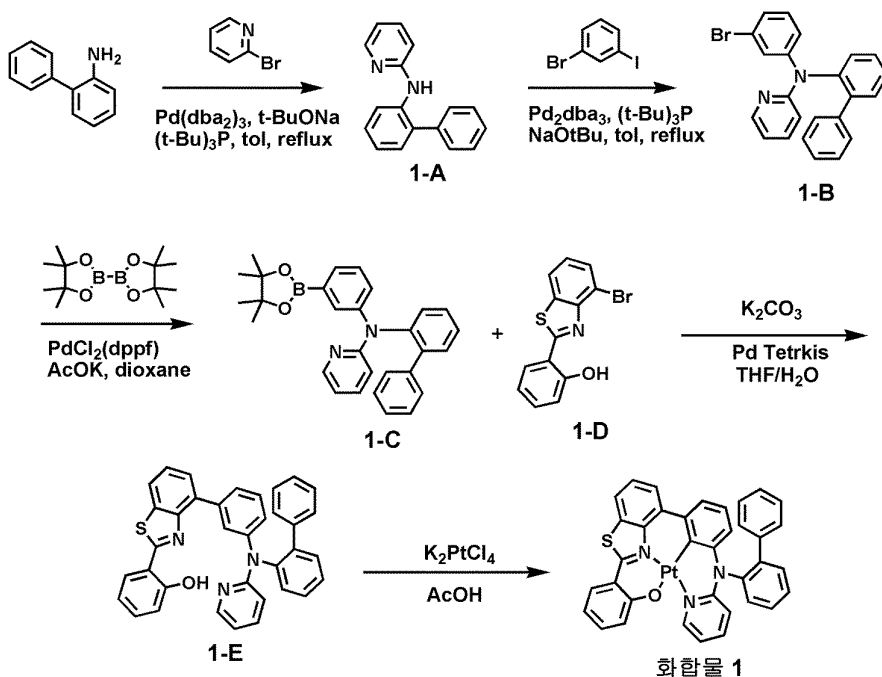
[0375] 중에서 선택되고,

[0376] 상기 Q₁ 내지 Q₉, Q₁₁ 내지 Q₁₉, Q₂₁ 내지 Q₂₉ 및 Q₃₁ 내지 Q₃₉는 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, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₁-C₁₀헤테로시클로알킬기, C₃-C₁₀시클로알케닐기, C₁-C₁₀헤테로시클로알케닐기, C₆-C₆₀아릴기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₆-C₆₀아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴티오기, C₁-C₆₀헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중에서 선택된다.

[0377] 이하, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 하기 합성에 중 "A' 대신 'B'를 사용하였다"란 표현 중 'B'의 사용량과 'A'의 사용량은 몰당량 기준으로 동일하다.

[0378] [실시예]

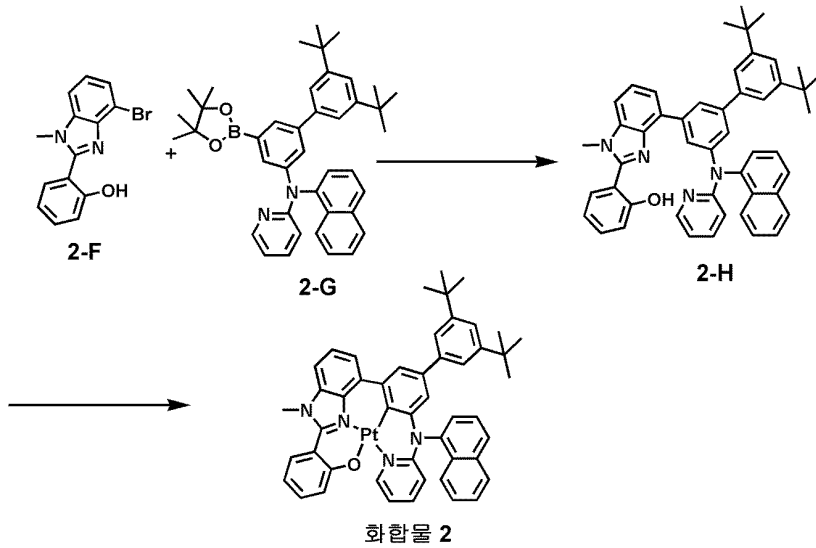
[0379] **합성에 1 : 화합물 1의 합성**



[0380]

- [0381] 중간체 1-A (N-([1,1'-biphenyl]-2-yl)pyridin-2-amine)의 합성
- [0382] [1,1'-비페닐]2-아민 ([1,1'-biphenyl]-2-amine) 84g(496mmol) 및 2-브로모피리딘 (2-bromopyridine) 85g(496mmol, 1.0 equiv.)을 플라스크에 넣고 소듐 터트-부톡사이드 (Sodium tert-butoxide) 143g(1.5mol, 3equiv.), Pd₂(dba)₃ 23g(0.05 equiv.) 및 (t-Bu)₃P (Tri-t-butyl phosphine) 5g(0.08 equiv.)을 첨가한 후, 톨루엔(Toluene)(800mL)를 넣고 100℃에서 밤새 환류하였다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 실온까지 냉각시킨 후 침전물을 여과하고 수득한 여액을 EA (에틸아세테이트) / H₂O로 세정하고 컬럼 크로마토그래피를 수행하여 중간체 1-A 37g(수율 31%)을 수득하였다. Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.
- [0383] HRMS(MALDI) calcd for C₁₇H₁₄N₂ : m/z 246.1157, Found:246.1154
- [0384] 중간체 1-B N-([1,1'-biphenyl]-2-yl)-N-(3-bromophenyl)pyridin-2-amine의 합성
- [0385] 중간체 1-A 37g(150mmol)과 1-브로모-3-아이오도벤젠 (1-bromo-3-iodobenzene) 42g(150mmol, 1equiv.)을 플라스크에 넣고 Sodium tert-butoxide 43g(450mmol, 3equiv.), Pd₂(dba)₃ 6.8g(0.05 equiv.) 및 Tri-t-butyl phosphine 1.5g(0.08 equiv.)을 첨가한 후 Toluene(500mL)를 넣고 100℃에서 밤새 환류하였다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 실온까지 냉각시킨 후 침전물을 여과하고 수득한 여액을 EA / H₂O로 세정하고 컬럼 크로마토그래피를 수행하여 중간체 1-B 36g(수율 60%)을 수득하였다. Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.
- [0386] HRMS(MALDI) calcd for C₂₃H₁₇BrN₂ : m/z 400.0575, Found:400.0577
- [0387] 중간체 1-C N-([1,1'-biphenyl]-2-yl)-N-(3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)pyridin-2-amine의 합성
- [0388] 중간체 1-B 36g(90mmol) 및 비스피나콜레이트 디보론 (Bispinacolato diboron) 34g(135mmol, 1.5 equiv.)을 플라스크에 넣고 포타슘 아세테이트 (potassium acetate) 18g(179mmol, 2equiv.) 및 PdCl₂(dppf) 3.6g(4mmol, 0.05 equiv.)을 첨가한 후 Toluene(200mL)를 넣고 100℃에서 밤새 환류하였다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 실온까지 냉각시킨 후 침전물을 여과하고 수득한 여액을 EA / H₂O로 세정하고 컬럼 크로마토그래피를 수행하여 중간체 1-C 24g(수율 60%)을 수득하였다. Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.
- [0389] HRMS(MALDI) calcd for C₂₉H₂₉BN₂O₂: m/z 448.2322, Found: 448.2321
- [0390] 중간체 1-E 2-(4-(3-([1,1'-biphenyl]-2-yl(pyridin-2-yl)amino)phenyl)benzo[d]thiazol-2-yl)phenol의 합성
- [0391] 중간체 1-C 2.4g, 중간체 1-D (2-(4-bromobenzo[d]thiazol-2-yl)phenol) 1.5g(0.005mol, 1equiv.), Tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) 0.4g(0.001mol, 0.07equiv.) 및 Potassium carbonate 2g(0.015mol, 3 equiv.)을 테트라 하이드로 퓨란(THF)과 증류수(H₂O)를 3:1 비율로 섞은 용매 40mL과 혼합하고 12시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 실온까지 냉각시킨 후 침전물을 여과하고 수득한 여액을 EA / H₂O로 세정하고 컬럼 크로마토그래피(용리액 : EA / Hex (헥산) 20%~35%)를 수행하여 중간체 1-E 2.0g(수율 78%)을 수득하였다. Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.
- [0392] HRMS(MALDI) calcd for C₃₆H₂₅N₃OS: m/z 547.1718, Found: 547.1716
- [0393] 화합물 1의 합성
- [0394] 중간체 1-E 2g(3.6mmol)와 K₂PtCl₄ 1.5g(3.6mmol, 1.0 equiv.)을 AcOH 50mL와 H₂O 5mL를 혼합한 용매(55mL)와 혼합하고 16시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 실온까지 냉각시킨 후 침전물을 여과하고, 침전물을 다시 MC(메틸렌 클로라이드)에 녹여 H₂O로 세정하고 컬럼 크로마토 그래피 (MC 35%, Hex 65%)를 수행하여 화합물 1 0.8g(순도 99% 이상)을 수득하였다. Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.
- [0395] HRMS(MALDI) calcd for C₃₆H₂₅N₃OPtS: m/z 740.1210, Found:740.1212

[0396] **합성예 2 : 화합물2의 합성**



[0397]

[0398] **중간체 2-H (N-([1,1'-biphenyl]-2-yl)pyridin-2-amine)의 합성**

[0399] 중간체 2-F (2-(4-bromo-1-methyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenol) 1.5g (0.005mol), 중간체 2-G (2-(3',5'-di-tert-butyl-5-(naphthalen-1-yl(pyridin-2-yl)amino)-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,5,5-trimethyl-1,3,2-dioxaborolan-4-yl)methylum) 3.6g(0.006mol, 1.2equiv.), Tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) 0.4g(0.001mol, 0.07equiv.) 및 Potassium carbonate 2g (0.015mol, 3 equiv.)을 테트라 하이드로 퓨란(THF)과 증류수(H₂O)를 3:1 비율로 혼합한 용매 40mL과 혼합한 다음 12시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 실온까지 냉각 시킨 후 침전물을 여과하고 수득한 여액을 EA / H₂O로 세정하고 컬럼 크로마토그래피 (용리액 : EA / Hex 20%~35%)를 수행하여 중간체 2-H 2.4g(수율 70%)을 수득하였다. Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0400] HRMS(MALDI) calcd for C₄₉H₄₆N₄O: m/z 706.3672, Found: 706.3670

[0401] **화합물 2의 합성**

[0402] 중간체 2-H 2.4g(3.6mmol)와 K₂PtCl₄ 1.4g(3.4mmol, 1.0 equiv.)을 AcOH 50mL와 H₂O 5mL를 혼합한 용매 (55mL)과 혼합한 다음 16시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 결과물의 온도를 실온까지 냉각 시킨 후 침전물을 여과하고, 침전물을 다시 MC에 녹여 H₂O로 세정하고 컬럼 크로마토 그래피 (MC 35%, Hex 65%)를 수행하여 화합물 2 0.8g(순도 99% 이상)을 수득하였다. Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0403] HRMS(MALDI) calcd for C₄₉H₄₄N₄OPt: m/z 899.3163, Found:899.3165

[0404] **평가예 1: 발광 양자 효율(PLQY)의 평가**

[0405] PMMA의 CH₂Cl₂ 용액과 8wt%의 CBP와 화합물 1의 혼합물(화합물 1의 함량은 상기 혼합물 100중량부당 10중량부임)을 혼합한 후, 이로부터 수득한 결과물을 스핀 코터를 이용하여 석영 기판 상에 코팅한 다음, 80℃의 오븐에서 열처리한 후, 실온으로 냉각시켜 필름 1을 제조하였다.

[0406] 상기 필름 1의 양자 발광 효율(Luminescence quantum yields in film)을 제논 광원(xenon light source), 모노크로메터(monochromator), 포토닉 멀티채널 분석기(photonic multichannel analyzer), 및 적분구(integrating sphere)가 장착되어 있고, PLQY measurement software (Hamamatsu Photonics, Ltd., Shizuoka, Japan)를 채용한, Hamamatsu Photonics absolute PL quantum yield measurement system을 이용하여 평가한 결과, 상기 화합물 1의 PLQY in film은 0.998임을 확인하였다. 이로부터, 상기 화합물 1은 높은 PLQY in film 값을 가짐을 확인할 수 있다.

[0407] **실시예 1**

[0408] ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초

음과 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하였다.

[0409] 이어서, 상기 유리 기판 상의 ITO 전극(애노드) 상에 m-MTDATA를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 α-NPD를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 250Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0410] 상기 정공 수송층 상에 화합물 1(도펀트) 및 CBP(호스트)를 각각 증착 속도 0.1Å/sec와 1Å/sec로 공증착하여 400Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0411] 상기 발광층 상에 BA1q를 증착 속도 1Å/sec로 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상에 Alq₃를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성한 다음, 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 후, 상기 전자 주입층 상에 Al를 진공 증착하여 1200Å 두께의 제2전극(캐소드)을 형성함으로써, ITO / m-MTDATA (600Å) / α-NPD (250Å) / CBP + 화합물 1(10%) (400Å) / BA1q(50Å) / Alq₃(300Å) / LiF(10Å) / Al(1200Å) 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0412] **실시예 2 및 비교예 A 및 B**

[0413] 발광층 형성시 도펀트로서 화합물 1 대신 표 2에 기재된 화합물을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0414] **평가예 2: 유기 발광 소자의 특성 평가**

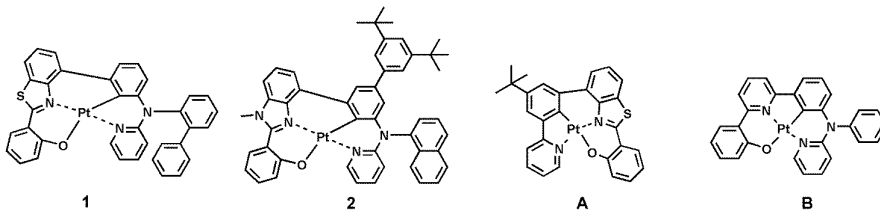
[0415] 상기 실시예 1 및 2와 비교예 A 및 B에서 제조된 각각의 유기 발광 소자에 대하여 구동 전압, 발광 효율 및 발광 양자 효율을 평가하여 그 결과를 표 2에 나타내었다. 평가 장치로서 전류-전압계(Keithley 2400) 및 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 사용하였다.

표 2

[0416]

	도펀트	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	발광 양자 효율 (%)
실시예 1	화합물 1	4.38	69.4	20.2
실시예 2	화합물 2	4.37	67.7	19.5
비교예 A	화합물 A	4.57	49.2	18.7
비교예 B	화합물 B	4.0	60.2	15.3

[0417]



[0418] 상기 표 2로부터, 실시예 1 및 2의 유기 발광 소자는 비교예 A 및 B의 유기 발광 소자에 비하여 우수하거나 동등한 수준의 구동 전압, 발광 효율 및 발광 양자 효율을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0419]

- 10: 유기 발광 소자
- 11: 제1전극
- 15: 유기층
- 19: 제2전극

도면

도면1

