



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2011-0131201  
(43) 공개일자 2011년12월06일

(51) Int. Cl.

*C09K 11/06* (2006.01) *C07F 15/00* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)

(21) 출원번호 10-2011-7020700

(22) 출원일자(국제출원일자) 2010년02월08일  
심사청구일자 없음

(85) 번역문제출일자 2011년09월05일

(86) 국제출원번호 PCT/EP2010/051508

(87) 국제공개번호 WO 2010/089394  
국제공개일자 2010년08월12일

(30) 우선권주장

PCT/KR2009/000590 2009년02월06일 세계지적재  
산권기구(WIPO)(WO)

(71) 출원인

솔베이(소시에떼아노님)

벨기에왕국 브뤼셀스 비-1050 뒤 두 프린스 알버트 33

(72) 벌명자

나지루딘, 모하마드 카자

스위스 세아쉬-1024 에퀴블랑 쉬. 드 몽타네 - 10  
바라노프, 에티엥 다비드스위스 세아쉬-1020 랑낭 보 19 슈맹 드 리옹자  
(뒷면에 계속)

(74) 대리인

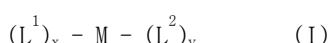
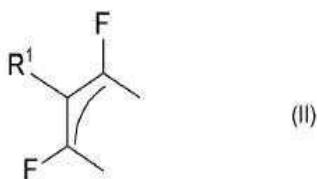
양영준, 김영

전체 청구항 수 : 총 14 항

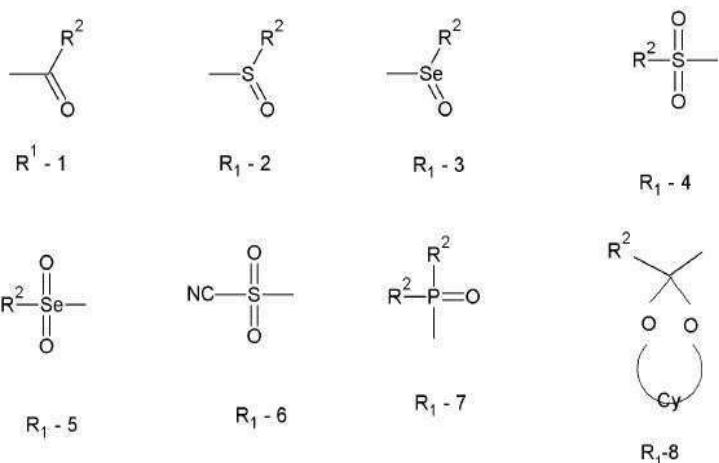
(54) O L E D용 발광층에서 호스트 도편트로 사용되는 발광 물질

### (57) 요 약

하기 화학식 I의 착물을 포함하는 발광 물질,

(식 중,  $L^1$ 은 고리 시스템에 하기의 구성 요소요소를 포함하는 1가 음이온성 두자리 탄소-배위 리간드이고,

$R^1$ 은 하기  $R_1-1$  내지  $R_1-8$ 로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임)



유기발광소자에서 발광 물질로서의 그 용도, 및 상기 발광 물질을 포함하는 유기발광소자에 관한 것이다.

(72) 발명자  
정, 일  
스위스 세아쉬-1024 에퀴블랑 아벤느 데페넥스 13

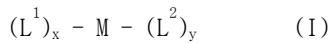
그라에첼, 미하엘  
스위스 세아쉬-1025 생 쉴피스 쉬. 드 마르키자 7  
아

---

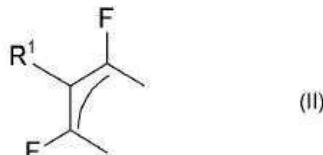
## 특허청구의 범위

### 청구항 1

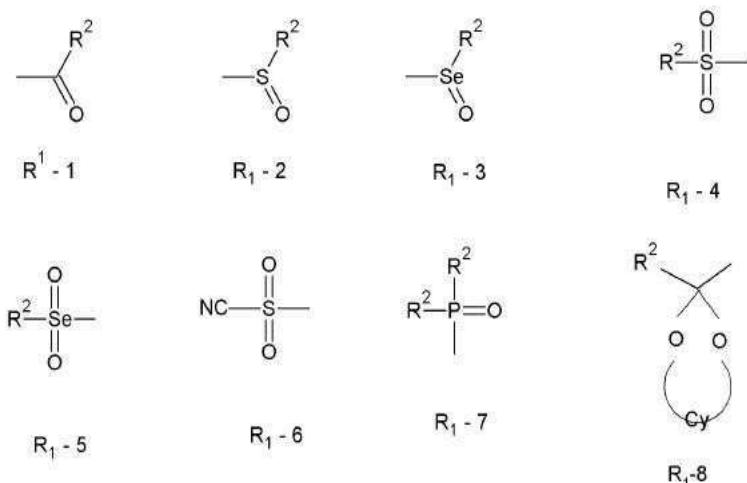
하기 화학식 I의 조물을 포함하는 발광 물질.



[식 중,  $L^1$ 은 고리 시스템에 하기의 구성 요소:



( $R^1$ 은 하기  $R_1-1$  내지  $R_1-8$ 로 이루어진 군에서 선택되는 치환기이며;



( $R^2$ 는 탄소수 1 내지 20의 치환되는 선형, 분지형 또는 사이클릭 알킬 사슬이거나, 또는 탄소수 1 내지 20의 임의 치환되는 알콕시기이고;

Cy는, 탄소수 1 내지 20의 임의 치환되는 선형, 분지형 또는 사이클릭 알킬 또는 알콕시 사슬로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 일부 또는 전체가 치환될 수 있는, 4- 내지 7-원 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 고리를 나타냄)를 포함하는 1가 음이온성 두자리 탄소-배위 리간드이고,

$L^2$ 는 비-1가 음이온성, 비-두자리 또는 비-탄소 배위 리간드이고,

M은 원자번호가 40 이상인 전이금속을 나타내고, x는 1 내지 3의 정수이며, y는 0, 1 또는 2임]

### 청구항 2

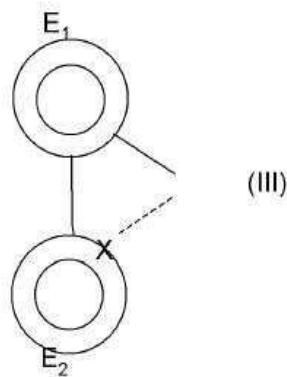
제1항에 있어서, 전이금속이 Re, Os, Ir, Pt, Au, Ru, Rh, Pd 및 Cu로 이루어진 군에서 선택되는 것인 발광 물질.

### 청구항 3

제1항에 있어서, 전이금속이 Ir 또는 Pt인 발광 물질.

### 청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,  $L^1$ 은 하기 화학식 III을 갖는 것인 발광 물질.



(식 중:

$E_1$ 은 5- 또는 6-원 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 고리, 바람직하게는 추가 방향족 부분 또는 비방향족 사이클과 임의 축합되는 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 형성하는데 필요한 비금속성 원자 군을 나타내며, 상기 고리는 임의로 1개 이상의 치환기를 가지고,  $E_2$ 를 포함하는 고리와 함께 임의로 축합 구조를 형성하며, 상기 고리  $E_1$ 은  $sp^2$  혼성 탄소를 통해 금속 M에 배위되고, 상기 고리  $E_1$ 은 상기 정의된 바와 같은 구성 요소(II)를 포함하며;

$E_2$ 는 5- 또는 6-원 헤테로사이클릭 고리, 바람직하게는 추가 방향족 부분 또는 비방향족 사이클과 임의 축합되는 헤테로방향족 고리를 형성하는데 필요한 비금속성 원자 군을 나타내며, 상기 고리는 임의로 1개 이상의 치환기를 가지고,  $E_1$ 을 포함하는 고리와 함께 임의로 축합 구조를 형성하며, 상기 고리  $E_2$ 는  $sp^2$  혼성 질소를 통해 금속 M에 배위되고;

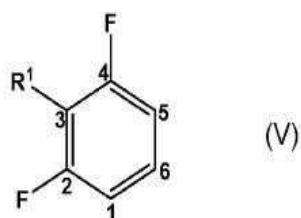
X는 주기율표의 IVa, Va 또는 VIa족 중에서 선택되는 배위 원자를 나타냄)

### 청구항 5

제4항에 있어서, X는 C, N, O, S, Se, Te 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 것인 발광 물질.

### 청구항 6

제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서,  $E_1$ 은 하기 화학식 V의 2,4-디플루오로치환된 페닐 고리이며, 중금속 원자로의 결합 및  $E_2$ 로의 결합은 이웃한 탄소 원자를 통해서 이루어지는 것인 발광 물질.



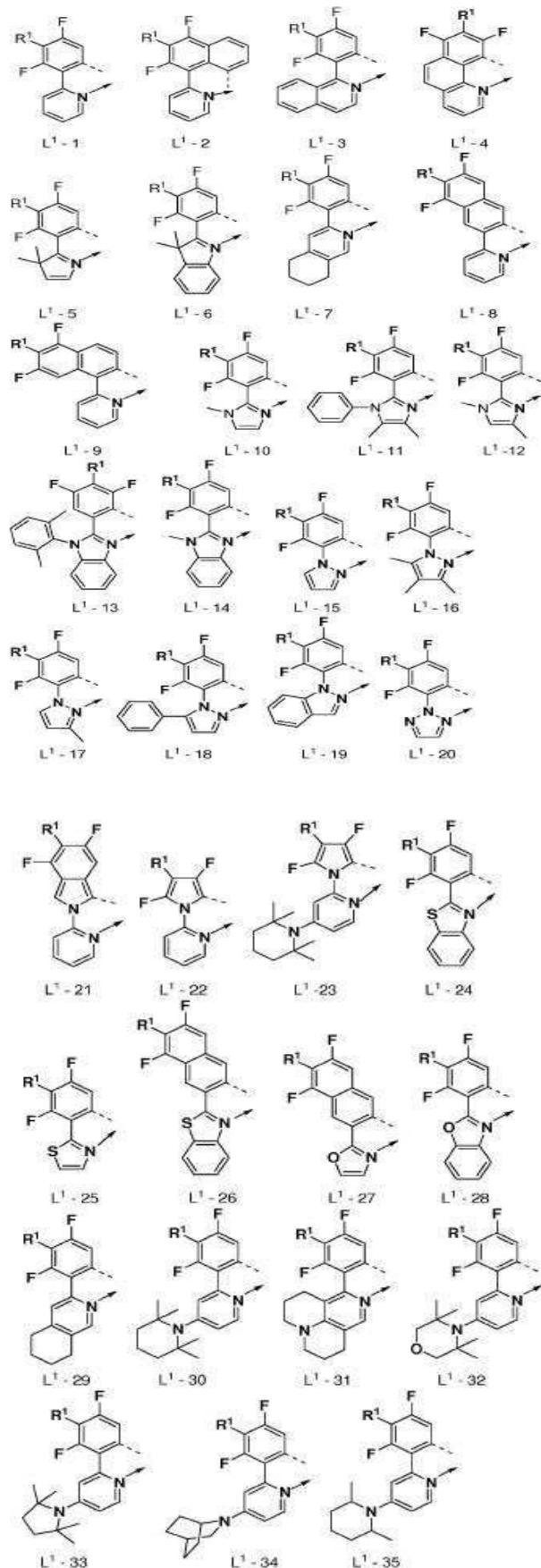
### 청구항 7

제6항에 있어서,  $E_2$ 는 탄소 원자 2를 통해 고리  $E_1$ 에 부착되는 임의 치환된 피리딘 고리인 발광 물질.

### 청구항 8

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 리간드  $L^1$ 은 하기 화학식  $L^1-1$  내지  $L^1-35$ 로 이루어진 화합물의 군에

서 선택되는 것인 발광 물질.

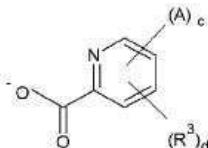
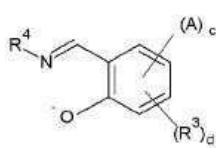
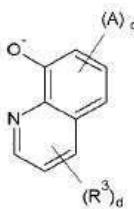
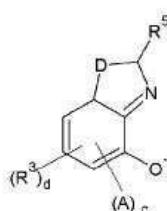
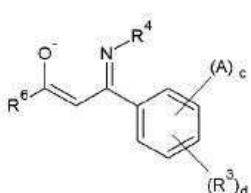
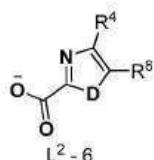
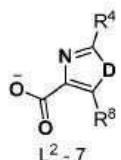


청구항 9

제6항에 있어서,  $L^1$ 은  $L^1-1$ , 및  $L^1-29$  내지  $L^1-35$ 로 이루어진 군에서 선택되는 것인 발광 물질.

### 청구항 10

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 있어서,  $L^2$ 는 하기의 화학식  $L^2-1$  내지  $L^2-7$ ,  $U-1$  내지  $U-8$ ,  $PL$ , 및  $L^2-8$  내지  $L^2-27$  중의 하나를 갖는 것인 발광 물질.

 $L^2-1$  $L^2-2$  $L^2-3$  $L^2-4$  $L^2-5$  $L^2-6$  $L^2-7$ 

(식 중:

$A$ 는  $-Cl$ ,  $-F$ ,  $-Br$ 과 같은 할로겐;  $-OR_7$ ;  $-SR_7$ ;  $-N(R_7)_2$ ;  $-P(OR_7)_2$  및  $-P(R_7)_2$  ( $R_7$ 은  $C_1-C_6$  알킬, 플루오로알킬 또는 퍼플루오로알킬 기, 예컨대  $-CH_3$ ,  $-nC_4H_9$ ,  $-iC_3H_7$ ,  $-CF_3$ ,  $-C_2F_5$ ,  $-C_3F_7$ , 또는 1개 이상의 에테르기를 갖는  $C_1-C_6$  알킬, 플루오로알킬 또는 퍼플루오로알킬, 예컨대  $-CH_2-(CH_2-O-CH_2)_n-CH_3$ ,  $-CH_2-[CH_2(CH_3)-O-CH_2]_n-CH_3$ ,  $-(CF_3O)_n-C_2F_5$  ( $n$ 은 1 내지 8의 정수임)임)로 이루어진 군에서 선택되는 치환기이며, 바람직하게  $A$ 는  $-OR_7$  및  $-N(R_7)_2$  ( $R_7$ 은 위의 의미를 가짐) 중에서 선택되고;

$D$ 는  $-CHR^{8-}$ ,  $-CR^{8-}R^{8-}$ ,  $-CR^{8-}CH^{8-}$ ,  $-CR^{8-}CR^{8-}$ ,  $N-H$ ,  $N-R^9$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $Se$ 로 이루어진 군에서 선택되는 기이고;

$R^3$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 서로 동일하거나 상이하며, 각 경우에  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $NO_2$ ,  $CN$ , 탄소수 1 내지 20의 직쇄 또는 분지형 또는 사이클릭 알킬 또는 알콕시 기를 나타내며, 이들 각각에서 1개 이상의 비이웃한  $-CH_2-$ 기는  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NR^9-$  또는  $-CONR^{10-}$ -에 의해 교체될 수 있으며, 이들 각각에서 1개 이상의 수소 원자는  $F$ 에 의해 교체될 수 있거나; 또는 1개 이상의 비방향족 라디칼  $-R'$ 에 의해 치환될 수 있는 탄소수 4 내지 14의 아릴 또는 헤테로아릴 기에 의해 교체될 수 있고, 동일한 고리 또는 2개의 상이한 고리 상에 있는 복수의 치환기  $R'$ 는 함께, 임의적으로 방향족인, 추가의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 고리 시스템을 결과적으로 형성할 수 있으며;

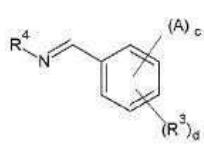
$R^4$ ,  $R^8$ ,  $R^9$  및  $R^{10}$ 은 서로 동일하거나 상이하며, 각 경우에  $H$ 이거나 또는 탄소수 1 내지 20의 임의 치환되는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼이고;

$c$ 는 1 내지 3의 정수이고;

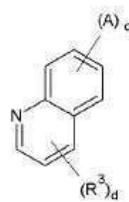
d는 0 내지 4의 정수임), 또는



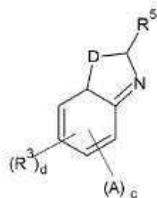
U - 1



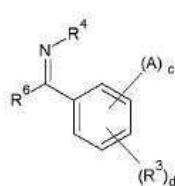
U - 2



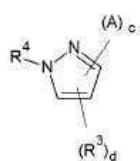
U - 3



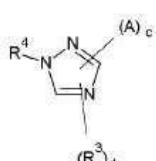
U - 4



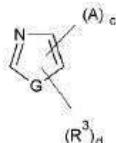
U - 5



U - 6



U - 7



U - 8

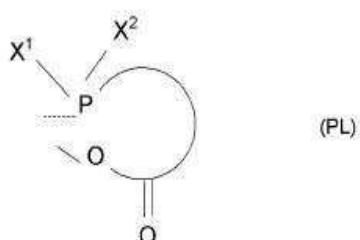
(식 중, A, D, 및 R<sup>3</sup> 내지 R<sup>10</sup>은 리간드 L<sup>2</sup>-1 내지 L<sup>2</sup>-5와 관련해서 앞서 정의한 바와 같은 의미를 지니며;

G는 -CH=CH-, -CR<sup>8</sup>=CH-, -CR<sup>8</sup>=CR<sup>8</sup>-, N-H, N-R<sup>9</sup>- 및 CR<sup>8</sup>=N-로 이루어진 군에서 선택되는 기이고;

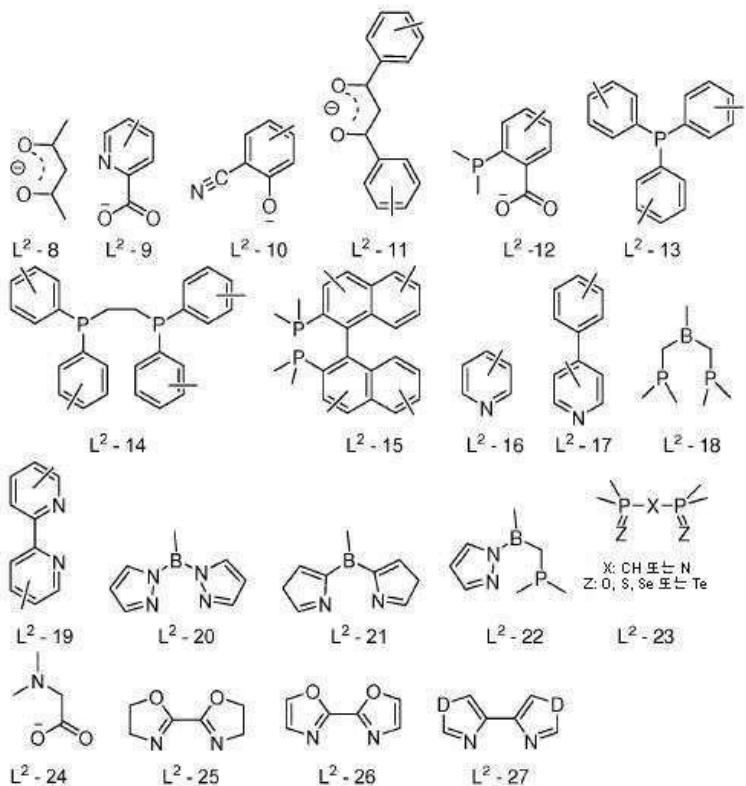
c는 0 내지 3의 정수이고;

d는 0 내지 3의 정수이며;

R<sup>8</sup> 및 R<sup>9</sup>는 앞서 정의한 바와 같은 의미를 가짐), 또는



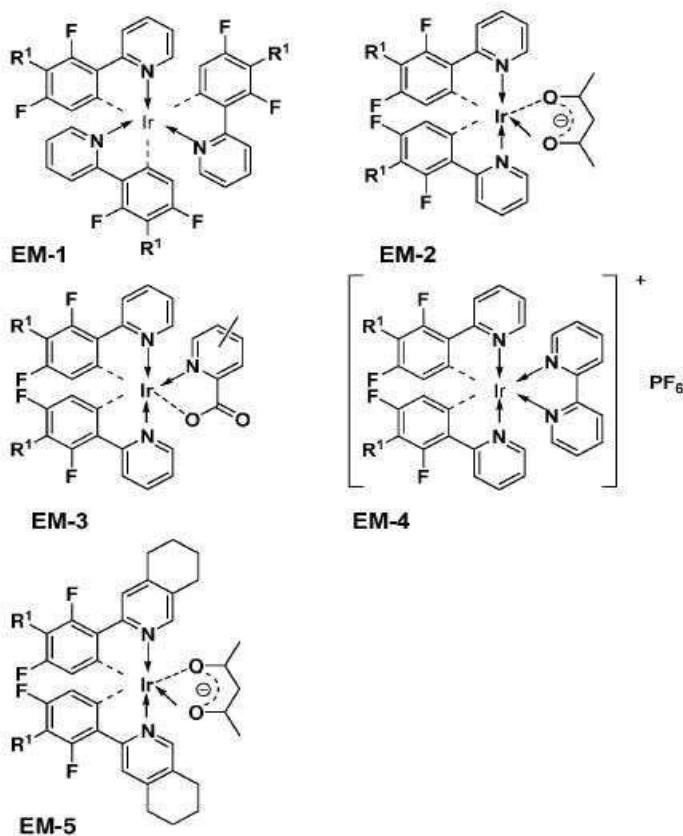
(식 중, X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup>는 동일하거나 상이하며, 1개 이상의 치환기로 임의 치환될 수 있는 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub> - 알킬, 아릴, 헤테로아릴 중에서 선택됨), 또는



(식 중, L<sup>2</sup>-8 내지 L<sup>2</sup>-27 구조에서 결합 기호로 표시된 모든 치환기는 수소, 할로겐, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub> - 알킬 또는 아릴 기 중에서 독립적으로 선택될 수 있음)

### 청구항 11

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서, 하기 화합물 EM-1 내지 EM-5로 이루어진 군에서 선택되는 발광 물질.



(식 중 EM-1 내지 EM-5 구조에서 결합 기호로 표시된 모든 치환기는 수소, 할로겐, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub> - 알킬 또는 아릴 기 중에서 독립적으로 선택될 수 있음)

### 청구항 12

유기발광소자의 발광층에 있어서 제1항 내지 제11항 중 어느 한 항에 따른 발광 물질의 용도.

### 청구항 13

유기발광소자에서 발광층으로 기능하도록, 호스트층의 도펜트로서의 제1항 내지 제11항 중 어느 한 항에 따른 발광 물질의 용도.

### 청구항 14

제1항 내지 제11항 중 어느 한 항에 따른 발광 물질을 포함하는 발광층을 포함하는 유기발광소자(OLED).

## 명세서

### 기술 분야

[0001]

본 발명은 발광 물질, 상기 물질의 용도 및 전기 에너지를 빛으로 전환할 수 있는 발광소자에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002]

다양한 용도를 위한 새로운 디스플레이 시스템 개발에서의 잠재적인 역할로 인해 최근 들어 유기발광소자(OLED)에 대한 관심이 증가되어 왔다.

[0003]

OLED는 유기 물질로부터의 전계발광(EL)에 바탕을 둔다.

[0004]

광발광(즉, 여기 상태의 방사성 잔광에 의한 광학 흡수와 완화의 결과로서 활성 물질로부터 빛이 방출됨)과는 대조적으로, 전계발광은 기관에 전기장을 인가함으로써 야기되는 비열성 빛을 발생시키는 것이다. 후자의 경우, 여기현상은 외부 회로의 존재 하에서 유기 반도체에 주입된 반대 부호의 전하 운반체들(전자 및 정공)이 재조합

됨으로써 이루어진다.

[0005] 유기발광다이오드(organic light-emitting diode: OLED)의 단순 원형, 즉, 단일층 OLED는 전형적으로 두 전극 사이에 개재되어 있는 활성 유기 물질의 박막으로 구성되며, 그 중 하나는 유기층으로부터의 빛 방출을 관찰하기 위해 반투명일 필요가 있다. 보통, 산화인듐주석(ITO)으로 코팅된 유리 기판이 애노드로 사용된다.

[0006] 이러한 두 전극에 외부전압이 인가되면, 애노드에서의 전하 운반체(즉, 정공) 및 캐소드에서의 전자는 적용되는 유기 물질에 따라 결정되는 특정 문턱전압을 넘어 유기층에 주입된다. 전기장의 존재 하에, 전하 운반체는 활성 층을 통해 이동하다가, 반대 전하로 대전된 전극에 도달하면 비방사성으로 방전된다. 그러나, 정공 및 전자가 유기층을 통해서 유동하는 동안 서로 마주치면, 여기된 단일항(비대칭) 및 삼중항(대칭) 상태(즉, 소위 여기자들)가 형성된다. 따라서, 분자 여기 상태(또는 여기자)의 잔광으로부터 유기 물질에서 빛이 발생한다. OLED 내 전기적 여기에 의해 형성되는 3개의 삼중항 여기자마다, 오직 하나의 비대칭 상태(단일항) 여기자가 생성된다.

[0007] 많은 유기물질이 단일항 여기자로부터 형광(즉, 대칭허용(symmetry-allowed) 과정을 통한 발광)을 나타내는데 이러한 과정은 동일한 대칭 상태 사이에서 발생하기 때문에 매우 효율적일 수 있다. 이와는 반대로, 여기자의 대칭이 기저 상태의 대칭과 상이한 경우에는, 여기자의 방사성 완화가 허용되지 않으며, 빌광은 느리고 비효율적일 수 있다. 기저 상태는 보통 비대칭(anti-symmetric)이기 때문에, 삼중항으로부터의 잔광은 대칭을 파괴하게 되므로 이러한 과정은 허용되지 않으며 전계발광(EL)의 효율은 매우 낮다. 따라서, 삼중항 상태에 포함되어 있던 에너지는 대부분 소진되고, 달성가능한 최대 이론적 양자효율은 단지 25%이다(양자효율은 빛을 방출시키기 위해 정공 및 전자가 재결합하는 데 있어서의 효율을 가리킴).

[0008] 대칭-불허용 과정으로부터의 발광은 인광(phosphorescence)으로 공지되어 있다. 특성상, 높은 전이 가능성으로 인해 빠른 잔광을 보이는 형광과는 달리, 인광은 낮은 전이 가능성으로 인해 여기 후에도 수 초까지 지속될 수 있다.

[0009] 인광 물질의 성공적 활용은 유기 전계발광소자에 대해 엄청난 장래성을 지닌다. 예를 들어, 인광 물질 활용의 한가지 장점은, 인광 소자에서 (부분적으로) 삼중항을 바탕으로 하는 모든 여기자들(EL에서 정공들과 전자들의 조합으로 형성됨)이 에너지 전이와 발광에 참여할 수 있다는 것이다. 이는 인광 방출 자체를 통해 달성하거나, 또는 형광과정의 효율을 개선하기 위한 인광 물질을 형광 게스트에서 인광 호스트 또는 도편트로 사용함으로써 달성할 수 있으며, 호스트의 삼중항 상태로부터의 인광은 호스트의 삼중항 상태로부터 게스트의 단일항 상태로의 에너지 전달이 가능하게 한다.

[0010] 단일항-삼중항 혼합으로 이르게 되는 스피-웨도 결합으로 인해 다수의 중금속 착물은 실온에서 삼중항으로부터의 효율적인 인광을 나타내고, 이러한 착물을 포함하는 OLED는 75%를 초과하는 내부양자수율을 가지는 것으로 밝혀졌다.

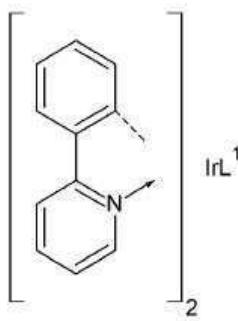
[0011] 특히, 특정 유기금속 이리듐 착물은 강한 인광을 발하며 이를 착물을 이용하여 적색 및 녹색 스펙트럼을 방출하는 효율적인 OLED를 제조하여 왔다. 발광소자의 특성을 개선하기 위한 수단으로서, 오르토-금속화된 이리듐 착물  $\text{Ir}(\text{PPy})_3(2\text{-페닐페리딘})$ 을 포함한 트리스-오르토-금속화 이리듐(III) 착물로부터의 발광을 활용하는 녹색발광소자가 보고된 적이 있다(예를 들어 *Appl. phys. lett.* 1999, vol.75, p.4를 참조함).

[0012] 어떤 경우라도, 발광 물질이, 선택된 스펙트럼 영역들 가까이에 집중되어 상대적으로 좁은 대역(적색, 녹색 및 청색으로 이루어진 삼원색 중 하나에 해당됨)에서 전계발광을 제공하는 것은 중요하며, 이로써 OLED에서 착색층으로 사용가능하게 된다.

[0013] 미국출원 2004/091738에 해당되는 미국특허 제6,858,327호는 2-페닐페리딘(ppy)-리간드가 함유된 비스-오르토-금속화 이리듐(III) 착물을 포함하는 유기발광재료, 및 상기 재료를 포함하는 장치를 개시하고 있다.

[0014]

이러한 착물을 다음과 같은 일반 구조를 가진다:



[0015]

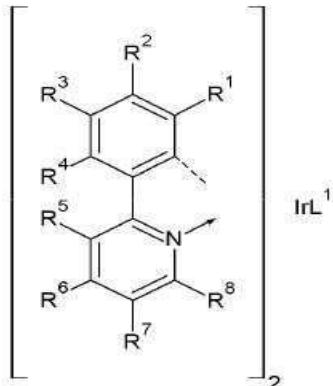
[0016] (식 중,  $L^1$ 은 다양한 구조를 가질 수 있는 보조 리간드임).

[0017]

ppy-리간드의 폐닐 고리는 피리딘 고리에 결합되어 있는 탄소 원자로  $\sigma$ - 및  $p$ -위치에서 치환될 수 있고, 특히 참조 특허의 화합물 2에서의 2,4-디플루오로 치환을 개시하고 있으며, 참조 특허의 화합물 3 및 4는 피리딘 고리에 추가 치환기를 갖는 착물을 각각 가리킨다.

[0018]

미국특허 제7,037,598호에는 신규의 비스-오르토-금속화 이리듐 ppy-착물이 개시되어 있으며, 다양한 각종 치환기들은 하기 일반식의  $R^1$  내지  $R^8$ 로 사용될 수 있고  $L^1$ 은 다양한 의미를 가질 수도 있다.



[0019]

구체적인 ppy-리간드의 예에는 2-(4-플루오로페닐)-피리딘, 2-(2,4-디플루오로페닐)-피리딘 및 2-(2,3,4-트리플루오로페닐)-피리딘은 물론 2-(2,4-디플루오로페닐)-4-디메틸아미노-피리딘이 있다. 폐닐 고리의 3-위치에 대한 치환기로 불소만이 개시되어 있다.

[0021]

미국출원 2004/0121184는 9번째 컬럼의 화학식 7에서 비스-오르토-금속화 Ir(ppy) 착물을 개시하고 있으며, 이 때 ppy-리간드의 폐닐 고리는 2- 및 4-위치에 2개의 불소 치환기를 포함하고, 3-위치에는 시아노기를 포함하며, 피리딘 고리 역시 잠재적으로 치환된다.

[0022]

미국출원 2004/0188673은 불소화 폐닐피리딘, 폐닐피리미딘 및 폐닐퀴놀린을 포함하는 전계발광성 이리듐 화합물을 개시하고 있다. 본 참조 특허는 일반적으로 2개 이상의 폐닐피리딘 리간드를 갖는 이리듐 착물에 관한 것으로, 각 리간드 상에는 1개 이상의 불소 또는 불소화기가 존재한다. 불소-함유 치환기는 피리딘 고리 또는 폐닐 고리 내 임의의 위치에 있을 수 있지만, 폐닐 고리의 4-위치 또는 피리딘 고리의 4-위치에서 ppy-리간드가 치환되는 것이 바람직한 예이다. 바람직한 불소-함유 치환기로는 불소, 과불소화 알킬 또는 과불소화 알콕시가 있다.

[0023]

Int. J. Mol. Sci. 2008, 9, pp.1527에는 인광 유기발광소자에서 이리듐계 발광 물질의 작동 원리에 대한 정보 및 리간드의 구조에 따른 이러한 착물의 발광 특성에 대한 정보가 각각 개시 및 제공되어 있다. 고리금속화 (cyclometalating) 리간드의 성질을 변화시켜 색조정(colour tuning)에 이용할 수 있다고 언급되어 있다.

[0024]

WO 2002/15645에는 다양한 보조 리간드를 가진 폐닐 고리 내 불소 원자들로 이중치환된 폐닐피리딘 리간드가 포

함된 인광성 Ir 착물 및 보조 리간드의 구조가 방출 파장에 미치는 영향이 개시되어 있다.

[0025] 녹색 및 적색 영역에서 EL 발광을 나타내고 발광 수율과 발광 안정도가 적절히 조합된 발광 물질이 개발되었지만, 청색 영역에서 빛을 방출하는 물질에 대한 개선이 여전히 요구된다.

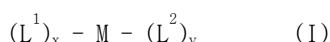
### 발명의 내용

[0026] 따라서 본 발명의 목적은 양호한 안정도 및 만족할 만한 EL 발광을 보여주는 발광 물질을 제공하고자 함이다. 본 발명의 다른 목적은 스펙트럼의 청색 영역에서, 구체적으로는 440 내지 500nm의 파장에서, 최대 발광을 갖는 발광 물질을 제공하고자 함이다.

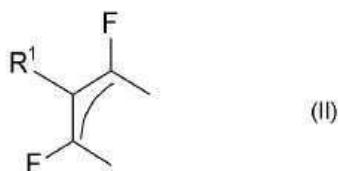
[0027] 이들 목적은 청구범위 제1항에 따른 발광 물질을 통해 달성된다. 바람직한 구현예를 종속항 및 이하 상세 설명에 기재하였다.

[0028] 본 발명의 또 다른 목적은 상기 발광 물질을 포함하는 발광층, 및 상기 발광 물질을 포함하는 유기발광소자이다.

[0029] 본 발명에 따른 발광 물질은 하기의 일반 화학식 I을 가진다:

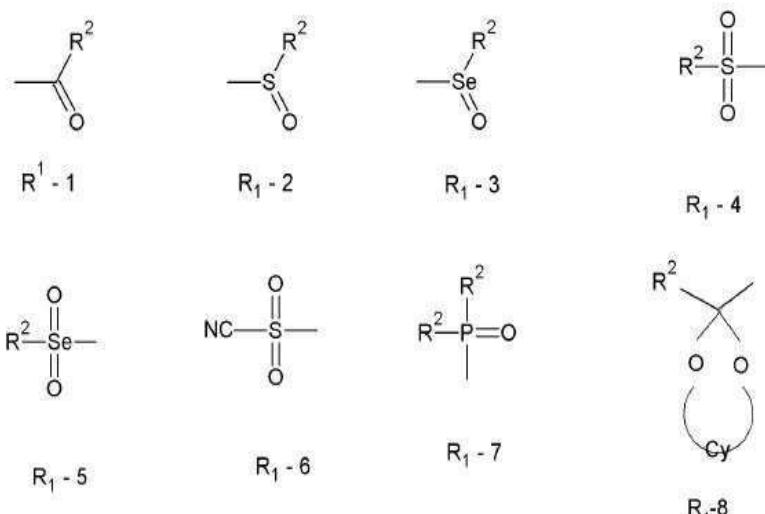


[0031] (식 중,  $L^1$ 은 고리 시스템에 하기의 구성 요소:



[0032]

[0033] ( $R^1$ 은 하기  $R_1-1$  내지  $R_1-8$ 로 이루어진 군에서 선택되는 치환기이며;



[0034]

[0035] ( $R^2$ 는 탄소수 1 내지 20의 치환되는 선형, 분지형 또는 사이클릭 알킬 사슬이거나, 또는 탄소수 1 내지 20의 임의 치환되는 알콕시기이고;

[0036]

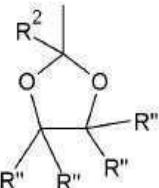
Cy는, 탄소수 1 내지 20의 임의 치환되는 선형, 분지형 또는 사이클릭 알킬 또는 알콕시 사슬로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 일부 또는 전체가 치환되는, 4- 내지 7-원 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 고리를 나타냄))를 포함하는 1가 음이온성(mono-anionic) 두자리(bidentate) 탄소-배위 리간드임).

[0037]

바람직하게  $R^2$ 는 탄소수 1 내지 20, 바람직하게는 탄소수 1 내지 8, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 4를 가지

며 일부 또는 전체가 불소화된 알킬기를 나타낸다. 특히 바람직한 치환기  $R^2$ 는 트리플루오로메틸, 헥사플루오로에틸, 및 불소화 프로판의 이성질체이다.

[0038] 치환기  $R_1$ -8의 바람직한 군은 하기의 일반 화학식을 가진 사이클릭 아세탈이다:



[0039]

[0040] (식 중, 각  $R''$ 은  $R^2$ 와 같은 의미를 가진 기타 치환기와 개별적, 독립적으로 동일하거나 상이하며, 또한 각각 비치환된 라디칼  $R^2$ 를 나타낼 수 있음).

[0041] 화학식 I에서  $L^2$ 는 비-1가 음이온성(non-mono anionic), 비-두자리 또는 비-탄소-배위 리간드이다.

[0042] 화학식 I에서 M은 원자번호가 40 이상, 바람직하게는 주기율표에서 8족 내지 12족에 속하는 전이금속을 나타낸다. 바람직한 전이금속으로는 Re, Os, Ir, Pt, Au, Ru, Rh, Pd 및 Cu가 있으며, Ir 및 Pt가 특히 바람직하다.

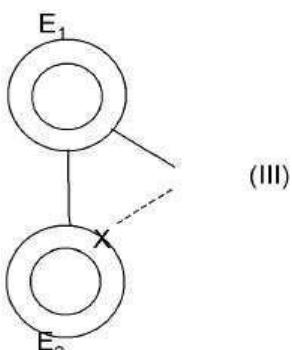
[0043] 화학식 I에서 x는 1 내지 3의 정수이고, y는 0, 1 또는 2이다.

[0044]  $L^1$ 은, 금속이 탄소-금속 결합을 통해 리간드에 결합되어 있으므로 탄소-배위 리간드로 지칭되며, 리간드의 한 탄소 원자만이 금속에 결합되어 있으므로 1가-음이온성이라 지칭된다.

[0045]  $L^1$ 은 두자리 리간드, 즉 금속 원자에 부착된 지점이 두 군데 있다.

[0046] 바람직한 발광 물질에 대해 이하의 설명에서, 그리고 종속항들에서 더 상세히 기술하기로 한다.

[0047] 바람직한 리간드  $L^1$ 은 다음과 같은 일반 화학식 III을 가진다:



[0048]

[0049] (식 중:

[0050]  $E_1$ 은 5- 또는 6-원 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 고리, 바람직하게는 추가 방향족 부분 또는 비방향족 사이클과 임의 축합되는 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 형성하는데 필요한 비금속성 원자 군을 나타내며, 상기 고리는 임의로 1개 이상의 치환기를 가지고,  $E_2$ 를 포함하는 고리와 함께 임의로 축합 구조를 형성하며, 상기 고리  $E_1$ 은  $sp^2$  혼성 탄소를 통해 금속 M에 배위되고, 상기 고리  $E_1$ 은 이전에 정의된 바와 같은 구성 요소(II)를 포함하며;

[0051]  $E_2$ 는 5- 또는 6-원 헤테로사이클릭 고리, 바람직하게는 추가 방향족 부분 또는 비방향족 사이클과 임의 축합되는 헤테로방향족 고리를 형성하는데 필요한 비금속성 원자 군을 나타내며, 상기 고리는 임의로 1개 이상의 치환기를 가지고,  $E_1$ 을 포함하는 고리와 함께 임의로 축합 구조를 형성하며, 상기 고리  $E_2$ 는  $sp^2$  혼성 질소를 통해 금

속 M에 배위되고;

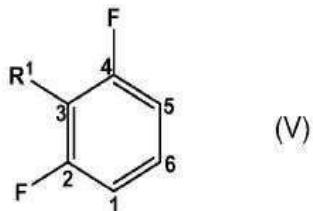
[0052] X는 주기율표의 IVa, Va 또는 VIa족 중에서 선택되는 배위 원자를 나타냄).

[0053] 바람직한 배위 원자 X로는 C, N, O, S, Se, Te 및 P가 있고, 그 중 C 및 N이 특히 바람직하다.

[0054] 바람직하게, 화학식 III에서 E<sub>1</sub>은 5 내지 10-원, 바람직하게는 5 내지 6-원 방향족 또는 헤테로방향족 고리, 즉 아릴기 또는 헤테로아릴기를 나타낸다. 본원에 사용된 바와 같이 아릴기는 보통 페닐 또는 나프틸 같은 C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기이며, 1개 이상의 치환기에 의해 치환될 수 있다. 언급된 아릴기는 또한 전술된 바와 같은 아릴기가 카보시클릴기, 헤테로시클릴기 또는 헤테로아릴기로 축합되는 축합형 고리군(fused ring groups)을 포함하며, 그 자체가 고리 시스템으로 더 축합되거나 또는 1개 이상의 치환기를 포함할 수 있다.

[0055] 고리 E<sub>1</sub>은 화학식 II의 구성 요소, 즉, 각각이 탄소 원자에 결합된 불소 치환기 두 개를 갖는 디플루오로-치환된 요소를 포함하며, 이때 상기 불소-치환된 탄소 원자들은 앞서 정의한 바와 같은 치환기 R<sup>1</sup>을 가진 탄소 원자에 의해 분리된다.

[0056] 바람직한 일 구현예에 따르면, E<sub>1</sub>은 하기 화학식 V의 2,4-디플루오로치환된 페닐 고리이며,

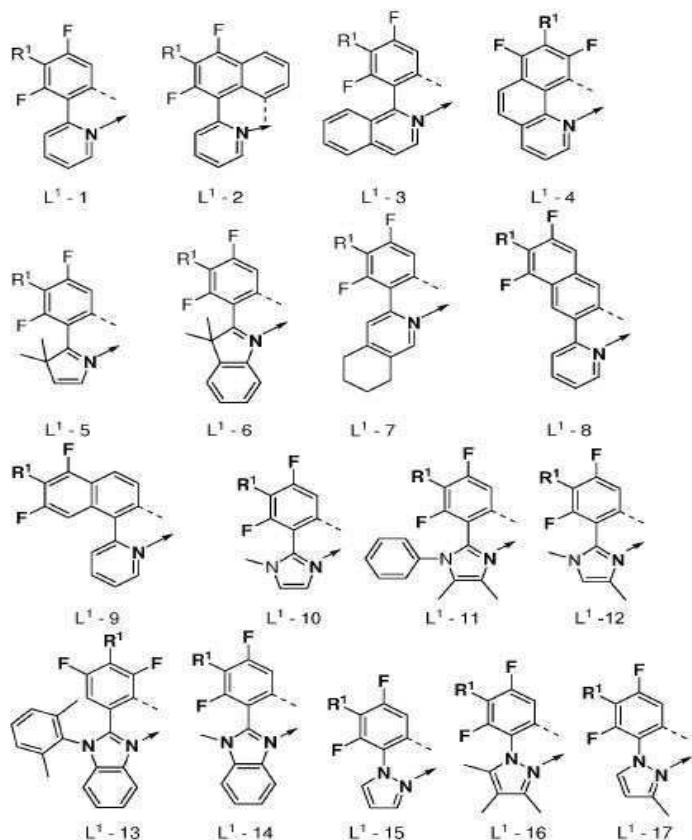


[0057]

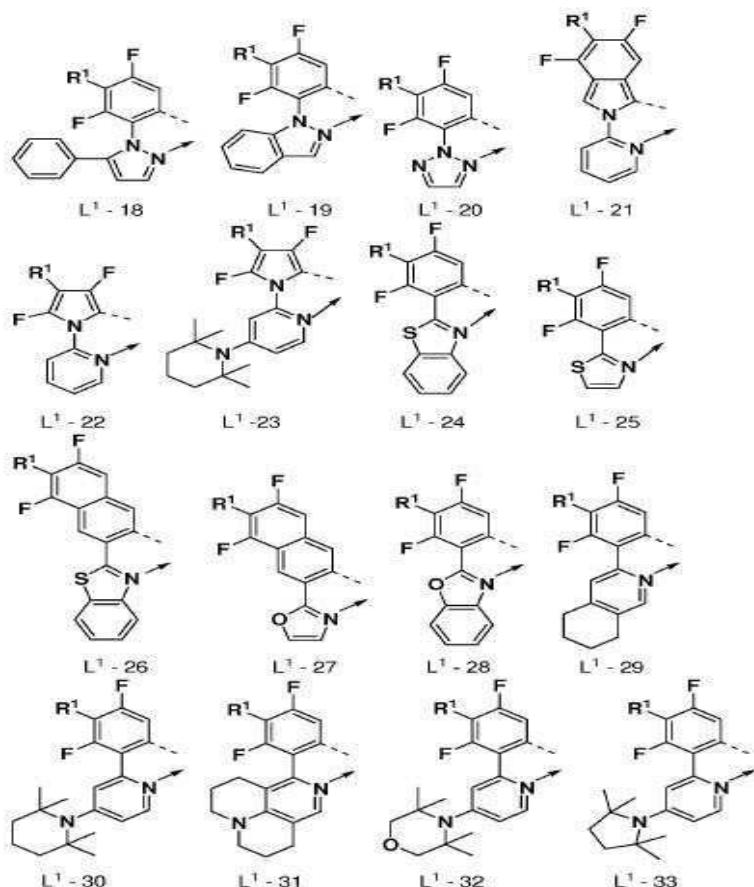
[0058] 상기 페닐 고리는 이웃한 탄소 원자들을 통해 전이금속 원자 및 E<sub>2</sub>에 결합된다.

[0059] 다른 바람직한 구현예에 따르면, E<sub>2</sub>는 5- 또는 6-원 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 나타내며, 이들 5- 및 6-원 헤테로방향족 고리 중에서 피리딘이 특히 바람직하다. 특정의 일 구현예에서, E<sub>2</sub>는 피리딘 고리의 탄소 원자 2를 통해 E<sub>1</sub>에 부착된 피리딘 고리를 나타낸다.

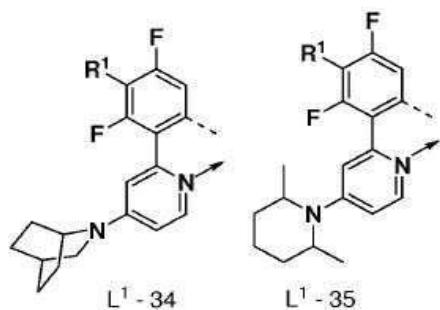
[0060] 구성 요소 II를 포함하는 리간드  $L^1$ 의 예는 다음과 같으며, 그 중  $L^1$ -1 및  $L^1$ -29 내지  $L^1$ -35가 바람직하다:



[0061]



[0062]



[0063]

[0064] 위에 언급한 바와 같이, 리간드  $L^1$ 의 고리  $E_2$ 는 1개 이상의 비환형(acyclic) 치환기를 지닐 수 있으며, 이러한 치환기는 바람직하게 강한 전자공여기, 즉 음의(negative) Hammett 치환기 상수를 갖는 기들로 이루어진 군에서 선택된다. 고리  $E_2$ 에 바람직한 치환기의 예에는  $C_1-C_8$  알킬,  $C_1-C_8$  티오알킬,  $C_1-C_8$  알콕시, 아미노,  $C_1-C_8$  알킬아미노,  $C_1-C_8$  디알킬아미노, 및 사이클릭 아세탈 구조와 같이 입체적으로 단단한(rigid) 구조를 갖는 이중치환된 아미노기가 있다.

[0065]

특히 바람직한 디알킬아미노 치환기는 입체적으로 단단한 구조를 가진 아미노기이며, 바람직하게는 파라-위치에서  $E_2$ 와  $E_1$ 을 연결하는 원자, 즉, 페리딘 고리의 4-위치에 있는  $E_2$ 와 같은 페리딘 고리의 경우에, 디메틸아미노 및 디에틸아미노이다. 한 예로, 입체적으로 단단한 구조의 바람직한 예로서  $L^1-30$  내지  $L^1-35$ 에 도시된 페리딘 고리 상의 치환된 아미노기가 언급된다.

[0066]

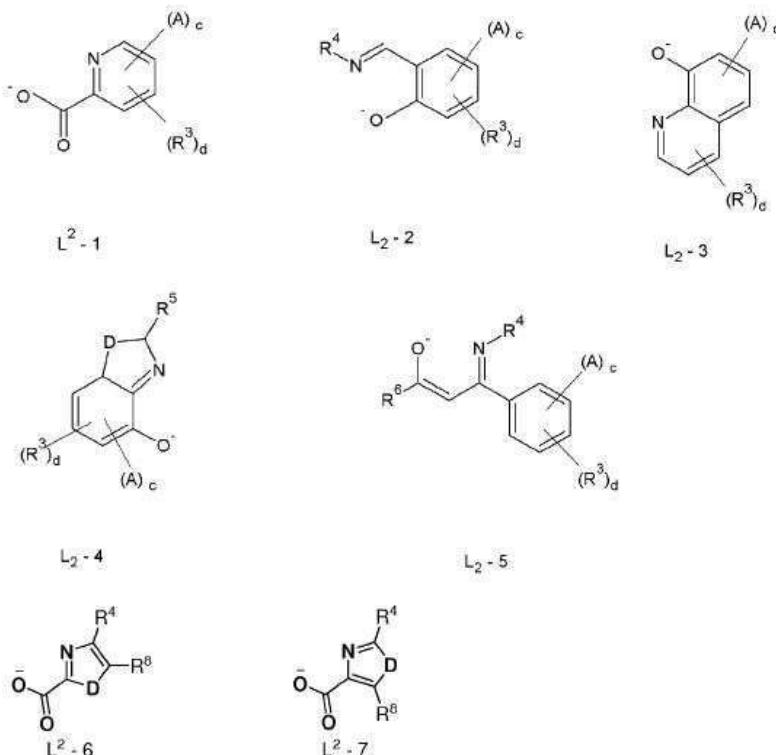
특히 바람직한 리간드  $L^1$ 은 위의 화학식  $L^1-1$ 로 표시되는 임의 치환된 2-페닐페리딘(ppy) 및 구조  $L^1-29$  내지  $L^1-31$  및  $L^1-33$ 으로 도시되는 폐닐페리딘 화합물이다.

[0067]

$L^2$ 는 "비-1가 음이온성", "비-두자리" 또는 "비-탄소 배위" 리간드, 즉 2개 이상의 음이온성 원자(비-1가 음이온성)를 통해 금속에 결합되거나, 금속과 단지 하나의 결합(비-두자리)을 형성하거나, 또는 탄소가 아닌 원자를 통해(비-탄소 배위) 금속 원자에 배위되는 리간드이다.  $L^2$ 는 흔히 보조 리간드로 지칭된다. 보조 리간드의 예는 이를 테면 WO 02/015645에 기재되어 있다.

[0068]

제1 바람직한 구현예에 따르면, 리간드  $L^2$ 는 하기의 화학식  $L^2-1$  내지  $L^2-7$ 로 표시되는 구조 또는 이들의 호변이 성체 중에서 선택되는 1가-음이온성의 비-탄소 배위, 두자리 리간드이다:



[0069]

[0070] (식 중:

[0071]

A는  $-C_1$ ,  $-F$ ,  $-Br$ 과 같은 할로겐;  $-OR_7$ ;  $-SR_7$ ;  $-N(R_7)_2$ ;  $-P(OR_7)_2$  및  $-P(R_7)_2$  ( $R_7$ 은  $C_1-C_6$  알킬, 플루오로알킬 또는 퍼플루오로알킬 기, 예컨대  $-CH_3$ ,  $-nC_4H_9$ ,  $-iC_3H_7$ ,  $-CF_3$ ,  $-C_2F_5$ ,  $-C_3F_7$ , 또는 1개 이상의 에테르기를 갖는  $C_1-C_6$  알킬, 플루오로알킬 또는 퍼플루오로알킬, 예컨대  $-CH_2-(CH_2-O-CH_2)_n-CH_3$ ,  $-CH_2-[CH_2(CH_3)-O-CH_2]_n-CH_3$ ,  $-(CF_2O)_n-C_2F_5$  ( $n$ 은 1 내지 8의 정수임)임)로 이루어진 군에서 선택되는 치환기이며, 바람직하게 A는  $-OR_7$  및  $-N(R_7)_2$  ( $R_7$ 은 위의 의미를 가짐) 중에서 선택되고;

[0072]

D는  $-CHR^{8-}$ ,  $-CR^{8-}R^8$ ,  $-CR^8=CH-$ ,  $-CR^8=CR^{8-}$ ,  $N-H$ ,  $N-R^9$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $Se$ 로 이루어진 군에서 선택되는 기이고;

[0073]

$R^3$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 서로 동일하거나 상이하며, 각 경우에 F, Cl, Br,  $NO_2$ , CN, 탄소수 1 내지 20의 직쇄 또는 분지 형 또는 사이클릭 알킬 또는 알콕시 기를 나타내며, 이들 각각에서 1개 이상의 비이온한  $-CH_2$ -기는  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NR^9-$  또는  $-CONR^{10-}$ 에 의해 교체될 수 있으며, 이들 각각에서 1개 이상의 수소 원자는 F에 의해 교체될 수 있거나; 또는 1개 이상의 비방향족 라디칼  $-R'$ 에 의해 치환될 수 있는 탄소수 4 내지 14의 아릴 또는 헤테로아릴 기에 의해 교체될 수 있고, 동일한 고리 또는 2개의 상이한 고리 상에 있는 복수의 치환기  $R'$ 는 함께, 임의적으로 방향족인, 추가의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 고리 시스템을 결과적으로 형성할 수 있으며;

[0074]

$R^4$ ,  $R^8$ ,  $R^9$  및  $R^{10}$ 은 서로 동일하거나 상이하며 각 경우에 H이거나 또는 탄소수 1 내지 20의 임의 치환되는 지방 족 또는 방향족 탄화수소 라디칼이고;

[0075]

c는 1 내지 3의 정수이고;

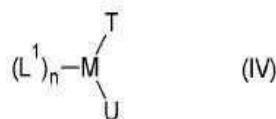
[0076]

d는 0 내지 4의 정수임).

[0077]

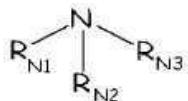
제2 바람직한 구현예에 따르면,  $L^2$ 는 동일하거나 상이할 수 있는 2개의 한자리(monodentate) 리간드를 포함한다. 이를 한자리 리간드(이하 T로 지칭함) 중 하나는 바람직하게 시아나이드(CN), 티오시아네이트(NCS) 및 시아네이트(NCO) 중에서 선택되고, 바람직하게는 시아나이드(CN)이며; 두 번째 한자리 리간드(이하 U로 지칭 함)는 한자리 중성 리간드이며  $sp^2$  또는  $sp^3$  혼성 질소 원자를 통해, 바람직하게는  $sp^2$  혼성 질소 원자를 통해,

금속 M에 배위된다. 본 구현예에 따른 발광 물질은 하기의 일반 화학식으로 특징지어질 수 있다:



[0078]

$sp^3$  혼성 질소 원자를 통해 금속에 배위되는 한자리 중성 리간드 U의 비제한적 예로는 특히 하기의 화학식에 포함되는 리간드가 있다:

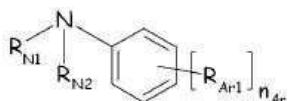


[0080]

(식 중, 서로 동일하거나 상이한  $R_{N1}$ ,  $R_{N2}$  및  $R_{N3}$ 는 예컨대 임의 치환되는 지방족 및/또는 방향족의 선형 또는 분지형  $C_{1-20}$  탄화수소기 중에서 독립적으로 선택됨).

[0082]

$sp^3$  혼성 질소 원자를 통해 금속에 배위되는 한자리 중성 리간드 U의 바람직한 예로는 특히 하기의 화학식을 따르는 리간드가 있다:



[0083]

(식 중,  $R_{N1}$  및  $R_{N2}$ 는 위에 정의된 바와 같은 의미를 가지며, 바람직하게  $R_{N1}$  및  $R_{N2}$ 는 임의 치환되는 선형 또는 분지형의  $C_{1-20}$  지방족기 중에서 독립적으로 선택되고;

[0085]

$R_{Ar1}$ 은 헤테로원자들(예컨대, 질소 또는 산소)을 임의로 포함하는 특히  $C_{1-6}$  알콕시기,  $C_{1-6}$  디알킬 아미노기 등과 같은 치환기이며, 바람직하게  $R_{Ar1}$ 은 메톡시기이고;

[0086]

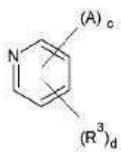
$n_{Ar}$ 은 0 내지 5의 정수이고, 바람직하게는 1 내지 3의 정수이며, 더 바람직하게는 2임).

[0087]

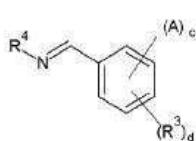
바람직하게 한자리 중성 리간드 U는  $sp^2$  혼성 질소 원자를 통해 금속에 배위된다.  $sp^2$  혼성 질소 원자를 통해 금속에 배위되는 한자리 중성 리간드  $L^2$ 는 유리하게 1개 이상의 이민기를 포함한다.

[0088]

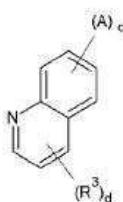
특히 바람직한 한자리 중성 리간드 U는 하기의 화학식 U-1 내지 U-8로 표시되는 구조 또는 이들의 호변이성체 중에서 선택된다:



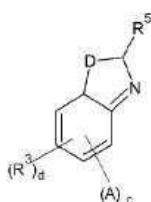
U-1



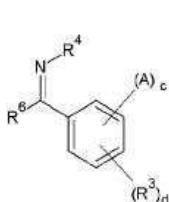
U-2



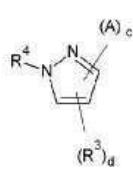
U-3



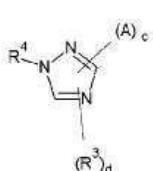
U-4



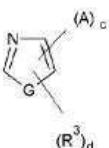
U-5



U-6



U-7



U-8

[0089]

[0090] (식 중, A, D 및  $R^3$  내지  $R^{10}$ 은 리간드  $L^2$ -1 내지  $L^2$ -5와 관련해서 앞서 정의한 바와 같은 의미를 지니며;

[0091] G는  $-CH=CH-$ ,  $-CR^8=CH-$ ,  $-CR^8=CR^8-$ ,  $N-H$ ,  $N-R^9$  및  $CR^8=N-$ 로 이루어진 군에서 선택되는 기이고;

[0092] c는 0 내지 3의 정수이고;

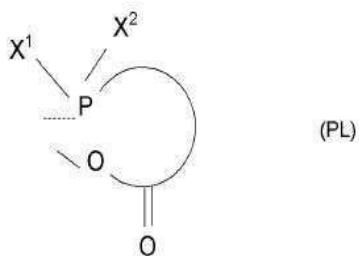
[0093] d는 0 내지 3의 정수임).

[0094]

본원에 사용된 바와 같이, 호변이성체란 용어는, 평형을 이루어 존재하면서 예를 들면 전자들 및/또는 수소 원자의 동시 이동에 의해 한 이성질체 형태에서 다른 이성질체 형태로 쉽게 전환되는, 둘 이상의 구조적 이성질체 중 하나를 지칭하고자 함이다.

[0095]

또 다른 바람직한 구현예에 따르면, 리간드  $L^2$ 는 산소 및 인 원자를 통해 금속에 결합되는 두자리 포스피노카복실레이트 1가 음이온성 리간드이며 하기의 일반 화학식 PL로 표시된다:



[0096]

[0097] (식 중,  $X^1$  및  $X^2$ 는 동일하거나 상이하며, 1개 이상의 치환기로 임의 치환될 수 있는  $C_1-C_8$  - 알킬, 아릴, 헤테로아릴 중에서 선택됨).

[0098]

본 구현예에서의 킬레이트 두자리 포스피노카복실레이트 1가 음이온성 리간드 PL은 일반적으로 중앙의 전이금속 원자와 함께 5-원, 6-원, 또는 7-원의 금속고리화합물(metallacycle)을 형성하며, 다시 말해, 포스피노기 및 카

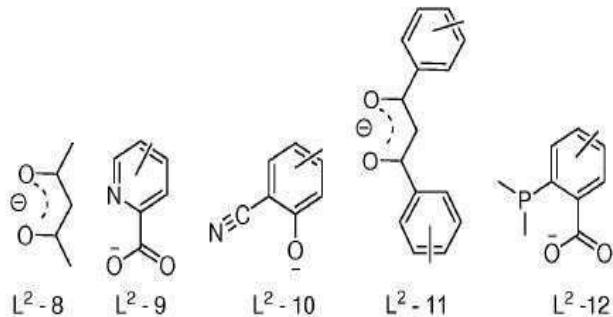
복실레이트 부분은 특히 1개, 2개 또는 3개의 탄소 원자에 의해 분리될 수 있다.

[0099]

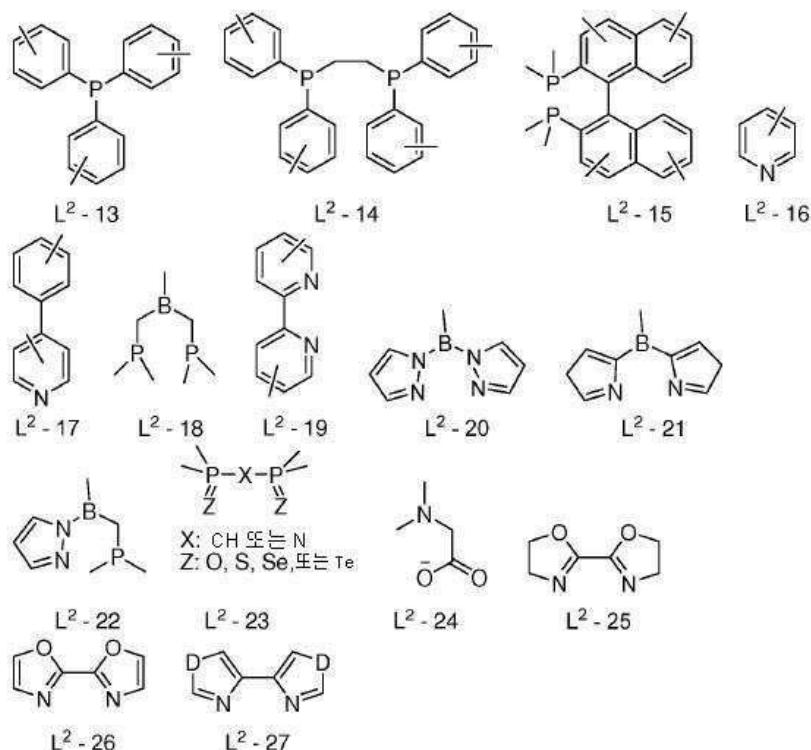
특히 바람직한 리간드 PL은 포스피노기와 카복실레이트기가 동일한 탄소 원자에 결합되어 있는 리간드이며; 유리하게 이들 리간드는 대부분의 경우에 특히 안정적인 5-원 금속고리화합물을 포함한 착물을 형성한다.

[0100]

제4 바람직한 구현예에 따르면, 리간드  $L^2$ 는 WO 02/15645에 개시된 바와 같은 하기의 바람직한 리간드  $L^2$ -8 내지  $L^2$ -27 중에서 선택된다:



[0101]



[0102]

위의 구조들에서 결합 기호로 표시된 모든 치환기는 수소, 할로겐, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub> - 알킬 또는 아릴 기 중에서 독립적으로 선택될 수 있다.

[0103]

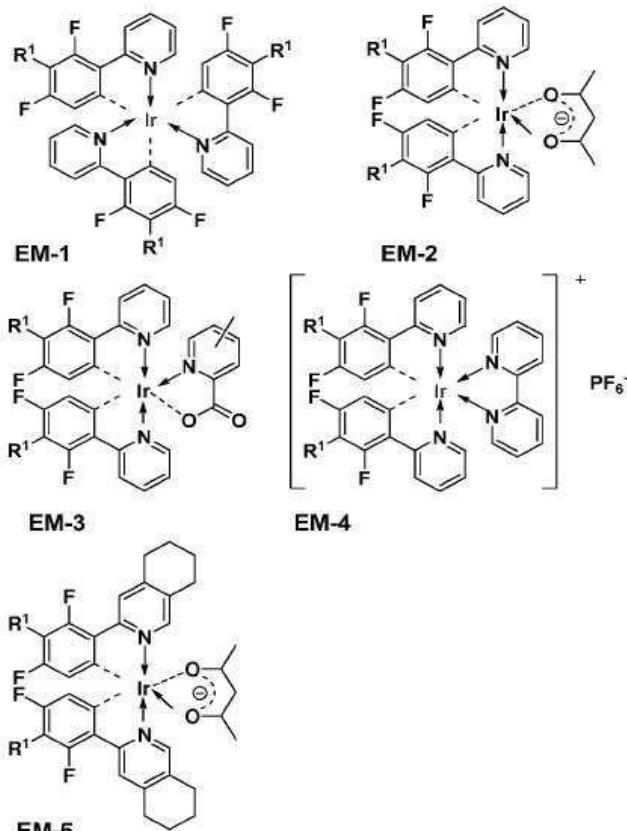
위의 설명은 본 발명에 따른 에미터(emitter) 물질의 다양한 원소들의 구조에 대한 가능성을 개략적으로 정리하였다. 이와 관련하여, 바람직한 리간드  $L^1$ 의 임의의 예가 바람직한 리간드  $L^2$ (리간드 T, U 및 PL을 포함함)의 임의의 예와 조합될 수 있으며, 이들 가능한 조합물의 모든 예는 본 발명의 범주 이내에 고려된다. 당업자에게는, 화학식 I로 고려된 바와 같은 임의의 리간드  $L^1$ , 특히 바람직한 리간드  $L^1$ -1 내지  $L^1$ -35가 어떻게 화학식 I에서 고려된 바와 같은 임의의 리간드  $L^2$ , 특히 바람직한 리간드  $L^2$ -1 내지  $L^2$ -5, T, U 및 PL 및 WO 02/15645에 따른 전술된 바람직한 리간드 중 임의의 것과 바람직하게 조합할 수 있는지 자명하다.

[0104]

특히 바람직한 에미터 물질은 이전에 정의된 바와 같은 의미의 E<sup>1</sup> 및 E<sup>2</sup>를 포함하는 일반 화학식 III의 화합물이

며, 이때  $L^2$ 는  $L^2-1$  내지  $L^2-27$ , T, U<sub>1</sub> 내지 U<sub>8</sub> 또는 PL 중에서 선택된다.

[0106] 가장 바람직한 에미터 물질의 경우에, L<sup>1</sup>은, 피리딘 고리에 구성 요소 II와 임의로는 하나 이상의 치환기, 바람직하게는 음의 Hammett 치환기 상수를 갖는 치환기(즉, 강한 공여기)를 포함하는, 치환된 2-페닐피리딘 부분을 나타낸다. 하기 화합물은 본 발명에 따른 특히 바람직한 에미터 물질을 나타낸다:



[0107]

[0108] 특히 바람직한 에미터 물질은 임의 치환된 2-페닐피리딘 부분을 리간드 L<sup>1</sup>로서, 그리고 임의 치환된 피콜리네이트 또는 아세틸아세톤 부분을 리간드 L<sup>2</sup>로서 함유하는 Ir 착물이다. 이들 착물은 물질 처리 과정시 유리할 수 있는 양호한 화학적 및 (승화 현상의 경우에) 열적 안정도를 보였다.

[0109]

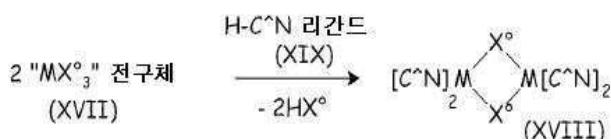
화학식(I)의 착물, 즉 위에 명시된 바와 같이 2개의 오르토금속화된 리간드(C<sup>N</sup> 리간드) 및 보조 리간드(L)를 포함하는 금속 착물은 임의의 공지된 방법에 의해 합성될 수 있다. 화학식(I)의 착물 제조에 적합한 합성 방법에 대한 세부사항들은 특히 "Inorg. Chem.", No.30, pag.1685(1991); "Inorg. Chem.", No.27, pag.3464(1988); "Inorg. Chem.", No. 33, pag.545(1994); "Inorg. Chem. Acta," No.181, pag.245(1991); "J.Organomet. Chem.," No.35, pag.293(1987); 및 "J.Am. Chem. Soc.," No.107, pag.1431(1985)에 개시되어 있다.

[0110]

일반적으로, 이러한 합성은 하기의 반응식에 따라 두 단계로 수행된다:

[0111]

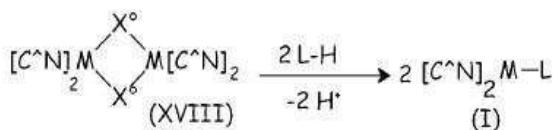
단계 1:



[0112]

[0113]

## 단계 2:



[0114]

(식 중,  $X^0$ 는 할로겐이며, 바람직하게는 Cl이고, M, L 및  $C^N$ 은 앞서 정의한 바와 같은 의미를 지님).

오르토금속화된 리간드( $H-C^N$ )의 산 형태 및 보조 리간드( $L-H$ )의 산 형태는 상업적으로 입수 가능하거나, 또는 잘 알려진 유기 합성반응 경로를 이용하여 쉽게 합성될 수 있다.

[0117]

전이금속이 이리듐인 경우에는,  $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 와 같은 트리할로겐화된 이리듐(III) 화합물,  $\text{M}^0_3\text{IrX}^0_6$ (식 중,  $\text{X}^0$ 는 할로겐이며 바람직하게는  $\text{Cl}$ 이고,  $\text{M}^0$ 는 알칼리 금속이며 바람직하게는  $\text{K}$ 임)와 같은 헥사할로겐화 이리듐(III) 화합물,  $\text{M}^0_2\text{IrX}^0_6$ (식 중,  $\text{X}^0$ 는 할로겐이며 바람직하게는  $\text{Cl}$ 이고,  $\text{M}^0$ 는 알칼리 금속이며 바람직하게는  $\text{K}$ 임)와 같은 헥사할로겐화된 이리듐(IV) 화합물(이하, Ir 할로겐화 전구체)을 전술한 바와 같이 화학식(I)의 쟈물을 합성하기 위한 출발물질로서 사용할 수 있다.

[0118]

$X^0$ 가 할로겐(바람직하게는 Cl)인  $[C^N]_2Ir(\mu-X^0)_2Ir[C^N]_2$  착물(화학식 XVIII, M=Ir)는 문현상의 절차에 의해 상기 Ir 할로겐화된 전구체와 적절한 오르토금속화된 리간드로부터 제조할 수 있다(S. Sprouse, K.A. King, P.J. Spellane, R.J. Watts, J. Am. Chem. Soc., 1984, 106, 6647-6653; M.E. Thompson *et al.*, Inorg. Chem., 2001, 40(7), 1704; M.E. Thompson *et al.*, J. Am. Chem. Soc., 2001, 123(18), 4304-4312).

[0119]

오르토금속화된 리간드(H-C<sup>+</sup>N)의 중성 형태를 초과량 사용하여 반응을 수행하는 것이 유리하며; 고비등점 용매가 바람직하다.

[0120]

본 발명의 목적상, 고비등점 용매란 용어는 비등점이 80 °C 이상, 바람직하게는 85 °C 이상, 더욱 바람직하게는 90 °C 이상인 용매를 가리키고자 한다. 예를 들어, 적합한 용매로는 에톡시에탄올, 글리세롤, 디메틸포름아미드(DMF), N-메틸피롤리돈(NMP), 디메틸실록시드(DMSO) 등이며, 상기 용매는 그대로 또는 물과 혼합하여 사용될 수 있다.

[0121]

선택적으로, 이러한 반응은 적합한 브뢴스테드 염기의 존재 하에 수행될 수 있다.

[0122]

$[\text{C}^{\text{N}}]_2\text{IrL}$  착물은 상기  $[\text{C}^{\text{N}}]_2\text{Ir}(\mu-\text{X}^{\text{o}})_2\text{Ir}[\text{C}^{\text{N}}]_2$  착물을 보조 리간드(L-H)의 산 형태와 반응시킴으로써 최종적으로 얻을 수 있다. 반응:  $[\text{C}^{\text{N}}]_2\text{Ir}(\mu-\text{X}^{\text{o}})_2\text{Ir}[\text{C}^{\text{N}}]_2 + \text{L-H} \rightarrow [\text{C}^{\text{N}}]_2\text{IrL} + \text{H-X}^{\text{o}}$ 을 고비점 용매 또는 저비점 용매 중에 수행할 수 있다.

[0123]

적합한 고비점 용매는 그 중에서도 에톡시에탄을 같은 알코올, 글리세롤, DMF, NMP, DMSO 등이 있고; 상기 용매는 그대로 또는 물과 혼합하여 사용될 수 있다.

[0124]

바람직하게 반응은, 금속탄산염, 구체적으로는 탄산칼륨( $K_2CO_3$ ), 금속수소화물(metal hydrides), 구체적으로는 수소화나트륨(NaH), 금속 에톡사이드 또는 금속 메톡사이드, 구체적으로는  $NaOCH_3$ ,  $NaOC_2H_5$  같은 브뢴스테드 염기의 존재 하에 수행된다.

[0125]

적합한 서비점 용매는 그 중에서도 특히 클로로메탄(이를 테면  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ;  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ;  $\text{CHCl}_3$ ) 같은 클로로탄화수소가 있으며; 디클로로메탄이 바람직하다.

[0126]

선택적으로, 리간드 L용 전구체는 앞서 정의한 바와 같은 합성의 제2 단계에서 사용될 수 있으며, 유리하게는 목표 리간드 L을 생성하기 위해 상기 제2 단계의 반응매질에서 반응한다.

[0127]

본 발명의 또 다른 목적은 유기발광소자의 발광층에 있어서 전술된 바와 같은 발광 물질의 용도에 관한 것이다.

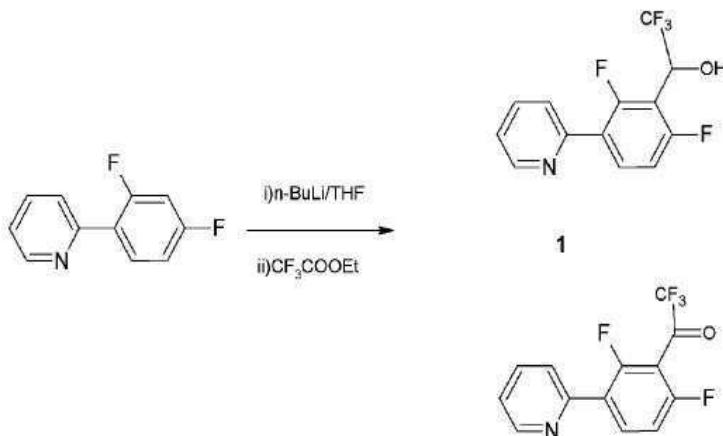
- [0128] 구체적으로, 본 발명은 유기발광소자(OLED)에서 발광층으로 기능하도록, 호스트층의 도편트에 있어서 전술된 바와 같은 발광 물질의 용도에 관한 것이다.
- [0129] 도 1에 도시된 바와 같이, 적합한 OLED는 바람직하게 다층 구조를 가지며, 도면에서 1은 유리기판, 2는 산화 인듐-주석층(ITO), 3은 정공수송층(HTL), 4는 호스트 물질 및 전술한 바와 같은 발광 물질을 포함하는 발광층(EML), 5는 정공차폐층(HBL), 6은 전자수송층(ETL), 및 7은 Al층 캐소드이다.
- [0130] 본 발명에 따른 에미터 물질은 OLED 장치에 사용하기에 특히 적합하도록 특성들의 양호한 조합을 나타낸다. 특히 흥미로운 사실은 본 발명에 따른 대부분의 에미터 물질이 스펙트럼의 청색 영역에서 안정된 발광을 보임으로써 이전에 만족스럽게 해결하지 못한 문제점에 대한 해결책을 제공한다는 것이다. 바람직한 물질의 최대 발광이 430 내지 500nm, 구체적으로는 440 내지 495nm의 범위 내에 속한다.
- [0131] 더욱이, 본 발명에 따른 에미터 물질은 또한 양호한 전계발광수율을 보여 주는데, 이는 또 하나의 장점이다.

### 도면의 간단한 설명

- [0132] 도 1은 OLED의 다층 구조를 도시하는 도면.
- 도 2는 375nm에서 여기(excitation)된 후의 화합물 4의 발광 스펙트럼을 도시하는 도면.
- 도 3은 375nm에서 여기된 후 화합물 5의 발광 스펙트럼을 도시하는 도면.
- 도 4는 375nm에서 여기된 후 화합물 6의 발광 스펙트럼을 도시하는 도면.
- 도 5는 375nm에서 여기된 후 화합물 11의 발광 스펙트럼을 도시하는 도면.
- 도 6은 전계발광 스펙트럼을 도시하는 도면.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0133] 하기의 실시예들은 본 발명의 특히 바람직한 구현예들에 대한 예시일 뿐 본 발명을 제한하고자 함이 아니다. 기타 에미터 물질도 유사한 방식으로 제조가능하다.
- [0134] NMR 분광법
- [0135] 400 MHz에서 동작하는, Oxford NMR 분광계 또는 Varian Mercury Plus 분광계를 이용하여 NMR 스펙트럼을 기록하였다.
- [0136] 광발광 분광법
- [0137] JASCO 모델 FP-750 형광광도계에서 광발광 스펙트럼을 측정하였다. 달리 명시되지 않는 한, (0.001 내지 0.002 mM의 농도의) 에탄올 용액 중에 실온에서 375nm의 여기 파장을 이용하여 광발광 스펙트럼 측정을 수행하였다. *fac-Ir(tpy)<sub>3</sub>*을 기준으로 이용하여 발광양자수율을 구하였다.
- [0138] 실리카 판을 이용하여 박막 크로마토그래피를 수행하였다.
- [0139] 실시예 1:
- [0140] 2-(2,4-디플루오로-3-(2,2,2-트리플루오로에탄올)페닐)페리딘(1) 및 2-(2,4-디플루오로-3-(2,2,2-트리플루오로에탄올)페닐)페리딘(2)의 합성



2

[0141]

[0142]

테트라하이드로퓨란(THF, 30ml)에 용해된 2-(2,4-디플루오로페닐)페리딘(1.7g, 8.89mmol, 1 eq.) 용액을  $-78^{\circ}\text{C}$  까지 냉각시키고, 여기에 헥산(6.12ml, 9.78mmol, 1.1 eq.)에 용해된 n-부틸리튬(n-BuLi)을 적가하여 15분 동안 교반 혼합시켰다.

[0143]

약  $-78^{\circ}\text{C}$ 에서 1시간 동안 교반시킨 후에, 에틸 트리플루오로아세트산(1.17ml, 9.78mmol, 1.1 eq.)을 10분 이내로 용액에 적가하였다.

[0144]

냉각 단계가 끝나면, 혼합물의 온도를 실온( $23^{\circ}\text{C}$ )까지 높이고, 이 온도를 유지한 채 밤새 연속적으로 교반시켰다.

[0145]

그런 후에는, 이렇게 얻은 혼합물에 물(50ml)을 첨가하고 나서, 유기 화합물을 디클로로메탄으로 (3회)추출하고, 유기층을 염수(50ml)로 세척하였다.

[0146]

유기 추출액을  $\text{MgSO}_4$  상에서 건조시키고, 회전식 증발기 상에서 용매를 제거하였다.

[0147]

에틸아세테이트/헥산이 1:2로 이루어진 혼합물을 용리액으로서 이용하는 실리카겔 상에서 컬럼 크로마토그래피에 의해 조 생성물을 정제시켜 옅은 황색 오일(1 :  $R_f$  = 0.1, 0.61g, 24%. 2 :  $R_f$  = 0.4, 0.53g, 21%)을 수득하였다. 대기 조건 하에서 몇 시간이 경과하자 황색 오일이 옅은 황색 결정체로 변하였다.

[0148]

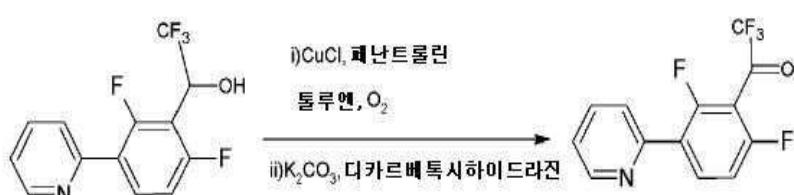
(1)  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 8.73 (d, 1H), 8.04 (dd, 1H), 7.79 (t, 1H), 7.73 (d, 1H), 7.30 (t, 1H), 7.11 (t, 1H), 5.47 (bs, 1H), 3.51 (bs, 1H).

[0149]

(2)  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 8.73 (d, 1H), 8.31 (dd, 1H), 7.80 (t, 1H), 7.78 (s, 1H), 7.32 (t, 1H), 7.18 (t, 1H).

[0150]

2-(2,4-디플루오로-3-(2,2,2-트리플루오로에타논)페닐)페리딘(2)



2

[0151]

[0152]

25mL 2구 플라스크에 환류 응축기 및 산소 주입구를 장착하였다. 톨루엔(15ml)에 이어,  $\text{CuCl}$ (0.010g,

0.10mmol, 5% eq.) 및 1,10-페난트롤린(0.019g, 0.10mmol, 5% eq.)을 차례로 첨가하였다. 용액의 색상이 투명한 검정색으로 변할 때까지 실온에서 20분간 계속 교반시켰다.

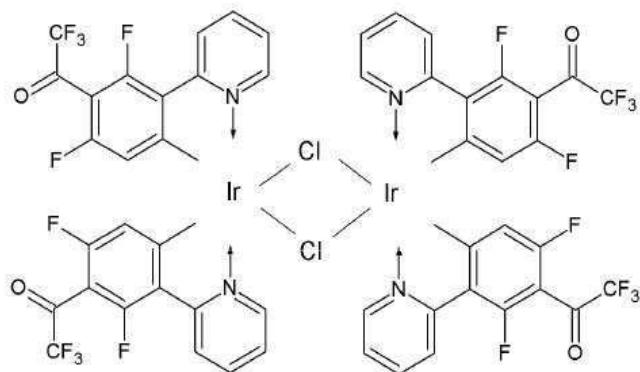
[0153] 그런 후에는, 1,2-디카르베톡시하이드라진(0.09g, 0.52mmol, 25% eq.)에 이어 고형물  $K_2CO_3$ (0.56g, 4.15mmol, 2 eq.)을 첨가하고, 10분 동안 더 교반시켰다.

[0154] 2-(2,4-디플루오로-3-(2,2,2-트리플루오로에탄올)페닐)페리딘 (**1**: 0.6g, 2.07mmol, 1 eq.)을 깔끔하게 첨가한 후, 용액을 산소 기포 발생과 함께 환류 조건 하에서 가열하였다.

[0155] 2시간 후에, 박막 크로마토그래피(TLC)를 통해 반응이 완료되었음을 확인하고 나서 혼합물을 실온까지 냉각시ки고, 용매를 진공 하에 증발시켰다.

[0156]  $CH_2Cl_2$ 를 용리액으로서 이용하는 실리카겔 상에서 컬럼 크로마토그래피에 의해 조 생성물을 정제시켜 황색 오일(0.52g, 87%)을 수득하였다.

[0157] 실시예 2: 화합물 3의 합성



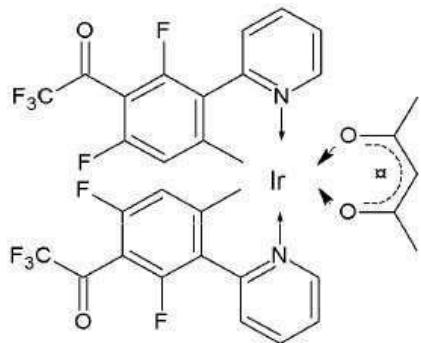
### 3

[0158]  $IrCl_3 \cdot nH_2O$ (1 eq.)을 2-에톡시에탄올에 용해시키고 아르곤을 사용하여 75°C에서 30분 동안 탈기처리하였다. 그런 후에는 2.2 당량의 금속고리화 리간드( $C^N$ )를 바로 첨가하였다. 이렇게 얻은 혼합물을 아르곤 하에서 125°C 까지 18시간 동안 가열하고, 알루미늄 호일을 이용하여 빛으로부터 보호하였다. 약 50°C까지 냉각시킨 후, 진공 하에 용매를 절반 부피까지 감소시켰다. 실온까지 냉각시킨 후, 혼합물을 탈이온수가 함유되어 있는 삼각 플라스크에 부었다. 플라스크를 냉장고(약 6°C)에 4시간 동안 보관하였다. 용융(fritted) 글래스를 통해 진공 여과법으로 침전물을 분리시키고, 물로 충분히 세척하였다. 황색 고형물을 실온에서 밤새 진공건조시키고, 알루미늄 호일을 이용하여 빛으로부터 보호시켜, 황색 고형물 형태의 화합물 **3**을 수득하였다.

[0160]  $^1H$ -NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz): 9.08 (d, 4H); 8.41 (d, 4H); 7.99 (t, 4H); 6.97 (t, 4H); 5.42 (d, 4H).

[0161]

실시예 3: 화합물 4의 합성



4

[0162]

디클로로메탄에 용해된 아세틸아세톤(4 eq.) 및 TBAOH(3 eq.)의 혼합물을 30분 동안 40°C에서 환류시키고 30°C 까지 냉각시켰다. **화합물 3**(1 eq.)을 디클로로메탄에 용해시키고 나서 TBA 아세틸아세톤 혼합물에 첨가하였다. 이렇게 얻은 혼합물을 아르곤 하에서 12시간 동안 30°C에서 가열하고, 알루미늄 호일을 이용하여 빛으로부터 보호하였다. 혼합물을 실온까지 냉각시킨 후 실리카 컬럼( $\text{SiO}_2/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )의 상부에 두었다.  $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{아세톤}$  0 내지 25%를 사용하여 생성물을 용리시켜 황색 분말 형태의 **화합물 4**를 수득하였다.

[0164]

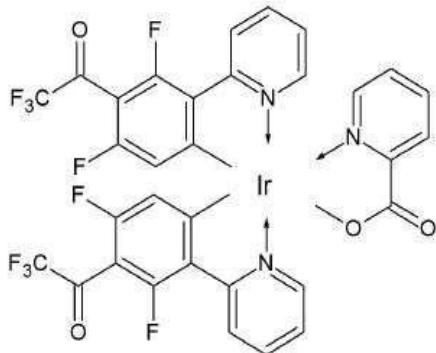
$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz): 8.43 (d, 2H); 8.34 (d, 2H); 7.94 (t, 2H); 7.34 (t, 2H); 5.83 (d, 2H); 5.30 (s, 1H); 1.82 (s, 6H).

[0165]

도 2는 375nm에서 여기된 후 화합물 4의 발광 스펙트럼을 보여 준다.

[0166]

실시예 4: 화합물 5의 합성



5

[0167]

디클로로메탄에 용해된 피콜린산(4 eq.) 및 TBAOH(3 eq.)의 혼합물을 30분 동안 40°C에서 환류시키고 30°C 까지 냉각시켰다. **화합물 3**(1 eq.)을 디클로로메탄에 용해시키고 나서 TBA 피콜리네이트 혼합물에 첨가하였다. 이렇게 얻은 혼합물을 아르곤 하에서 12시간 동안 30°C에서 가열하고, 알루미늄 호일을 이용하여 빛으로부터 보호하였다. 혼합물을 실온까지 냉각시킨 후 실리카 컬럼( $\text{SiO}_2/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )의 상부에 두었다.  $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{아세톤}$  0 내지 25%를 사용하여 생성물을 용리시켜 황색 분말 형태의 **화합물 5**를 수득하였다.

[0169]

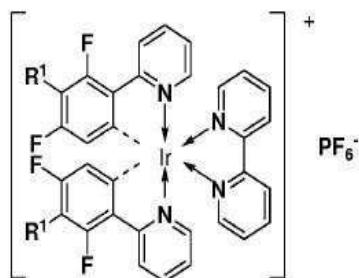
$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz): 8.78 (d, 1H); 8.38 (m, 2H); 8.33 (d, 1H); 8.03 (t, 1H); 7.92 (t, 2H); 7.76 (d, 1H); 7.53 (t, 1H); 7.45 (d, 1H); 7.35 (t, 1H); 7.13 (t, 1H); 6.02 (d, 1H); 5.72 (d, 1H).

[0170]

도 3은 375nm에서 여기된 후 화합물 5의 발광 스펙트럼을 보여 준다.

[0171]

실시예 5: 화합물 6의 합성



EM-4

[0172]

[0173]

비페리딘(4 eq.) 및 **화합물 3**(1 eq.)의 혼합물을 디클로로메탄에 용해시킨 후 아르곤 하에서 밤새 환류시켰다. 용매를 증발시키고, 혼합물을 최소량의 디클로로메탄에 용해시킨 후 디에틸에테르에 부었다. 침전물을 여과시키고 디에틸에테르로 세척하였다. 이렇게 얻은 고형물을 아세톤에 용해시키고, 여기에 암모늄 헥사플루오로포스페이트 포화 수용액을 첨가하였다. 진공 하에서 아세톤을 조심해서 제거하고, 침전물을 여과시키고, 물로 세척한 후 건조시켜 얻은 정색 고형물 형태의 **화합물 6**을 수득하였다.

[0174]

<sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): 8.70 (d, 2H); 8.39 (d, 2H); 8.25 (t, 2H); 7.92 (m, 4H) 7.62 (d, 2H); 7.57 (t, 2H); 7.28 (d, 2H); 5.86 (d, 2H).

[0175]

도 4는 375nm에서 여기된 후 **화합물 6**의 발광 스펙트럼을 보여 준다.

[0176]

실시예 6: 3-(2,4-디플루오로페닐)-5,6,7,8-테트라하이드로이소퀴놀린(7)의 합성



7

[0177]

500ml, 2구 플라스크에 적가 깔때기 하부에 환류 응축기와, 아르곤 주입구를 장착시켰다. 2,4-디플루오로벤조니트릴(4.4g, 31.6mmol, 1 eq.)을 진공 하에서 건조시킨 후 플라스크에 1,7-옥타디인(1.05ml, 7.91mmol, 0.25 eq.)을 첨가하고 나서, 이 혼합물에 증류된 툴루엔(200ml)을 첨가하였다. 툴루엔(150ml)에 이어서 1,7-옥타디인(3.15ml, 23.7mmol, 0.75 eq.) 및 CpCo(CO)<sub>2</sub>(0.28g, 1.58mmol, 5% eq.)을 순차적으로 적가 깔때기에 첨가하였다.

[0179]

촉매를 함유한 툴루엔 용액을 플라스크 내에 있는 다른 혼합물 용액에 hν(200W) 및 아르곤 기포 발생과 함께 환류 조건 하에서 36시간 동안 적가시켰다. 촉매를 첨가하자 용액의 색상이 짙은 갈색으로 변했다.

[0180]

적가식 첨가가 끝나면, 동일한 조건 하에서 추가로 12시간 동안 계속 교반시켰다.

[0181]

혼합물을 실온까지 냉각시키고 용매를 회전식 증발기 상에서 제거하였다.

[0182]

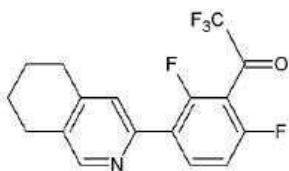
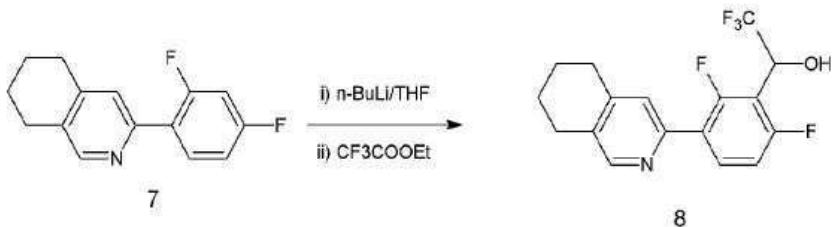
CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(R<sub>f</sub> = 0.2)를 용리액으로서 이용하는 실리카겔 상에서 컬럼 크로마토그래피에 의해 조 생성물을 정제시켜 얻은 갈색 오일(3.2g, 41%)을 수득하였다. 대기 중에서 몇 시간이 경과하자 얻은 갈색 결정체로 변하였다.

[0183]

<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 8.38 (s, 1H), 7.92 (q, 1H), 7.41 (s, 1H), 6.96 (t, 1H), 6.89 (t, 1H), 2.79 (d, 4H), 1.84 (t, 4H).

[0184]

실시예 7: 3-(2,4-디플루오로-3-(2,2,2-트리플루오로에탄올)페닐)-5,6,7,8-테트라하이드로이소퀴놀린(8) 및 3-(2,4-디플루오로-3-(2,2,2-트리플루오로에탄논)페닐)-5,6,7,8-테트라하이드로이소퀴놀린(9)의 합성



[0185]

[0186] THF(50ml)에 용해된 3-(2,4-디플루오로페닐)-5,6,7,8-테트라하이드로이소퀴놀린 7(2g, 8.15mmol, 1 eq.)의 용액을 -78°C까지 냉각시키고, 여기에 헥산(5.6ml, 8.97mmol, 1.1 eq.)에 용해된 n-BuLi을 적가하여 15분 동안 교반 혼합시켰다.

[0187]

냉각 단계가 끝나면, 혼합물의 온도를 실온(23°C)까지 높이고, 이 온도를 유지한 채 밤새 연속적으로 교반시켰다.

[0188]

그런 후에는, 이렇게 얻은 혼합물에 물(50ml)을 첨가하고 나서, 유기 화합물을 디클로로메탄으로 (3회)추출하고, 유기층을 염수(50ml)로 세척하였다.

[0189]

유기 추출액을  $MgSO_4$  상에서 건조시키고, 회전식 증발기 상에서 용매를 제거하였다.

[0190]

에틸아세테이트/헥산이 1:2로 이루어진 혼합물을 용리액으로서 이용하는 실리카겔 상에서 컬럼 크로마토그래피에 의해 생성물을 정제시켜 얇은 황색 오일(8 :  $R_f$  = 0.4, 1.13g, 40%, 9 :  $R_f$  = 0.2, 0.51g, 18%)을 수득하였다.

[0191]

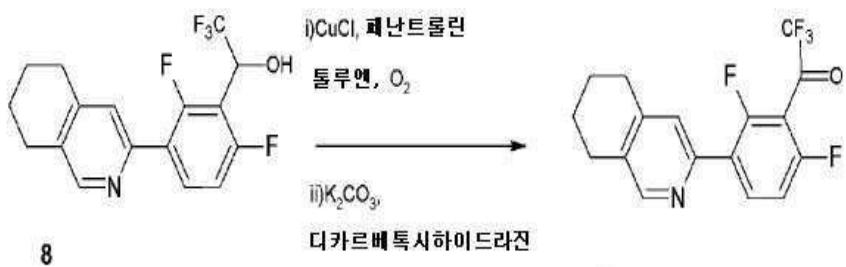
(8)  $^1H$  NMR (400 MHz,  $CDCl_3$ ): 8.34 (s, 1H), 7.68 (q, 1H), 7.28 (s, 1H), 6.89 (t, 1H), 5.35 (q, 1H), 4.10 (q, 1H), 2.77 (d, 4H), 1.82 (t, 4H).

[0192]

(9)  $^1H$  NMR (400 MHz,  $CDCl_3$ ): 8.40 (s, 1H), 8.24 (q, 1H), 7.44 (s, 1H), 7.14 (t, 1H), 2.80 (d, 4H), 1.86 (t, 4H).

[0193]

실시예 8: 3-(2,4-디플루오로-3-(2,2,2-트리플루오로에타논)페닐-5,6,7,8-테트라하이드로이소퀴놀린(9)의 합성



[0194]

[0195] 25mL 2구 플라스크에 환류 응축기 및 산소 주입구를 장착하였다. 톨루엔(15ml)에 이어,  $CuCl$ (0.014g, 0.15mmol, 5% eq.) 및 1,10-페난트롤린(0.026g, 0.15mmol, 5% eq.)을 순차적으로 유입하였다.

[0196]

용액의 색상이 투명한 검정색으로 변할 때까지 실온에서 20분간 계속 교반시켰다.

[0197]

1,2-디카르베톡시하이드라진(0.13g, 0.73mmol, 25% eq.)에 이어 고형물  $K_2CO_3$ (0.81g, 5.83mmol, 2 eq.)을 첨가

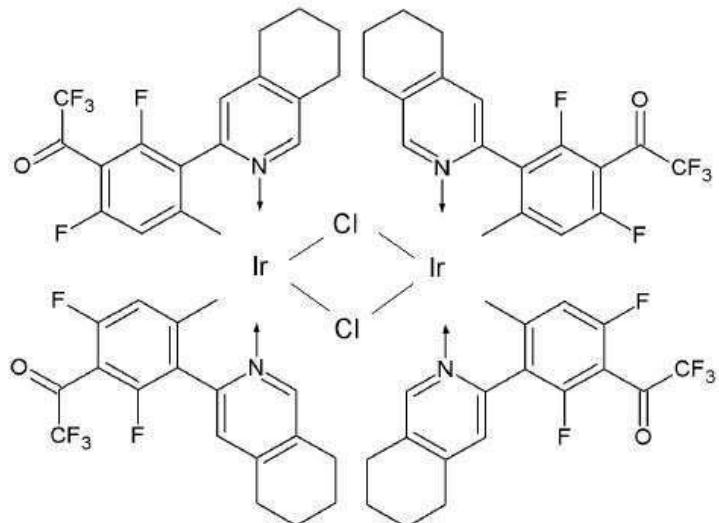
하고, 10분 동안 더 교반시켰다.

[0198] 2-(2,4-디플루오로-3-(2,2,2-트리플루오로에탄올)페닐)페리딘 (8: 1.0g, 2.91mmol, 1 eq.)을 깔끔하게 첨가한 후, 용액을 산소 기포 발생과 함께 환류 조건 하에서 가열하였다.

[0199] 3시간 후에, TLC를 통해 반응이 완료되었음을 확인하고 나서 혼합물을 실온까지 냉각시키고, 용매를 진공 하에 증발시켰다.

[0200] 에틸아세테이트/헥산이 1:2로 이루어진 혼합물을 용리액으로서 이용하는 실리카겔 상에서 컬럼 크로마토그래피에 의해 조생성물을 정제시켜 황색 오일 형태로 **화합물 9**( $R_f = 0.2$ , 0.41g, 41%)를 수득하였다.

[0201] 실시예 9: 화합물 10의 합성



10

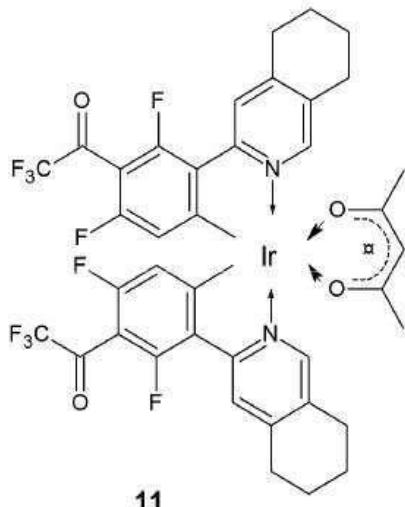
[0202]

[0203]  $\text{IrCl}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (1 eq.)을 2-에톡시에탄올에 용해시키고 아르곤을 사용하여 75°C에서 30분 동안 털기처리하였다. 그런 후에는 2.2 당량의 금속고리화 리간드( $\text{C}^{\wedge}\text{N}$ )를 바로 첨가하였다. 이렇게 얻은 혼합물을 아르곤 하에서 125°C 까지 18시간 동안 가열하고, 알루미늄 호일을 이용하여 빛으로부터 보호하였다. 약 50°C까지 냉각시킨 후, 진공 하에 용매를 절반 부피까지 감소시켰다. 실온까지 냉각시킨 후, 혼합물을 털이온수가 함유되어 있는 삼각 플라스크에 부었다. 플라스크를 냉장고(약 6°C)에 4시간 동안 보관하였다. 용융(fritted) 글래스를 통해 진공 여과법으로 침전물을 분리시키고, 물로 충분히 세척하였다. 황색 고형물을 실온에서 밤새 진공건조시키고, 알루미늄 호일을 이용하여 빛으로부터 보호시켜, 황색 고형물 형태의 **화합물 10**을 수득하였다.

[0204]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz): 8.92 (s, 4H); 7.76 (s, 4H); 5.69 (d, 4H); 3.07 (m, 1H); 2.89 (m, 1H); 2.60 (m, 1H); 2.42 (m, 1H); 1.83 (m, 2H); 1.70 (m, 2H).

[0205]

실시예 10: 화합물 11의 합성



[0206]

[0207]

디클로로메탄에 용해된 아세틸아세톤(4 eq.) 및 TBAOH(3 eq.)의 혼합물을 30분 동안 40°C에서 환류시키고 30°C 까지 냉각시켰다. **화합물 10**(1 eq.)을 디클로로메탄에 용해시키고 나서 TBA 아세틸아세토네이트 혼합물에 첨가하였다. 이렇게 얻은 혼합물을 아르곤 하에서 12시간 동안 30°C에서 가열하고, 알루미늄 호일을 이용하여 빛으로부터 보호하였다. 혼합물을 실온까지 냉각시킨 후 실리카 컬럼( $\text{SiO}_2/\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )의 상부에 두었다.  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ /아세톤 0 내지 25%를 사용하여 생성물을 용리시켜 황색 분말 형태의 **화합물 11**을 수득하였다.

[0208]

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz): 8.04 (s, 2H); 8.00 (s, 2H); 5.84 (d, 2H); 5.27 (s, 1H); 3.05 (m, 4H); 2.80 (m, 4H); 1.92 (m, 8H); 1.83 (s, 6H).

[0209]

도 5는 375nm에서 여기된 후 **화합물 11**의 발광 스펙트럼을 보여 준다.

[0210]

실시예 11. OLED 장치에 **화합물 5**를 사용한 결과

[0211]

스핀코팅된 OLED

[0212]

OLED 구조: ITO/CH8000/PVK:OXD7:EB166/TPBI/Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>/Al

[0213]

**화합물 5**(실시예 4) - 다양한 농도: 1.5%w; 2.5%w; 5%w 및 10%w.

[0214]

폴리(9-비닐카바졸)(PVK,  $M_w = 1,100,000$ ) 및 OXD-7 (1,3-비스[2-(4-터트-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠)을 SP2 및 Luminescence Technology Corp.로부터 각각 획득하였다. 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜); 폴리(스티렌설포네이트)(PEDOT:PSS, Clevios CH8000) 및 1,3,5-트리스[N-(페닐)벤즈이미다졸]벤젠(TPBI)을 HC Starck 및 Luminescence Technology Corp.로부터 각각 구입하였다. 장치의 구조는 유기 기판상에 지지된 하부 전극인 120nm의 투명 ITO(산화 인듐/주석)층으로 이루어졌다. Suss Microtec의 Delta6 RC 스피노코터(spincoater)를 이용하여, ITO 상부에 PEDOT:PSS층 및 발광층을 차례로 스피노코팅하였다. 다음으로는, Lesker Spectros 시스템을 이용하여 TPBI, Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 및 알루미늄 상부 금속 콘택을 차례로 증착시켰다. 추가로 처리하기 전에 ITO 표면을 산소-플라즈마 클리너로 전처리하였다. PVK:OXD7의 클로로벤젠 용액 및 상이한 질량비의 **화합물 5**로부터 발광층을 스피노코팅하였다. HAMAMATSU의 C9920-12 외부양자효율측정 시스템을 이용하여 OLED의 광학적 및 전기적 특성을 측정하였다.

[0215]

1% 도핑의 경우, 최대 효율은 0.91%, 1.2 Cd/A 및 0.74 lm/W이었다. 구동 전압(turn-on voltage)은 6V이었다. **화합물 5**를 발광 물질로 함유한 장치는 표준 에미터 FIRpic에 비해 더 깊은 청색좌표를 나타내었다.

[0216]

CIE 좌표는 다음과 같았다:

[0217]

**화합물 5**: (0.17; 0.28)

[0218]

FIRpic (0.18, 0.39).

[0219] 전계발광 스펙트럼을 도 6에 제공하였다.

[0220] 증착된 OLED

[0221] OLED 구조: ITO/AI 4083/ NPD/mCP:화합물 5/TPBI/Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>/Al

[0222] 발광층(EML):

[0223] 1) mCP: 화합물 5. 화합물 5의 도핑 농도는 7%w였다.

[0224] 2) TPBI: 화합물 5. 화합물 5의 도핑 농도는 10%w였다.

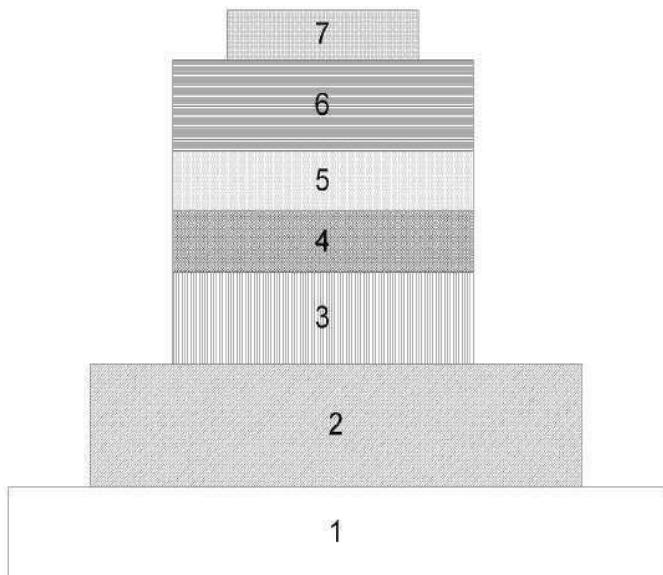
[0225] PEDOT:PSS(Clevios AI 4083)을 HC Starck으로부터 구입하였다. NPD(N,N'-비스[나프탈렌-1-일]-N,N'-비스[페닐]-벤즈이딘) 및 mCP(1,3-비스[카바졸-9-일]벤젠)을 Luminescence Technology Corp.로부터 구입하였다. Lesker Spectros 시스템을 이용하여 NPD, mCP:화합물 5, TPBI, Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 및 알루미늄 상부 금속 콘택을 차례로 증착시켰다.

[0226] TPBI를 호스트로서 사용한 경우에 최대 효율인 1.84%, 3.63 Cd/A 및 1.81 lm/W에 도달하였다. 구동 전압은 5.5V이었다.

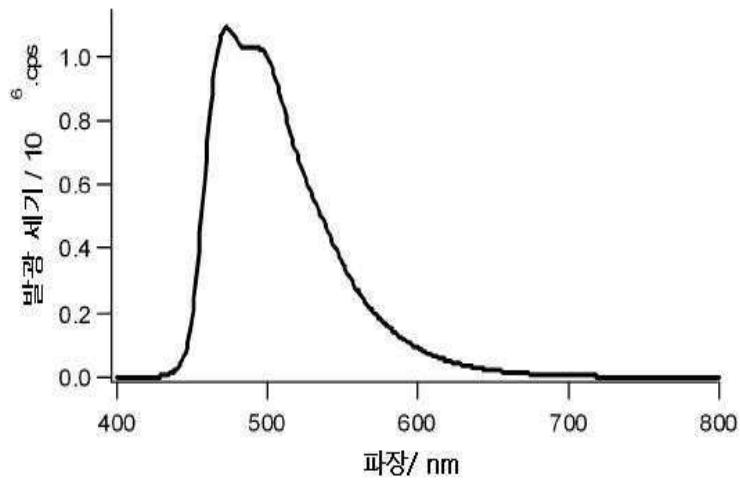
[0227] CIE 좌표: 0.15; 0.26.

## 도면

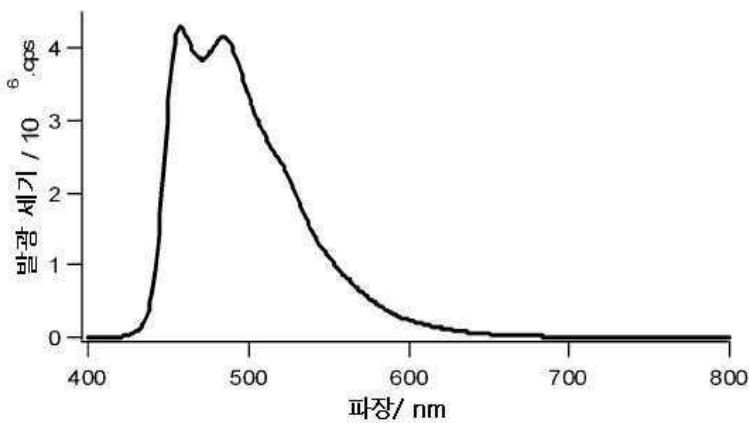
### 도면1



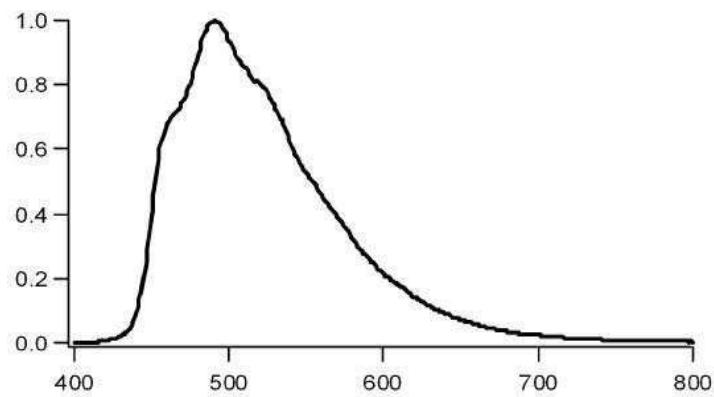
도면2



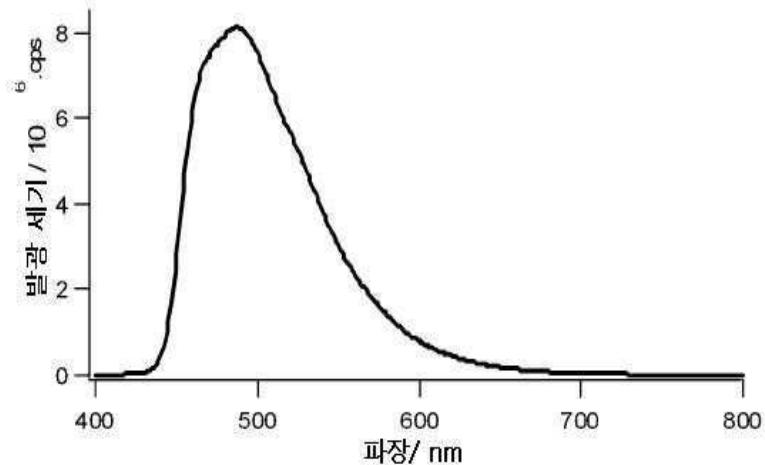
도면3



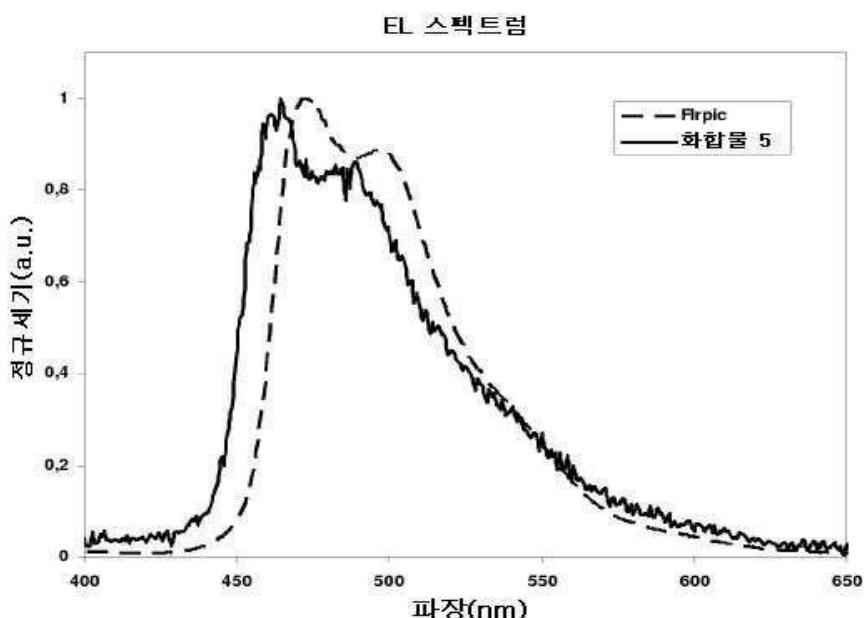
도면4



도면5



도면6



专利名称(译)	一种发光材料，用作OLED发光层中的主体掺杂剂		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020110131201A</a>	公开(公告)日	2011-12-06
申请号	KR1020117020700	申请日	2010-02-08
[标]申请(专利权)人(译)	索尔维公司		
申请(专利权)人(译)	苏威 ( 兴业牛群阿尔诺的 )		
当前申请(专利权)人(译)	苏威 ( 兴业牛群阿尔诺的 )		
[标]发明人	NAZEEERUDDIN MOHAMMAD KHAJA 나지루딘모하마드카자 BARANOFF ETIENNE DAVID 바라노프에티엥다비드 JUNG IL GRAETZEL MICHAEL 그라에첼미하엘		
发明人	나지루딘,모하마드카자 바라노프,에티엥다비드 정,일 그라에첼,미하엘		
IPC分类号	C09K11/06 C07F15/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K2211/1011 C09K2211/1029 H01L51/007 C09K2211/1037 C09K2211/185 C07F15/0033 C09K2211/1033 C09K2211/1007 C09K11/06 H01L51/0037 H01L2251/308 C09K2211/1044 H01L51/0085 H01L51/0042 H01L51/5016 H01L51/0087		
代理人(译)	KIM , YOUNG		
优先权	PCT/KR2009/000590 2009-02-06 WO 1020090000590 2009-02-06 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

## 摘要(译)

它涉及发光材料，包括以下化学式I的络合，用作(L<sup>1</sup>)<sub>x</sub>-M-(L<sup>2</sup>)<sub>y</sub>中的发光材料。L<sup>1</sup>在式1中，其中L<sup>1</sup>包括在环系统中的元素元素下面是阴离子二齿碳-配位配体。它是图像存在(特殊参考)R<sup>1</sup>选自下组的取代基：R<sup>1</sup>-1至R<sup>1</sup>-8)有机发光器件，以及包括发光材料的有机发光器件。

