(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년02월27일
(11) 등록번호 10-1833074
(24) 등록일자 2018년02월21일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(21) 출원번호 10-2012-7011267
(22) 출원일자(국제) 2010년09월29일
심사청구일자 2015년09월23일
(85) 번역문제출일자 2012년04월30일
(65) 공개번호 10-2012-0106731
(43) 공개일자 2012년09월26일
(86) 국제출원번호 PCT/GB2010/001818
(87) 국제공개번호 WO 2011/039506
국제공개일자 2011년04월07일
(30) 우선권주장
0917083.8 2009년09월30일 영국(GB)
(56) 선행기술조사문헌
WO2009087364 A1*
(뒷면에 계속)
전체 청구항 수 : 총 4 항

(73) 특허권자
로목스 리미티드
영국 체셔 씨더블류12 1이티 콩글턴 마켓 스퀘어 뱅크 하우스
(72) 발명자
코크, 진 칼
영국, 씨에프37 1에이티, 폰티프리드, 글린타프 로드, 1 씨더블유알티 에반스
(74) 대리인
허용록

심사관 : 정영훈

(54) 발명의 명칭 **플루오렌 유도체를 포함하는 전기발광 재료**

(57) 요 약

일반적인 구조가 B—S—A—S—B 이며, 여기에서, 막대형 핵인 A는 응축된 방향족 고리 구조를 포함하고, 차례로 적어도 하나의 추가적인 플루오렌 고리 구조와 응축된 플루오렌 고리 구조를 포함하며, 여기에서 응축된 방향족 구조로 이루어진 플루오렌 고리계는 9-위치에서 치환되고, 여기에서 플루오렌의 9-위치는 산화되기 어려운, OLED 화합물.

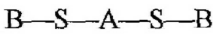
(56) 선행기술조사문헌
GB2456298 A
KR1020050084947 A
JP2009249385 A
US20090309068 A1
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명 세 서

청구범위

청구항 1

하기의 일반식을 갖는 것을 특징으로 하는 OLED 화합물:

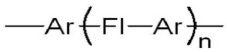


식 중, A는 응축된 방향족 고리 구조를 포함하는 공유적으로 결합된 쇄이고,

S는 알킬기를 포함하며 선택적으로 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 스페이서 기이고,

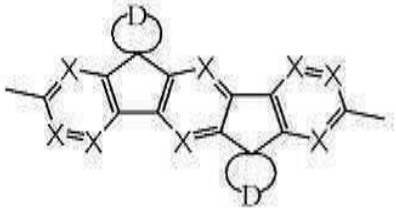
B는 가교결합성 기이며,

상기 A는 선형이면서 공유 결합된 사슬로 하기의 일반식으로 표시되고

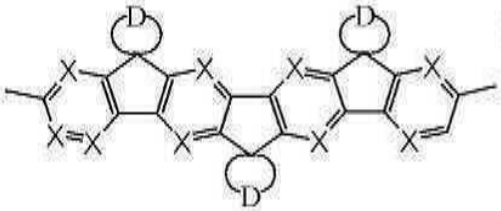


식 중, Ar은 방향족 또는 헤테로방향족 디라디칼로부터 각각 독립적으로 선택되며,

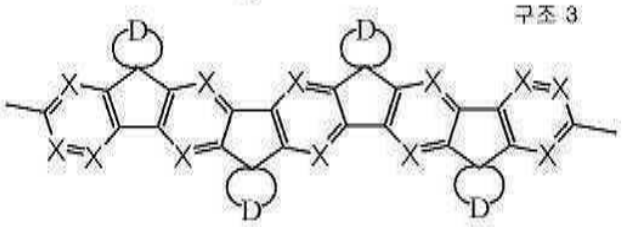
F1은 하기로부터 각각 독립적으로 선택되고,



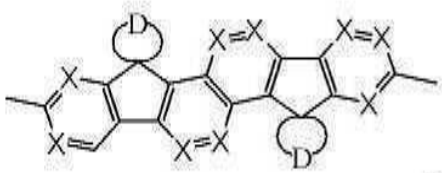
구조 1



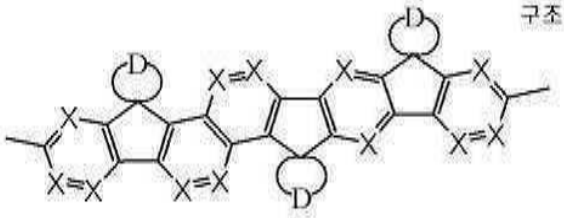
구조 2



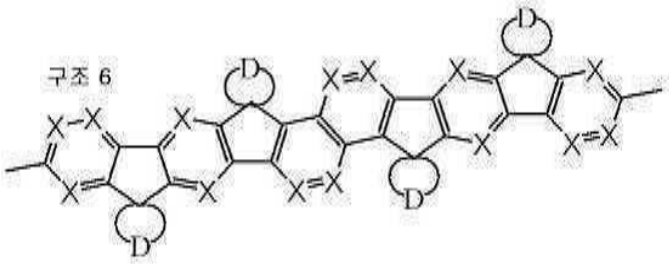
구조 3



구조 4

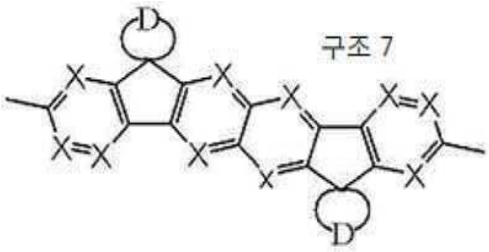


구조 5

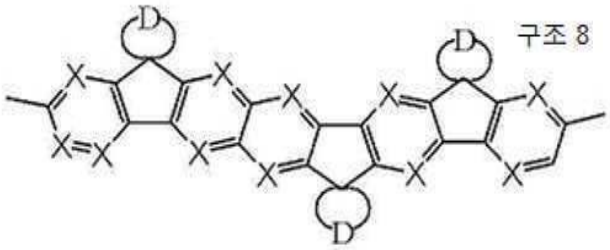


구조 6

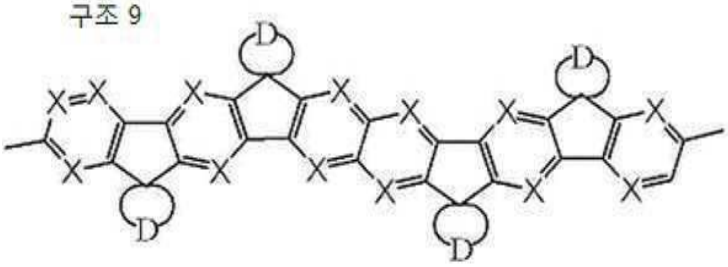
구조 7



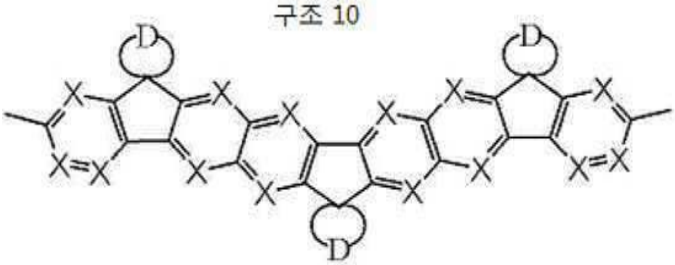
구조 8



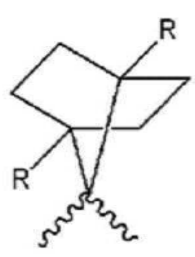
구조 9



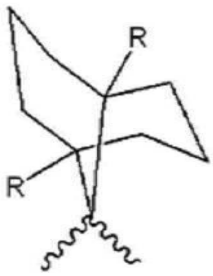
구조 10



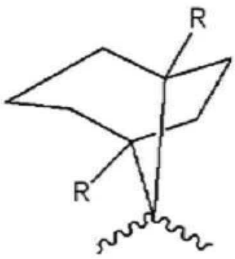
치환기 는 하기로부터 각각 독립적으로 선택되며,



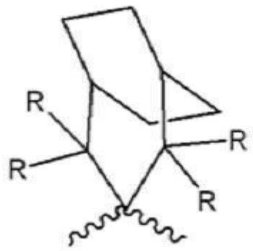
구조 11



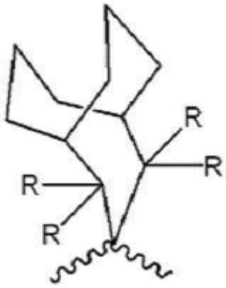
구조 12



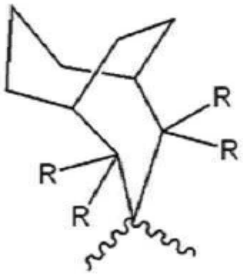
구조 13



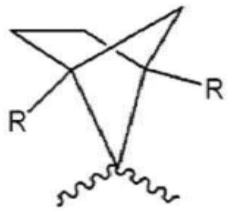
구조 14



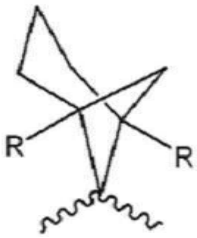
구조 15



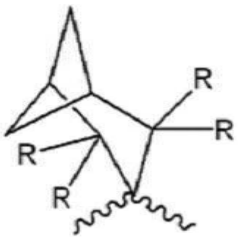
구조 16



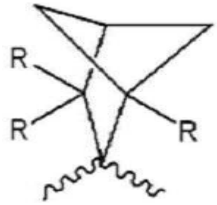
구조 17



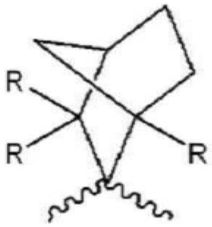
구조 18



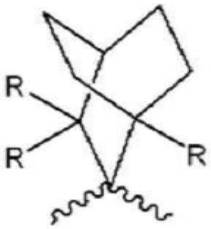
구조 19



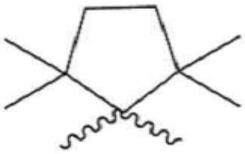
구조 20



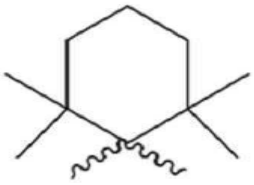
구조 21



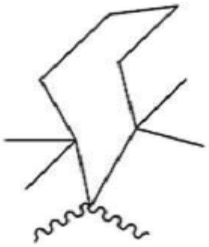
구조 22



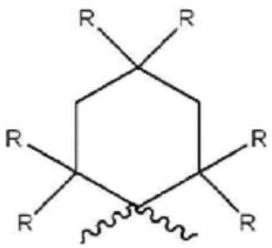
구조 23



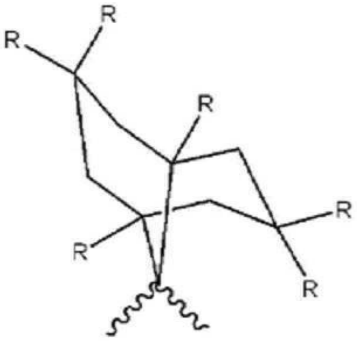
구조 24



구조 25



구조 26



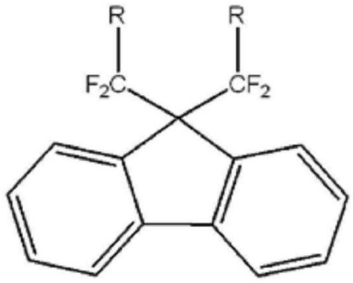
구조 27

식 중, R은 각각 독립적으로 알킬 그룹이고,

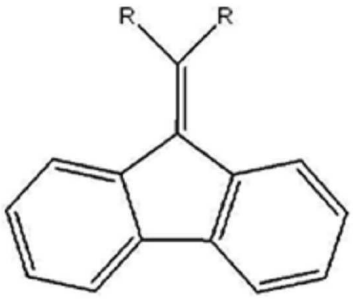
X는 각각 독립적으로 =CH- 로 이루어지며,

n은 1 내지 6이고,

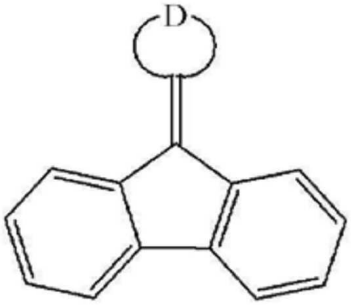
상기 응축된 방향족 고리 구조에서 플루오렌 고리 잔기 중 하나 이상은 각각 독립적으로 하기의 구조들로 치환될 수 있으며,



식 중, R은 플루오로(트리플루오로메틸 치환기를 만들어 냄), 분지형, 고리형 또는 직쇄형의 알킬 기, 하나 이상의 탄소가 헤테로원자로 치환된 몇 가지의 플루오린 기 또는 알킬 기로 치환된 알킬 기이고,



식 중, R은 알킬, 플루오렌 치환된 알킬, 분지형 알킬, 시클로알킬, 또는 하나 이상의 탄소가 헤테로원자로 치환된 알킬 기이며,



식 중,

는 상기 나타낸 예와 동일한 의미를 가진다.

청구항 2

제 1 항에 있어서, 각각의 가교결합성 기 B는 메타크릴레이트 기, 1,4-펜타디엔-3-일 기, 에타크릴레이트 기, 비닐옥시 기, 알킬비닐옥시 기, 에틸말리에이토 기, 에틸푸마라토 기, N-말레이미도 기, 비닐말리에이토 기, 비닐푸마라토 기 또는 N-(2-비닐옥시말레이미도) 기로부터 독립적으로 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 상기 B는 메타크릴레이트 기를 포함하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 상기 B는 1,4-펜타디엔-3-일 기를 포함하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 5

삭제

청구항 6

삭제

청구항 7

삭제

청구항 8

삭제

청구항 9

삭제

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

청구항 20

삭제

청구항 21

삭제

청구항 22

삭제

청구항 23

삭제

청구항 24

삭제

청구항 25

삭제

청구항 26

삭제

청구항 27

삭제

청구항 28

삭제

청구항 29

삭제

청구항 30

삭제

청구항 31

삭제

청구항 32

삭제

청구항 33

삭제

청구항 34

삭제

청구항 35

삭제

청구항 36

삭제

청구항 37

삭제

청구항 38

삭제

청구항 39

삭제

청구항 40

삭제

청구항 41

삭제

청구항 42

삭제

청구항 43

삭제

청구항 44

삭제

청구항 45

삭제

청구항 46

삭제

청구항 47

삭제

청구항 48

삭제

청구항 49

삭제

청구항 50

삭제

청구항 51

삭제

청구항 52

삭제

청구항 53

삭제

청구항 54

삭제

청구항 55

삭제

청구항 56

삭제

청구항 57

삭제

청구항 58

삭제

청구항 59

삭제

청구항 60

삭제

청구항 61

삭제

청구항 62

삭제

청구항 63

삭제

청구항 64

삭제

청구항 65

삭제

청구항 66

삭제

청구항 67

삭제

청구항 68

삭제

청구항 69

삭제

청구항 70

삭제

청구항 71

삭제

청구항 72

삭제

청구항 73

삭제

청구항 74

삭제

청구항 75

삭제

청구항 76

삭제

청구항 77

삭제

청구항 78

삭제

청구항 79

삭제

청구항 80

삭제

청구항 81

삭제

청구항 82

삭제

청구항 83

삭제

청구항 84

삭제

청구항 85

삭제

청구항 86

삭제

청구항 87

삭제

청구항 88

삭제

청구항 89

삭제

청구항 90

삭제

청구항 91

삭제

청구항 92

삭제

청구항 93

삭제

청구항 94

삭제

청구항 95

삭제

청구항 96

삭제

청구항 97

삭제

청구항 98

삭제

청구항 99

삭제

청구항 100

삭제

청구항 101

삭제

청구항 102

삭제

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 전기발광 재료에 관한 것이다.

배 경 기 술

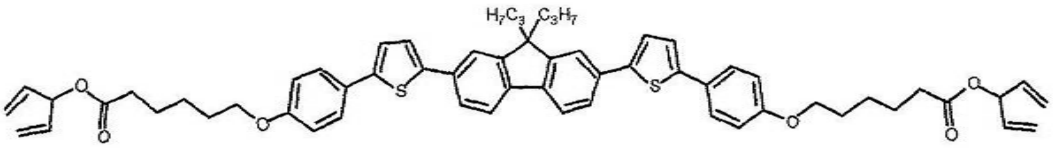
[0002] 하기 일반식의 일부 반응성 메조겐(중합체 매트릭스로 화학적으로 가교결합될 수 있는 액정 재료)이 유기 전자 소자의 제작에 유용할 수 있음이 알려져 있으며,

[0003] B—S—A—S—B

[0004] 여기에서, A는 선형 방향족 분자 코어를 나타내고, S는 가요성 스페이서 단위를 나타내며, B는 메타크릴레이트기와 같은 가교결합성 기를 나타낸다. 이는 B가 광가교결합성(photocrosslinkable) 기를 나타내는 경우에 특히 유용하며, 이는 그 후 전기발광 재료는 본질적으로 포토레지스트로서 작용하기 때문이며, 즉 이들 재료의 박막이 빛, 특히 자외선에의 노출에 의해 패터닝된 유용한 전자 구조로 패터닝될 수 있기 때문이다.

[0005] 또한, 선형 방향성 코어 A가 자연적으로 발광성이면, 이들 반응성 메조겐 재료는 유기발광 다이오드(organic light emitting diodes, OLEDS) 및 유기 다이오드 레이저와 같은 전기발광 소자에서 활성 발광층으로 패터닝될 수 있다.

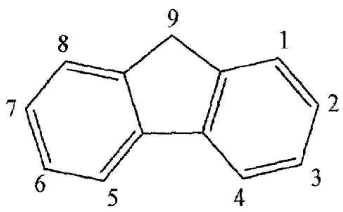
[0006] 이러한 재료의 하나의 예가 하기 구조로 나타내어진다:



구조 1

[0007]

[0008] 여기에서, 코어 방향족 구조 A는 2 및 7번 고리 위치에서 방향족 (페닐티에닐) 기로 치환되고 2개의 9번 위치에서 알킬 기(이 경우에는, n-프로필 기)로 치환된 하기 구조의 플루오렌 고리계이다.



[0009]

[0010] B 기는 상기 재료를 가교결합하는데 유용한 펜타-1,4-디엔-3-일 기이다.

[0011] A가 9,9-디알킬플루오렌 구조를 포함하는, 현재까지 하기 일반적인 구조의 재료로 생산된 모든 작동 OLED 소자는 실망스럽게도 수명이 낮았다.

[0012] B—S—A—S—B

발명의 내용

과제의 해결 수단

[0013] 본 발명은 상업적으로 유용한 수명을 가지는 일반적인 구조의 재료를 제공한다.

[0014] 본 발명은 하기 일반적인 구조의 OLED 화합물을 포함하며,

[0015] B—S—A—S—B

[0016] 여기에서, 막대형 핵인 A는 응축된 방향족 고리 구조를 포함하고, 차례로 적어도 하나의 추가적인 플루오렌 고리 구조와 응축된 플루오렌 고리 구조를 포함하며, 여기에서 응축된 방향족 구조로 이루어진 플루오렌 고리계는 9-위치에서 치환되고, 여기에서 플루오렌의 9-위치는 산화되기 어렵다.

[0017] 바람직하게 플루오렌 고리계의 9-위치 또는 플루오렌 고리계의 임의의 위치에 대한 α 수소는 없다.

[0018] 추가적인 플루오린 고리계는 벤젠, 나프탈렌, 인덴, 또는 다른 플루오렌 고리계를 포함할 수 있다.

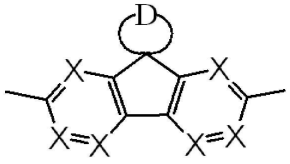
[0019] 이들 재료에서, S는 단일 결합된 원자의 사슬을 포함하는 가요성 스페이서를 나타낼 수 있다. 상기 사슬은 알킬 사슬을 포함할 수 있다. 알킬 사슬은 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다.

[0020] B는 가교결합성 화학기를 나타낼 수 있으며, 상기 가교결합성 화학기는 메타크릴레이트 기, 1,4-펜타디엔-3-일 기, 에타크릴레이트 기, 비닐옥시 기, 알킬비닐옥시 기, 에틸말리에이토 기, 에틸푸마라토 기, N-말레이미도 기, 비닐말리에이토 기, 비닐푸마라토 기 또는 N-(2-비닐옥시말레이미도) 기일 수 있다.

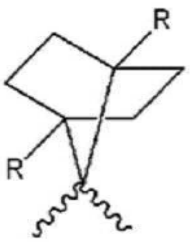
[0021] A는 실질적으로 선형인, 공유 결합된 사슬을 나타낼 수 있으며, 상기 사슬은 하기 일반식으로 나타내어지는 방향족 또는 헤테로방향족 디라디칼(diradical)의 사슬일 수 있다.

[0022] —Ar(—Fl—Ar)$_n$—

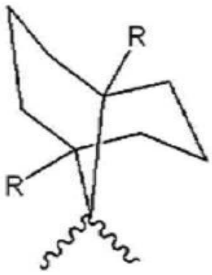
[0023] 여기에서, Ar은 각각 방향족 또는 헤테로방향족 디라디칼로부터 독립적으로 선택될 수 있고, 1,4-페닐렌, 비페닐-4,4'-디일, 테르펜-4,4''-디일, 나프탈렌-1,4-디일, 티오펜-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 페릴렌-3,10-디일, 피렌-2,7-디일, 2,2'-디티오펜-5,5'-디일, 옥사졸-2,5-디일, 티에노[3,2-b]티오펜-2,5-디일, 디티에노[3,2-b:2',3'-d]티오펜-2,6-디일, 티아졸로[5,4-d]티아졸-2,5-디일, 옥사졸로[5,4-d]옥사졸-2,5-디일, 티아졸로[5,4-d]옥사졸-2,5-디일, 티아졸로[4,5-d]티아졸-2,5-디일, 옥사졸로[4,5-d]옥사졸-2,5-디일, 티아졸로[4,5-d]옥사졸-2,5-디일, 2,1,3-벤조티아디아졸-4,7-디일, 또는 이미다조[4,5-d]이미다졸-2,5-디일 디라디칼, 단일 결합, 하기 화학식의 디라디칼을 포함할 수 있으며,

[0024] 

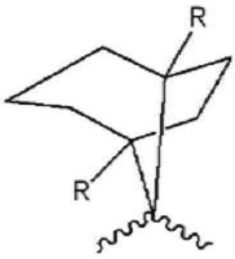
[0025] 여기에서, 치환기 는 이 구조의 각각의 존재에 대하여 하기 스피로 또는 비시클로스피로 기 중 하나로부터 선택될 수 있다:



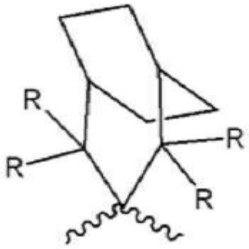
구조 11



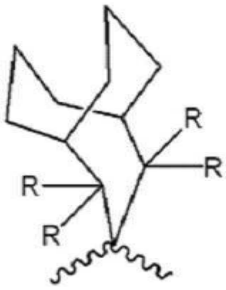
구조 12



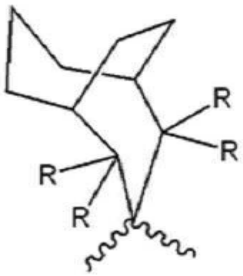
구조 13



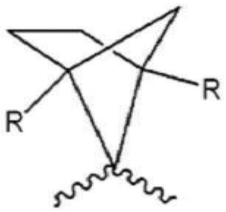
구조 14



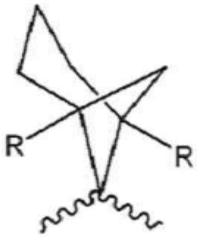
구조 15



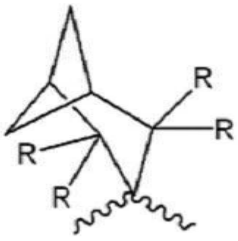
구조 16



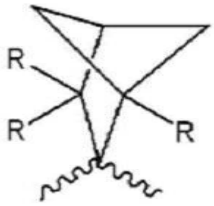
구조 17



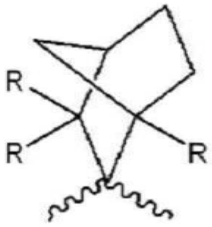
구조 18



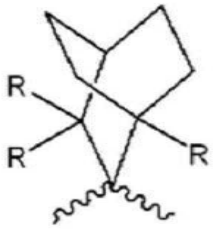
구조 19



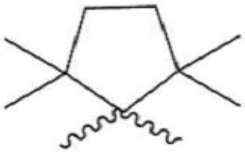
구조 20



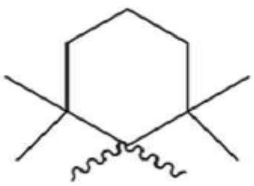
구조 21



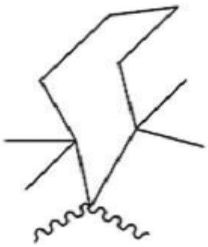
구조 22



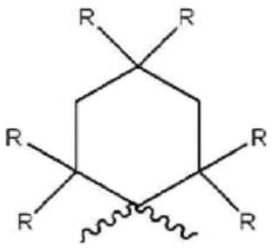
구조 23



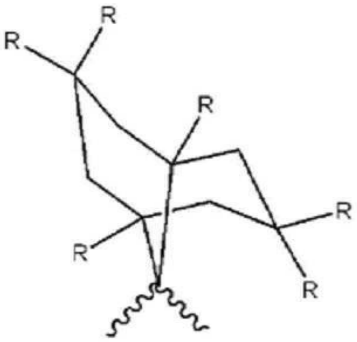
구조 24



구조 25



구조 26



구조 27

[0026] 이들 스피로비시클로 및 스피로 치환기에서, R은 알킬 기이고, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 이소프로필, sec-부틸, 이소부틸, tert-부틸, 2-아밀, 3-아밀, 2-메틸-2-부틸, 3-메틸-3-아밀, 3-에틸-3-아밀 또는 네오-펜틸로부터 선택될 수 있으며, X는 =CH-, =N-으로부터 독립적으로 선택될 수 있다.

[0027] 삭제

[0028] 삭제

[0029] 삭제

[0030] 삭제

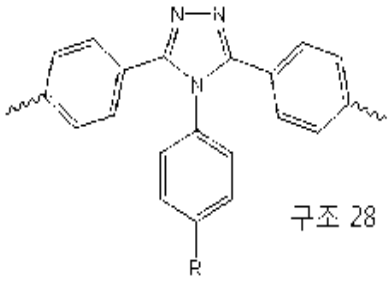
[0031] 삭제

[0032] 삭제

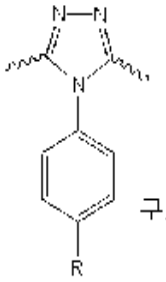
[0033] 삭제

[0034] 삭제

[0035] Ar은 또한 하기 디라디칼로부터 선택될 수 있으며,

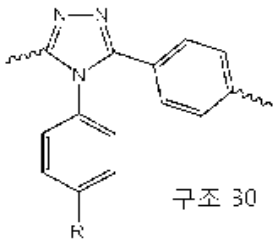


구조 28

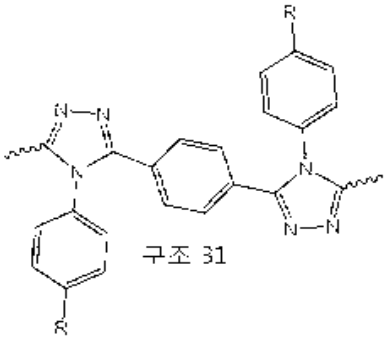


구조 29

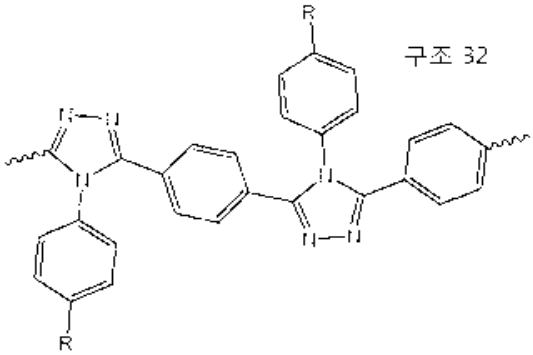
[0036]



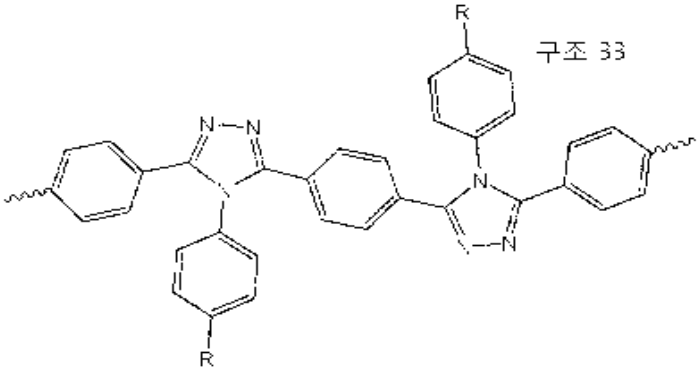
구조 30



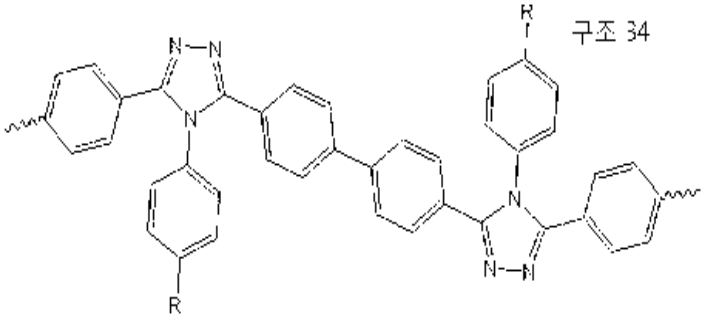
구조 31



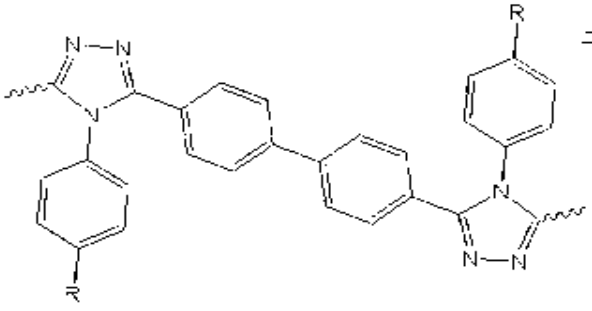
구조 32



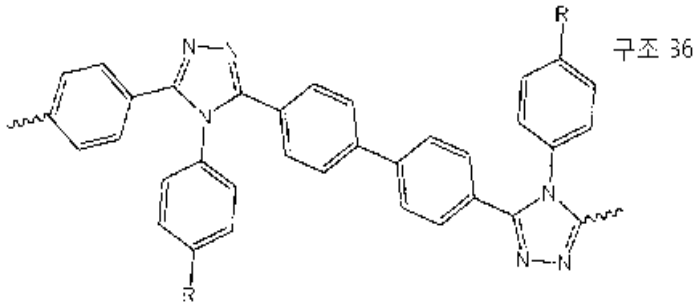
구조 33



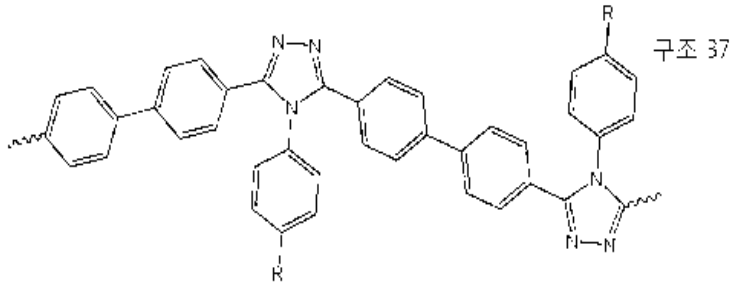
구조 34



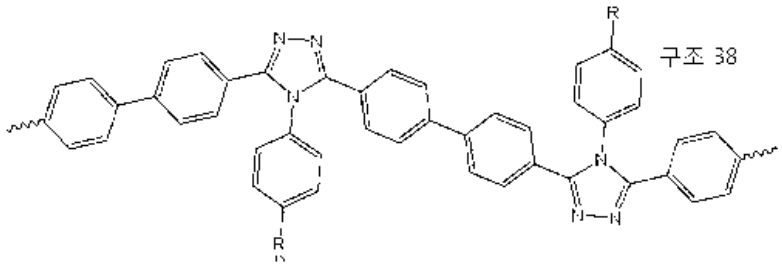
구조 35



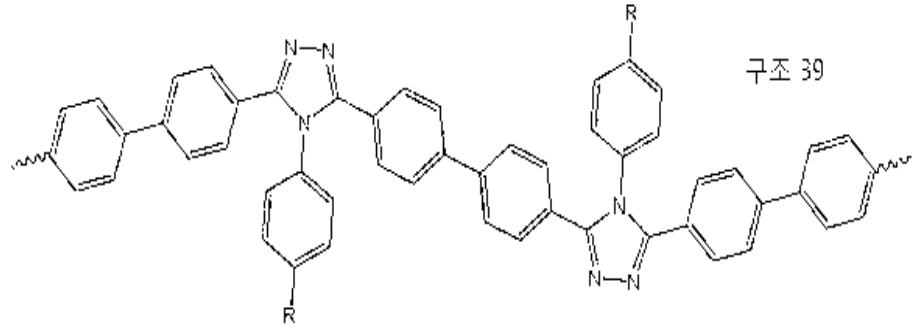
구조 36



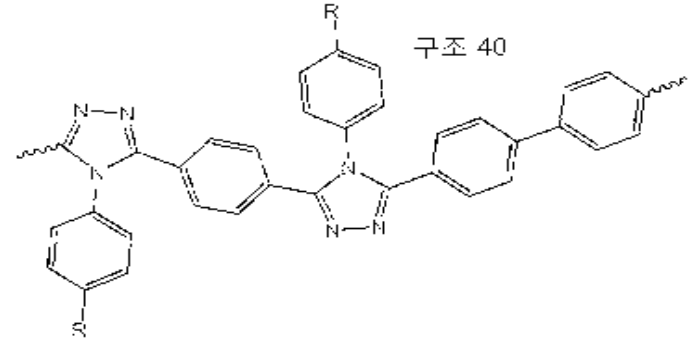
구조 37



구조 38

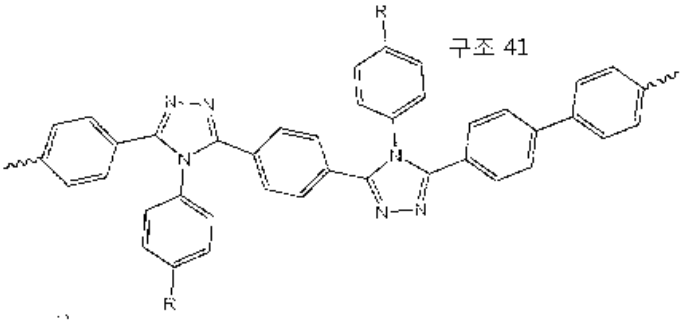


구조 39

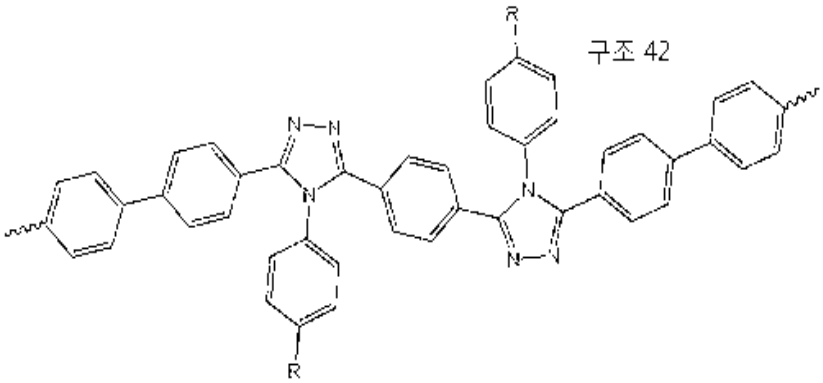


구조 40

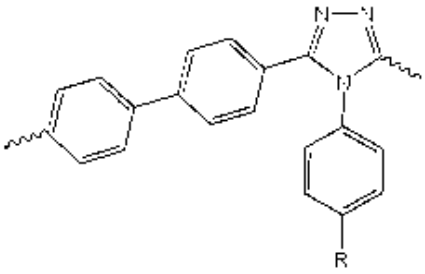
구조 41



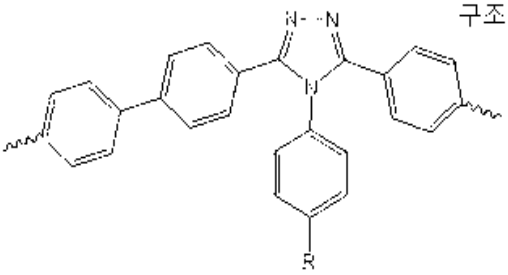
구조 42



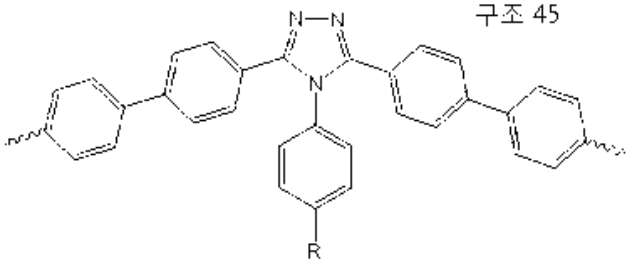
구조 43

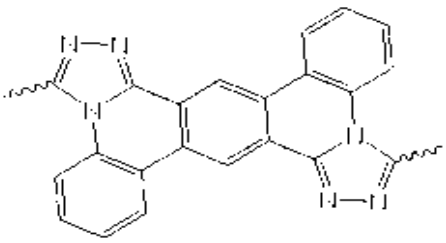


구조 44

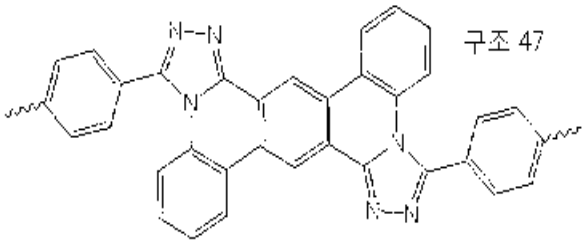


구조 45

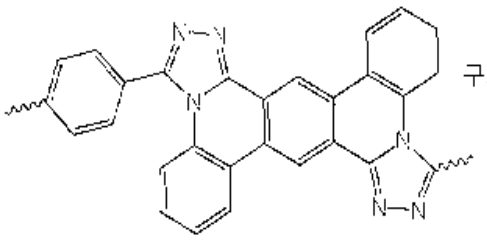




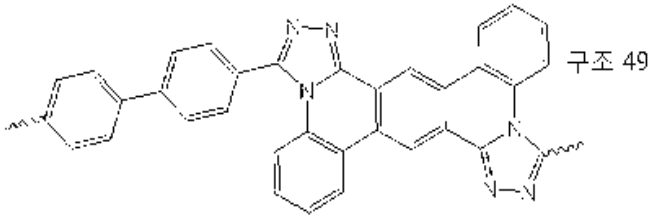
구조 46



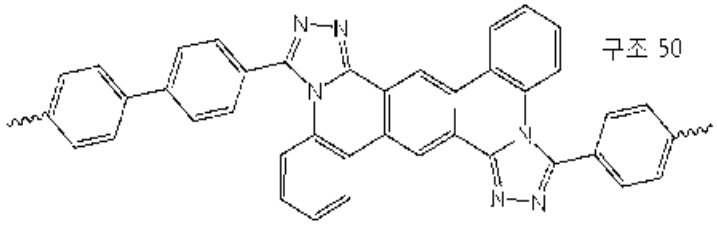
구조 47



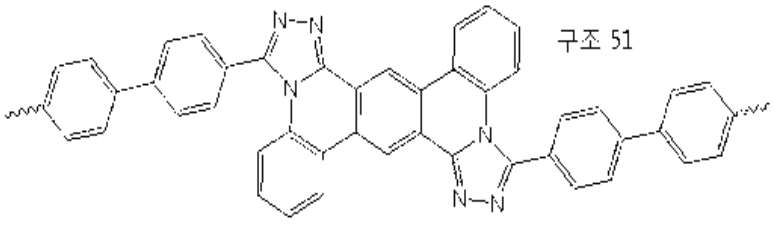
구조 48



구조 49



구조 50



구조 51

여기에서 각각의 F1은 하기로부터 독립적으로 선택될 수 있고,

[0037] 삭제

[0038] 삭제

[0039] 삭제

[0040] 삭제

[0041] 삭제

[0042] 삭제

[0043] 삭제

[0044] 삭제

[0045] 삭제

[0046] 삭제

[0047] 삭제

[0048] 삭제

[0049] 삭제

[0050] 삭제

[0051] 삭제

[0052] 삭제

[0053] 삭제

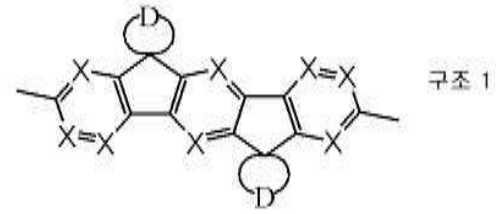
[0054] 삭제

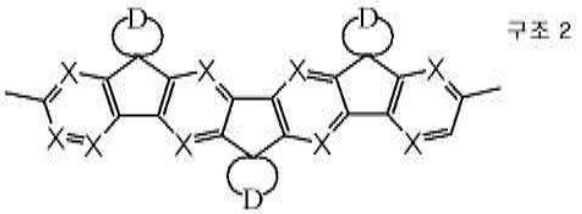
[0055] 삭제

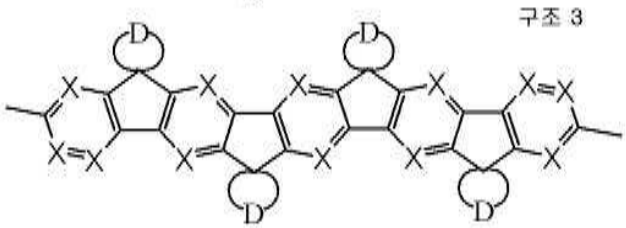
[0056] 삭제

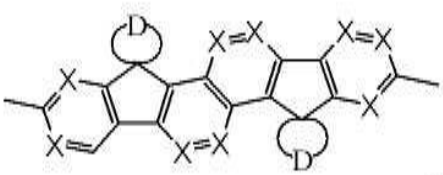
[0057] 삭제

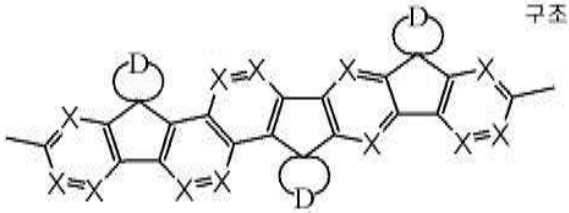
[0058] 삭제

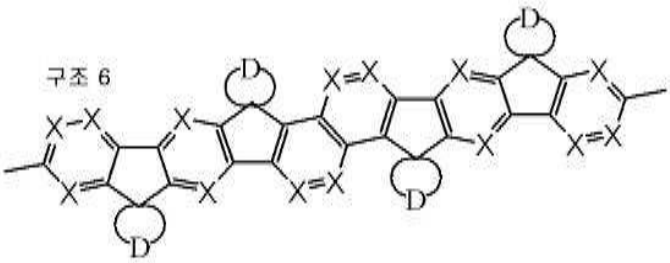






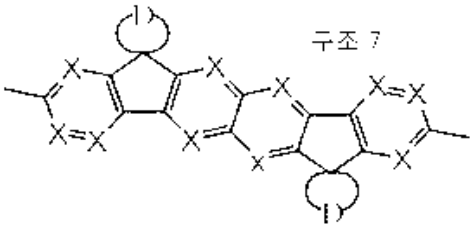




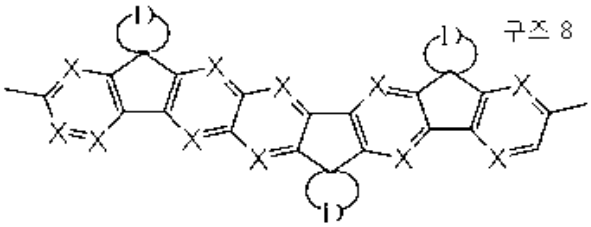


[0059]

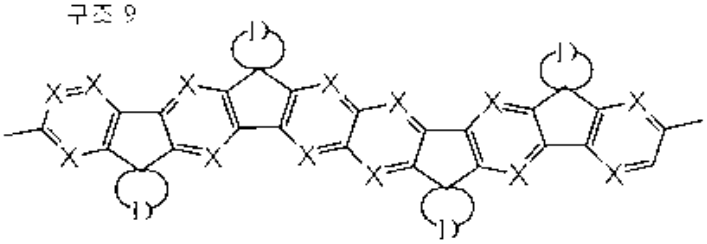
구조 7



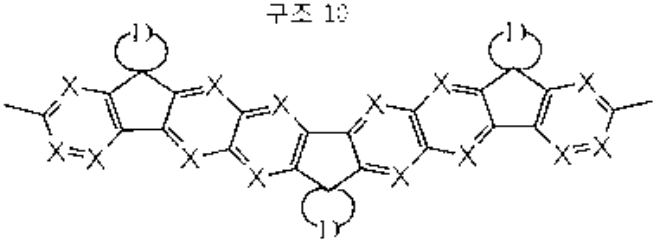
구조 8



구조 9



구조 10



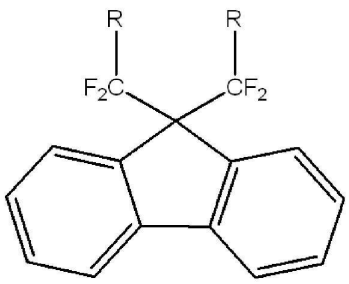
[0060]

[0061] 여기에서, 치환기 는 독립적으로 상기 구조 11내지 27 중 하나일 수 있다.

[0062] 이들 스피로비시클로 및 스피로 재료에서, R은 알킬 기이고, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 이소프로필, sec-부틸, 이소부틸, tert-부틸, 2-아밀, 3-아밀, 2-메틸-2-부틸, 3-메틸-3-아밀, 3-에틸-3-아밀 또는 네오-펜틸로부터 선택될 수 있다.

[0063] 바람직하게, A에 대한 화학식에서 아래첨자 n은 1 내지 6일 수 있고, 바람직하게는 3 내지 6이며, X는 =CH- 또는 =N-으로부터 선택될 수 있다.

[0064] 상기 나타낸 스피로 및 스피로비시클로 구조가 바람직하지만, 이러한 기준을 충족하는 다른 치환기도 가능하다. 예를 들어, 응축된 방향족 고리계에서 플루오렌 고리 잔기 중 하나 이상은 하기 나타낸 바와 같이 치환될 수 있으며,

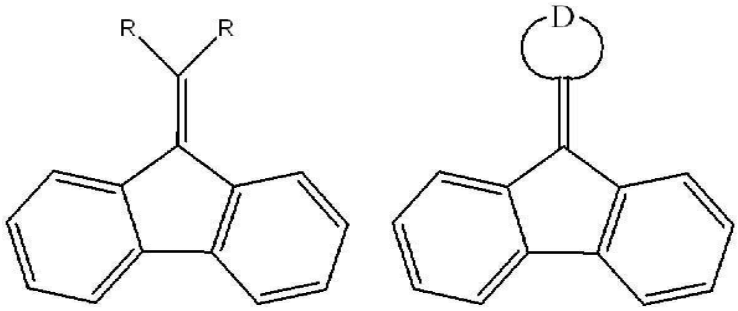


[0065]

[0066] 여기에서, R은 플루오로(트리플루오로메틸 치환기를 만들어 냄), 분지형, 고리형 또는 직쇄형의 알킬 기, 하나

이상의 탄소가 헤테로원자로 치환된 몇 가지의 플루오린 기 또는 알킬 기로 치환된 알킬 기이다.

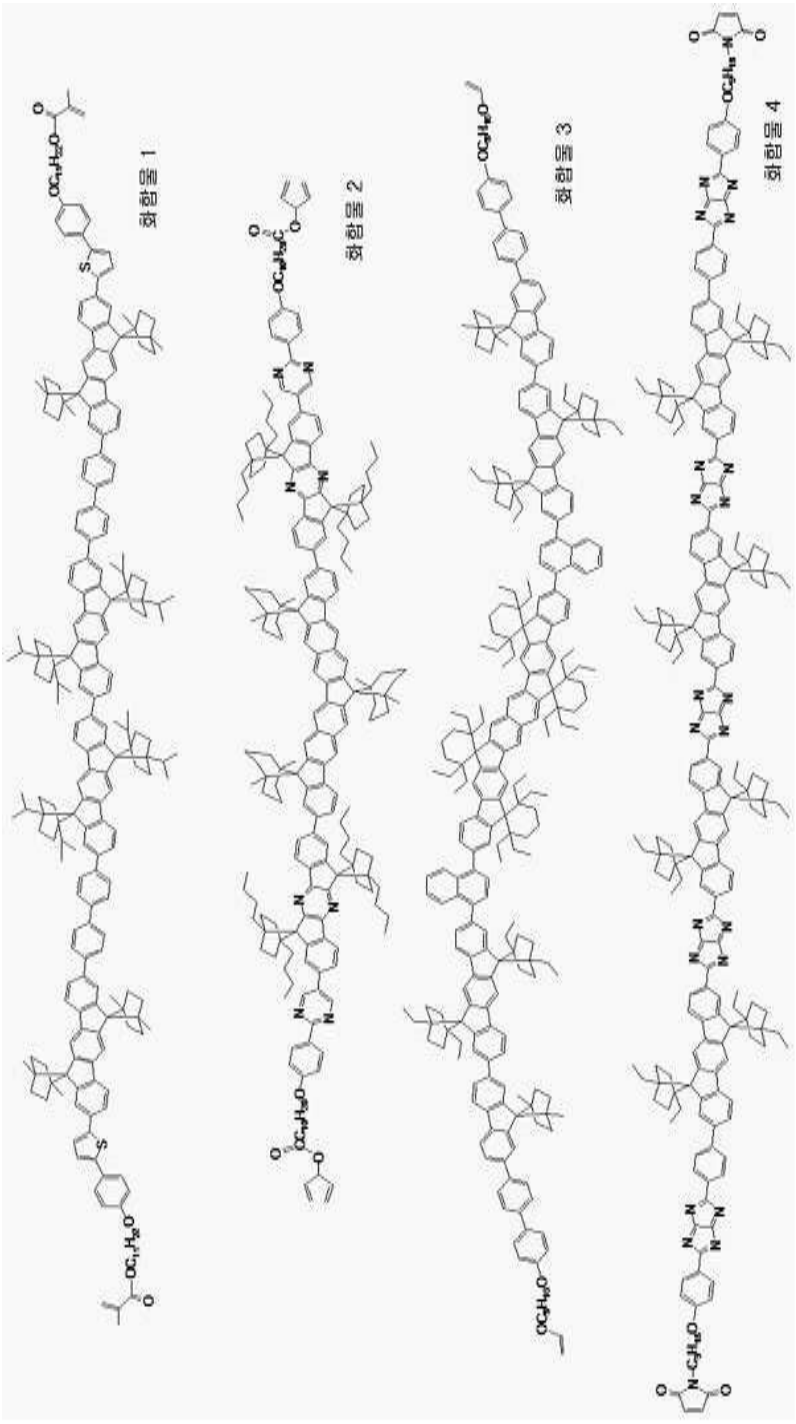
[0067] 대안적으로, 응축된 방향족 고리계에서 하나 이상의 플루오렌 고리 잔기는 하기 나타낸 2개의 예에서 나타낸 바와 같이 치환될 수 있으며,

[0068] 

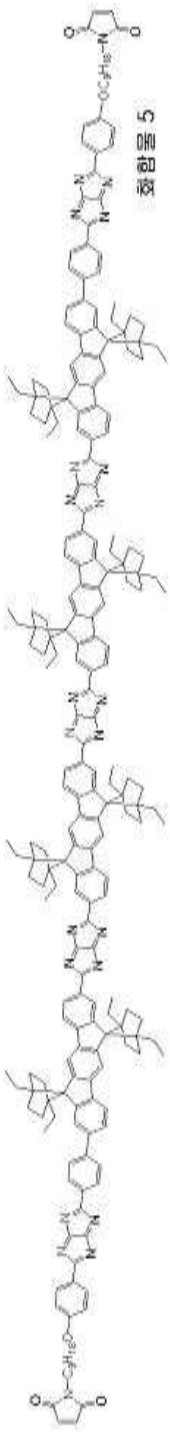
[0069] 여기에서, R은 알킬, 플루오렌 치환된 알킬, 분지형 알킬, 시클로알킬, 또는 하나 이상의 탄소가 헤테로원자로 치환된 알킬이고,

는 상기 나타낸 예와 동일한 의미를 가진다.

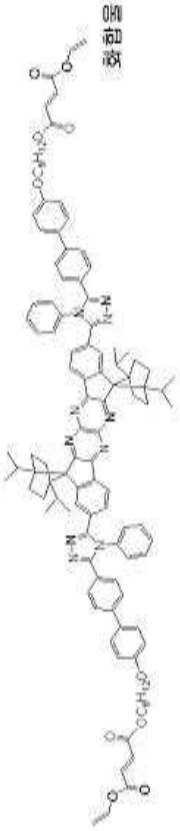
[0070] 본 발명의 이들 재료의 구조 예는 하기와 같다.

[0071] 

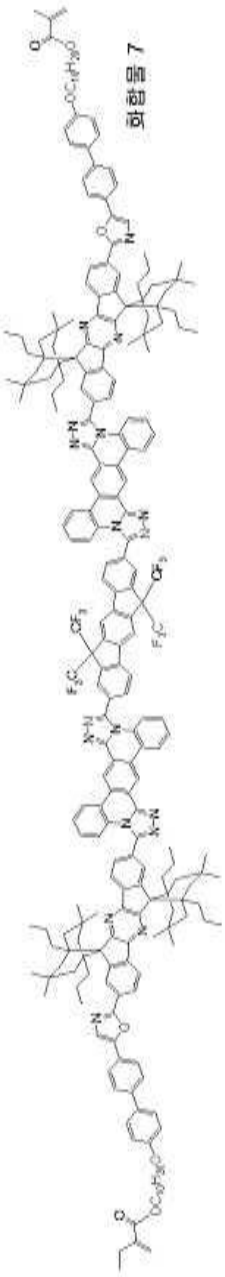
화합물 5



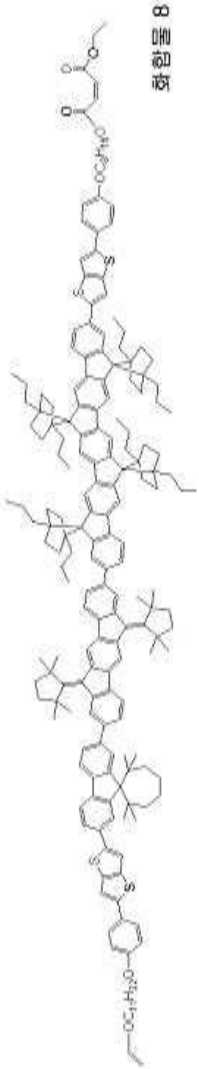
화합물 6



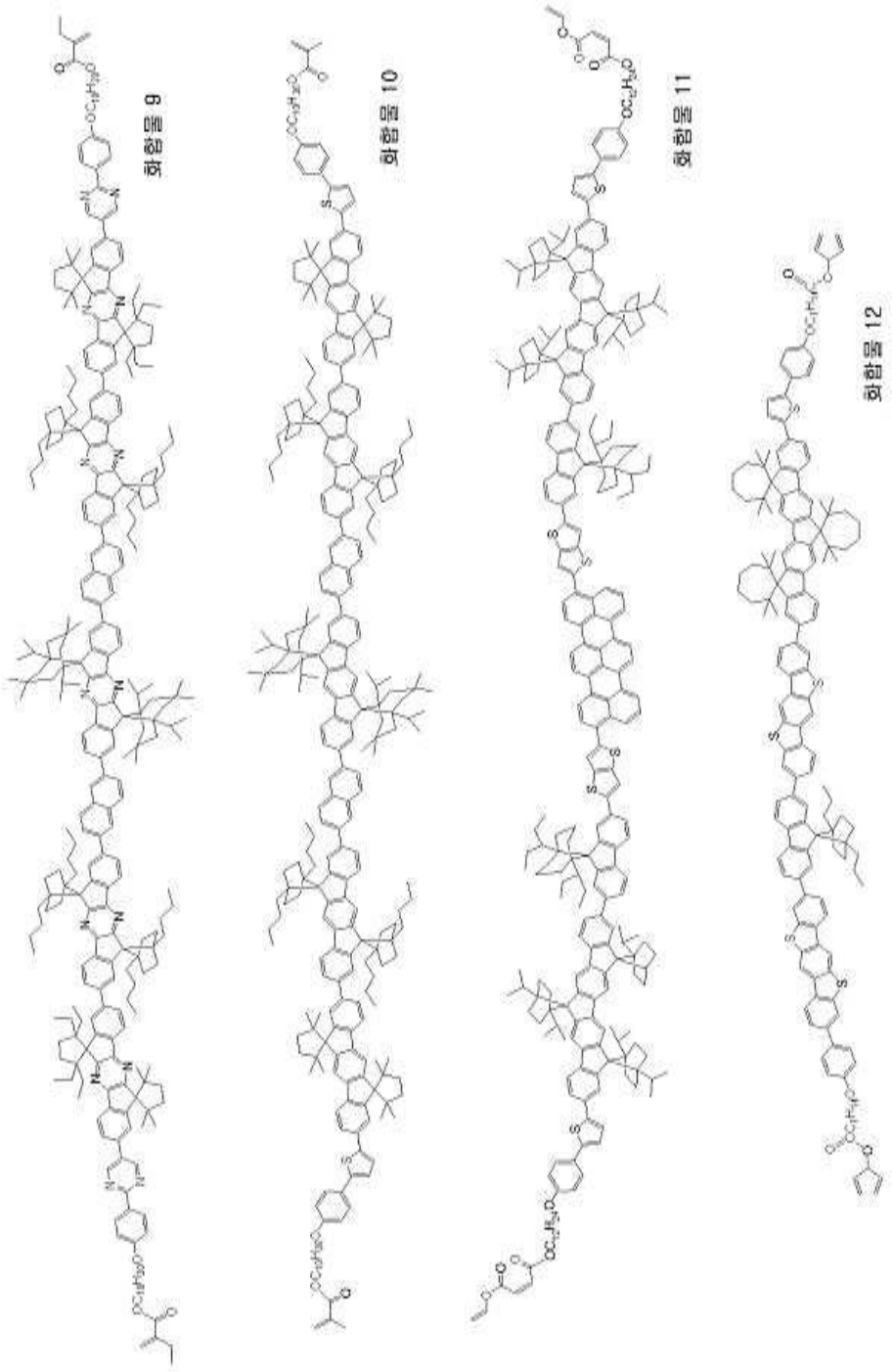
화합물 7



화합물 8



[0072]

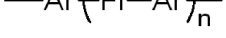


[0073]

[0074] 본 발명은 또한 하기 일반적인 구조의 발광 또는 전하 수송 재료를 포함하며,

[0075] S-A-S

[0076] 여기에서, A는 하기 일반식으로 나타내어지는 방향족 또는 헤테로방향족 디라디칼의 사슬을 포함하는 실질적으로 단단한 막대형의 분자 코어이고,

[0077] 

[0078] 여기에서 Fl은 플루오렌 고리 상 9번 위치에서 지환식 고리계로 치환된 플루오렌-2,7-디일 디라디칼 스피로를 포함하며, 여기에서 지환식 치환기는 플루오렌 고리계 내 9번 위치에서 탄소 원자에 바로 인접한 2개의 탄소 원자 상에서 치환된 수소가 없고,

[0079] 여기에서 Ar은 방향족 또는 헤테로방향족 디라디칼 또는 단일 결합으로부터 독립적으로 선택되며,

[0080] 여기에서 S는 가요성 스페이서 단위이다.

[0081] 재료는 액정일 수 있다.

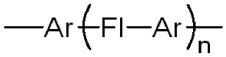
[0082] 'n'은 1 내지 10일 수 있다.

[0083] 재료는 중합체일 수 있다.

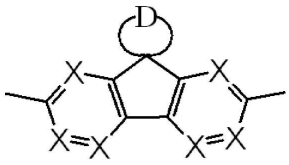
[0084] 본 발명은 또한 하기 일반적인 구조의 발광 또는 전하 수송 중합체를 포함하며,

[0085] T-A-T

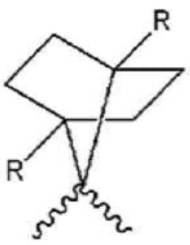
[0086] 여기에서 A는 하기 일반식으로 나타내어지는 방향족 또는 헤테로방향족 디라디칼의 사슬을 포함하는 실질적으로 선형인, 공유 결합된 사슬이고,

[0087] 

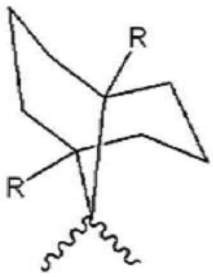
[0088] 여기에서 Ar은 각각 방향족 또는 헤테로방향족 디라디칼로부터 독립적으로 선택될 수 있으며, 1,4-페닐렌, 비페닐-4,4'-디일, 테르펜-4,4''-디일, 나프탈렌-1,4-디일, 티오펜-2,5-디일, 피리미딘-2,5-디일, 페릴렌-3,10-디일, 피렌-2,7-디일, 2,2'-디티오펜-5,5'-디일, 옥사졸-2,5-디일, 티에노[3,2-b]티오펜-2,5-디일, 디티에노[3,2-b:2',3'-d]티오펜-2,6-디일, 티아졸로[5,4-d]티아졸-2,5-디일, 옥사졸로[5,4-d]옥사졸-2,5-디일, 티아졸로[5,4-d]옥사졸-2,5-디일, 티아졸로[4,5-d]티아졸-2,5-디일, 옥사졸로[4,5-d]옥사졸-2,5-디일, 티아졸로[4,5-d]옥사졸-2,5-디일, 2,1,3-벤조티아디아졸-4,7-디일, 또는 이미다조[4,5-d]이미다졸-2,5-디일 디라디칼, 단일 결합, 하기 식의 디라디칼을 포함할 수 있고,

[0089] 

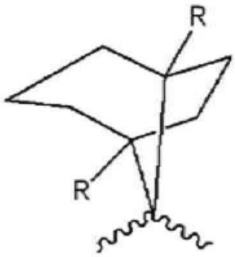
[0090] 여기에서 치환기 는 이 구조의 각각의 존재에 대하여 하기 스피로 또는 비시클로스피로 기 중 하나로부터 독립적으로 선택될 수 있다.



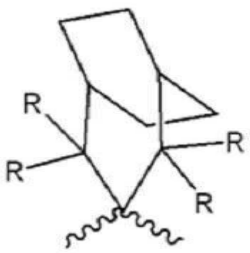
구조 11



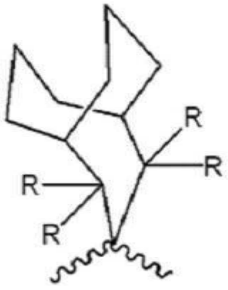
구조 12



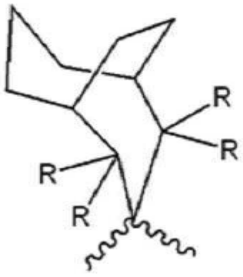
구조 13



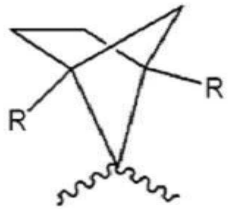
구조 14



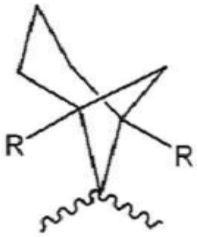
구조 15



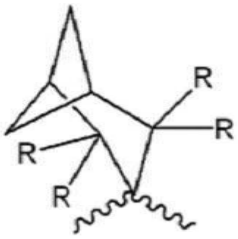
구조 16



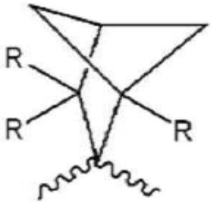
구조 17



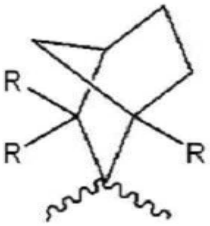
구조 18



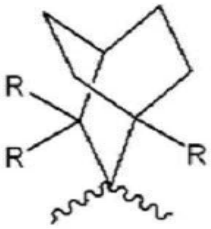
구조 19



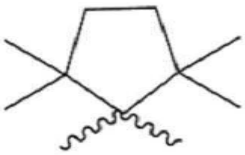
구조 20



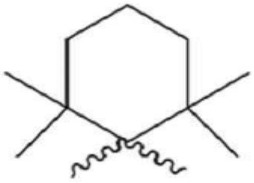
구조 21



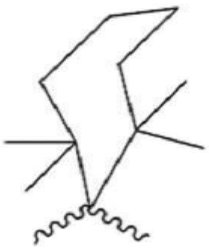
구조 22



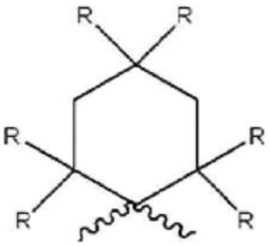
구조 23



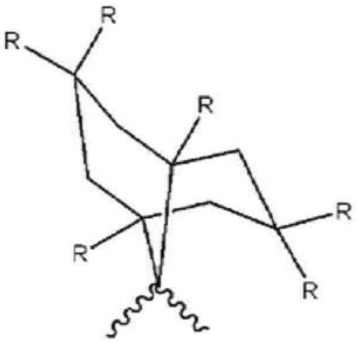
구조 24



구조 25



구조 26



구조 27

이들 스피로비시클로 및 스피로 치환기에서, R은 알킬 기이고, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 이소프로필, sec-부틸, 이소부틸, tert-부틸, 2-아밀, 3-아밀, 2-메틸-2-부틸, 3-메틸-3-아밀, 3-에틸-3-아밀 또는 네오-펜틸로부터 선택될 수 있으며, X는 =CH-, =N-으로부터 독립적으로 선택될 수 있다.

[0091] 삭제

[0092] 삭제

[0093] 삭제

[0094] 삭제

[0095] 삭제

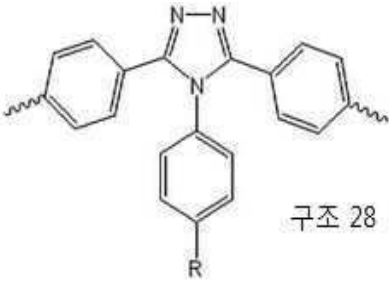
[0096] 삭제

[0097] 삭제

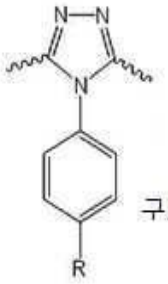
[0098] 삭제

[0099] 삭제

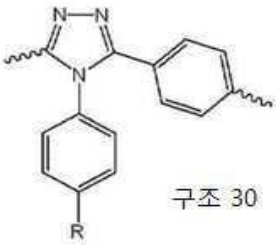
[0100] Ar은 또한 하기 디라디칼로부터 선택될 수 있으며,



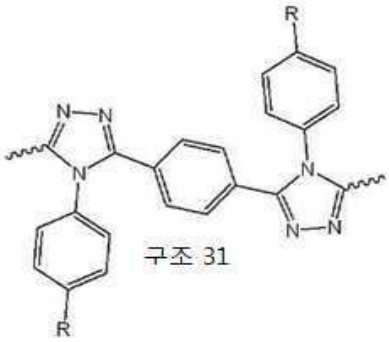
구조 28



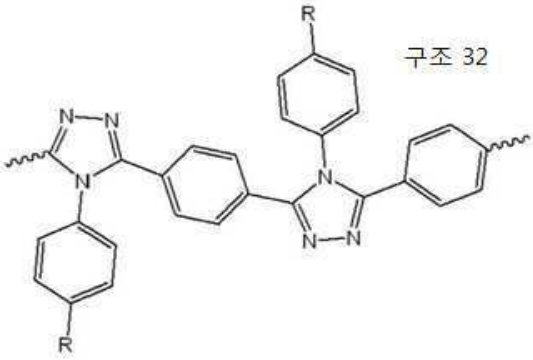
구조 29



구조 30

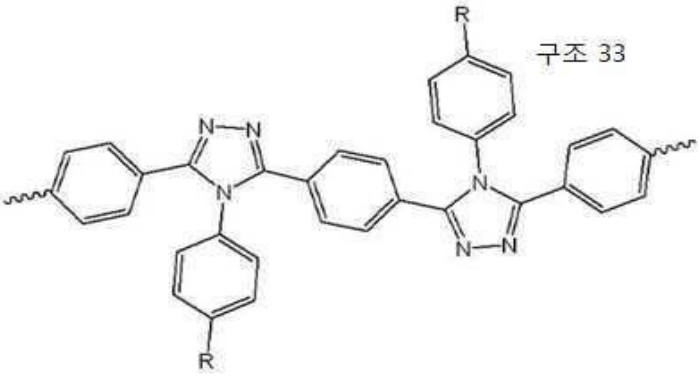


구조 31

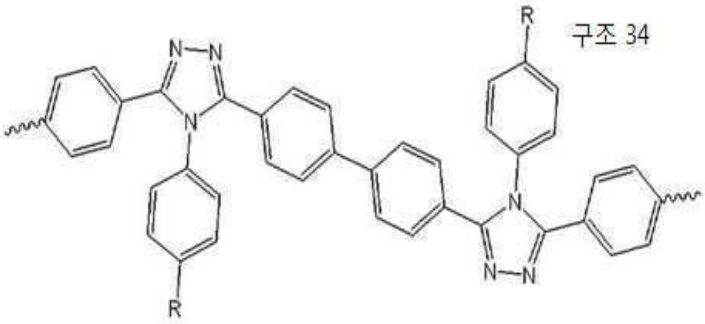


구조 32

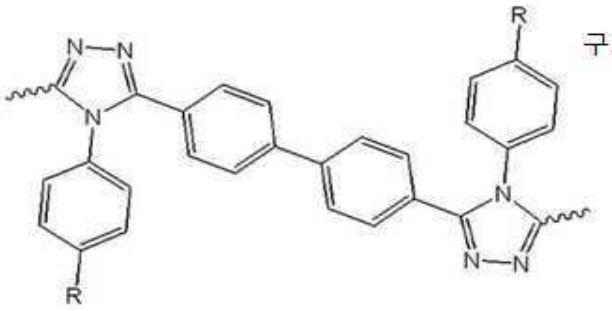
구조 33



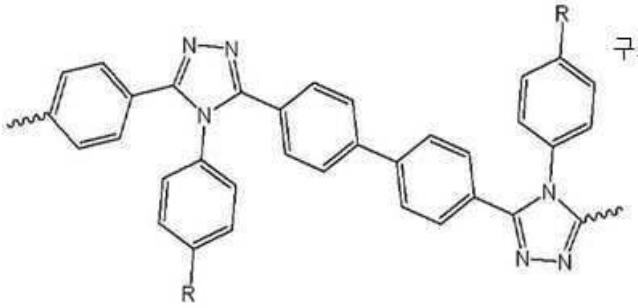
구조 34



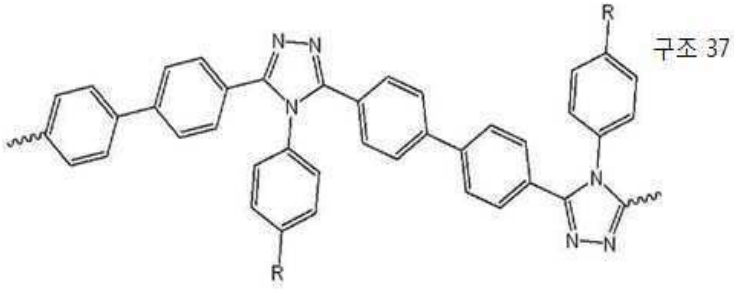
구조 35



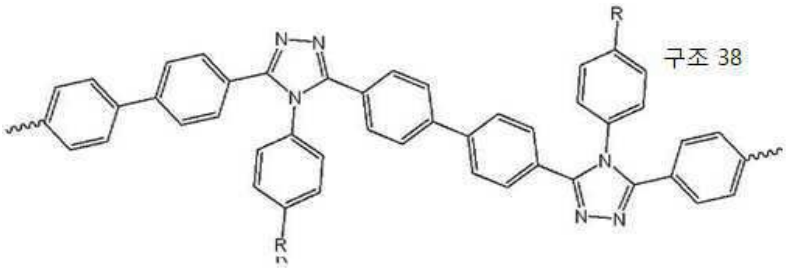
구조 36



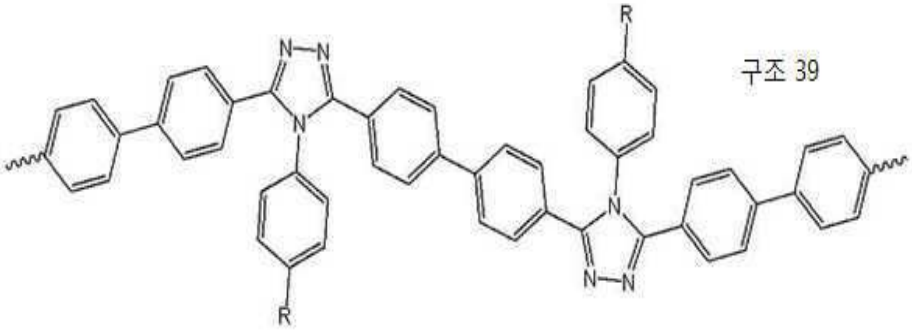
구조 37



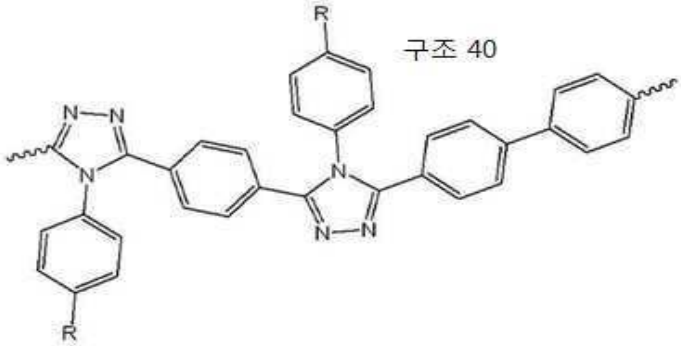
구조 38



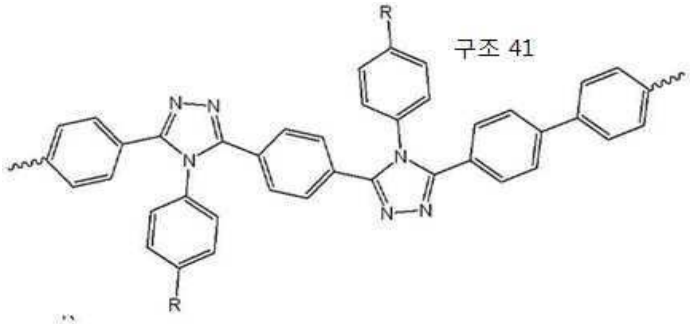
구조 39



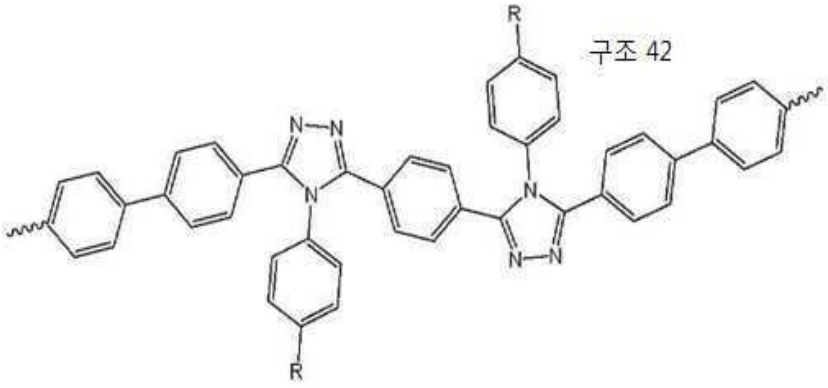
구조 40

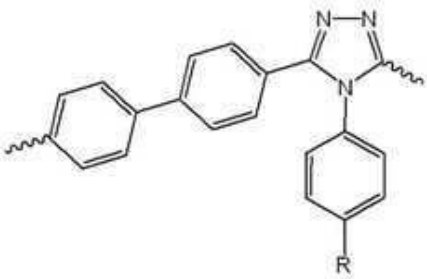


구조 41

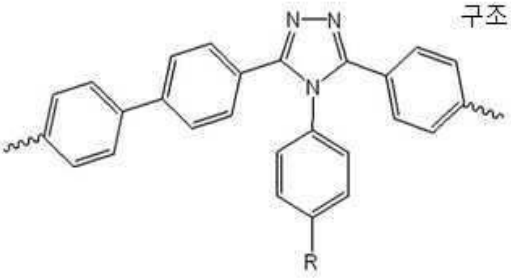


구조 42

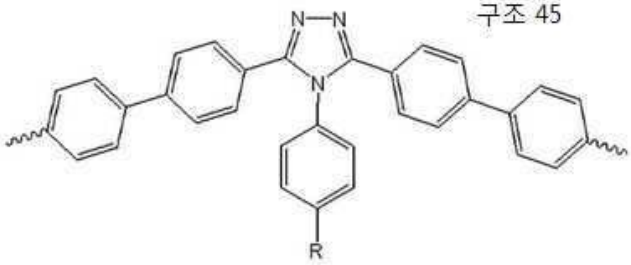




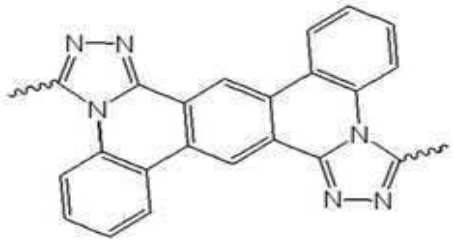
구조 43



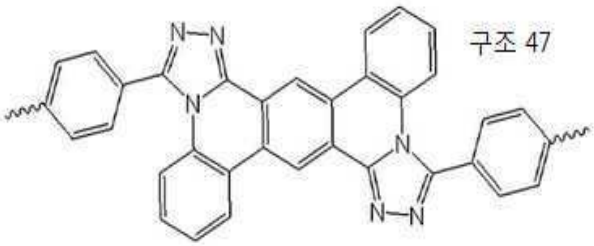
구조 44



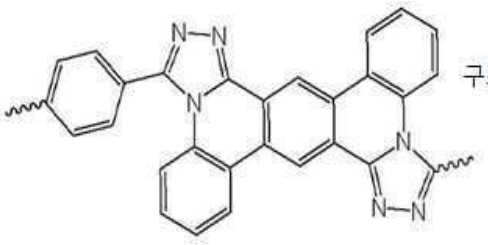
구조 45



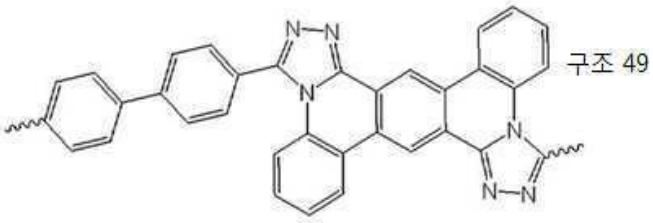
구조 46

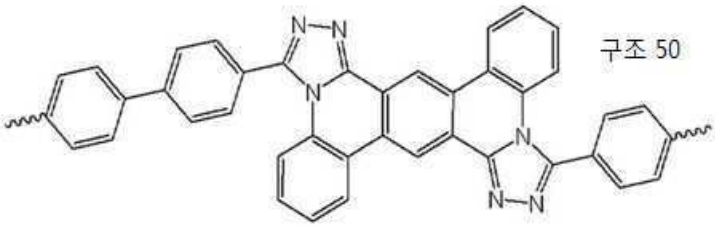


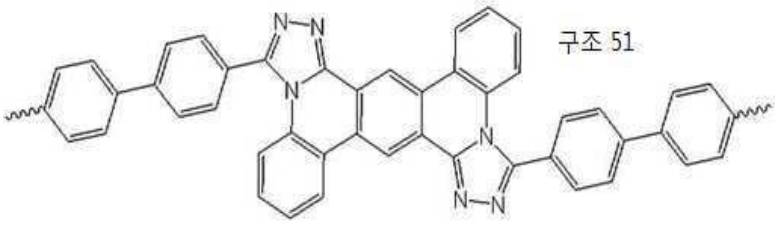
구조 47



구조 48







[0101] 여기에서 각각의 F1은 하기로부터 독립적으로 선택될 수 있고,

[0102] 삭제

[0103] 삭제

[0104] 삭제

[0105] 삭제

[0106] 삭제

[0107] 삭제

[0108] 삭제

[0109] 삭제

[0110] 삭제

[0111] 삭제

[0112] 삭제

[0113] 삭제

[0114] 삭제

[0115] 삭제

[0116] 삭제

[0117] 삭제

[0118] 삭제

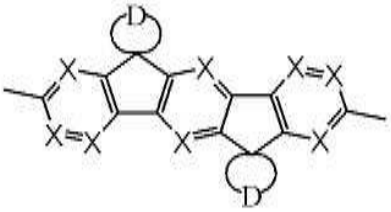
[0119] 삭제

[0120] 삭제

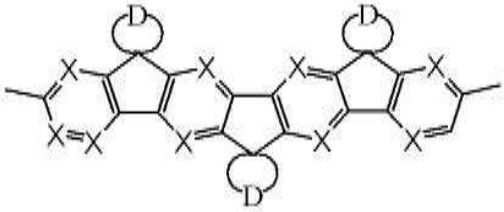
[0121] 삭제

[0122] 삭제

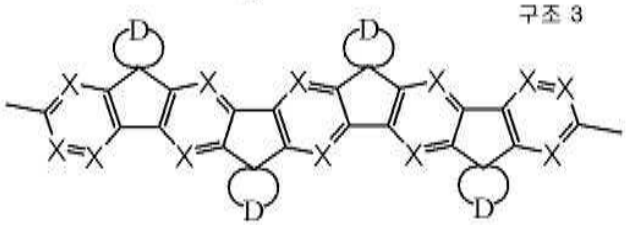
[0123] 삭제



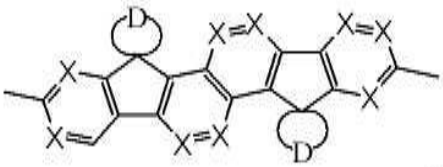
구조 1



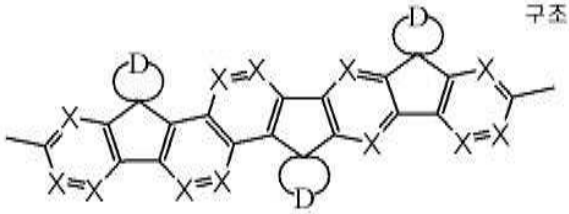
구조 2



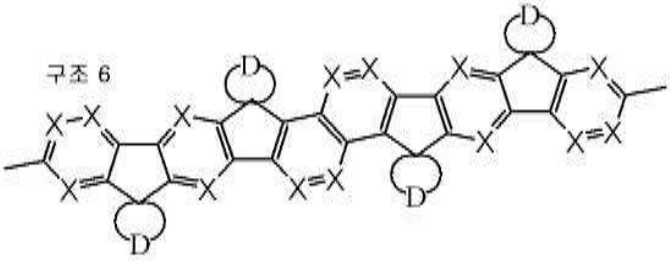
구조 3



구조 4



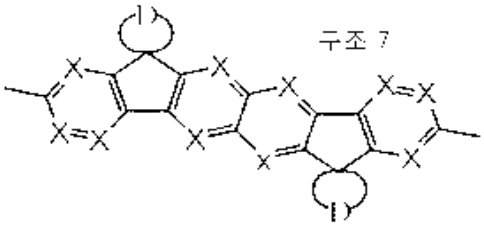
구조 5



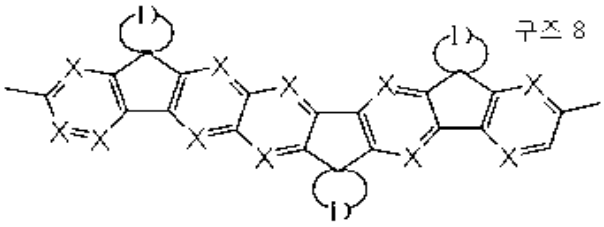
구조 6

[0124]

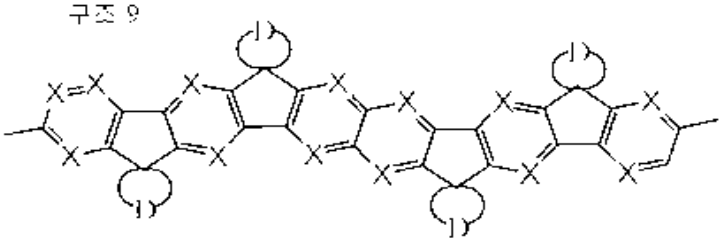
구조 7



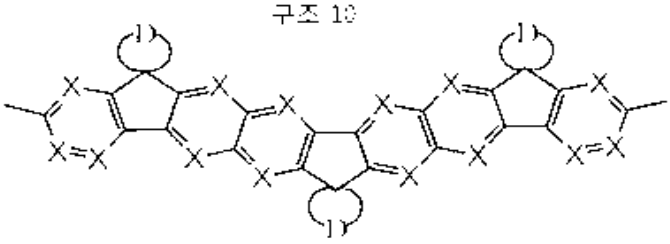
구조 8



구조 9



구조 10



[0125]

[0126] 여기에서, 치환기 는 독립적으로 상기 구조 11 내지 27 중 하나일 수 있다.

[0127] 이들 스피로비시클로 및 스피로 재료에서, R은 알킬 기이고, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 이소프로필, sec-부틸, 이소부틸, tert-부틸, 2-아밀, 3-아밀, 2-메틸-2-부틸, 3-메틸-3-아밀, 3-에틸-3-아밀 또는 네오-펜틸로부터 선택될 수 있다.

[0128] 바람직하게, A에 대한 화학식에서 아래첨자 n은 1 내지 6일 수 있고, 바람직하게는 3 내지 6이며, X는 =CH- 또는 =N-으로부터 선택될 수 있고,

[0129] 여기에서 T는 중합체 사슬 종결 단위이다.

[0130] T는 수소, 할로겐, 아릴, 또는 시아노, 하이드록실, 글리시딜 에테르, 아크릴레이트 에스테르, 메타크릴레이트 에스테르, 에테닐, 에티닐, 말레이미드, 나드이미드, 트리알킬실록시, 또는 트리플루오로비닐 에테르 부분으로 치환된 아릴로부터 독립적으로 선택될 수 있다.

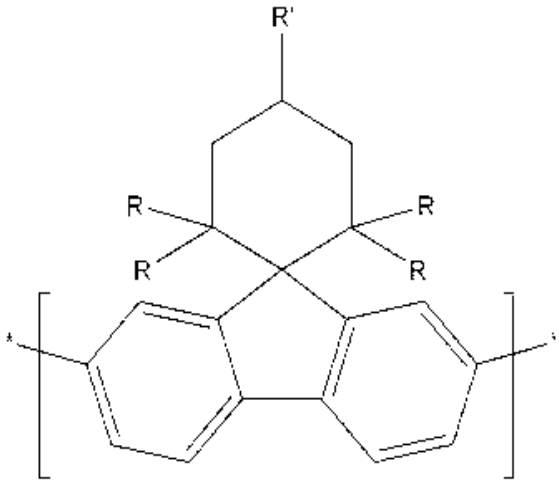
[0131] 상기 기재된 재료의 3차원 모델은 상기 재료에서 플루오렌 9-위치가 직쇄 알킬 기로 치환된 유사한 재료보다 부피가 크지 않음을 나타낸다. 그러므로, 이들 재료 중 네마틱 상(nematic phase)은 이전 재료에서와 같이 안정하여야 한다.

[0132] 상기 재료의 바람직한 실시형태는 모든 R기가 알킬인 것이다. 이는 이들 재료가 플루오렌 고리계에 대하여 수소 치환기 α가 없기 때문이다. 이들 위치에서 수소는 특성상 적어도 부분적으로 벤질이고 9-위치에서 산화에 관여된 것으로 생각된다. 또한, 이들 바람직한 완전히 알킬로 치환된 재료에서, 9-위치는 반응성 종에 의한 공격으로부터의 입체 차폐(steric shielding)가 가장 크다.

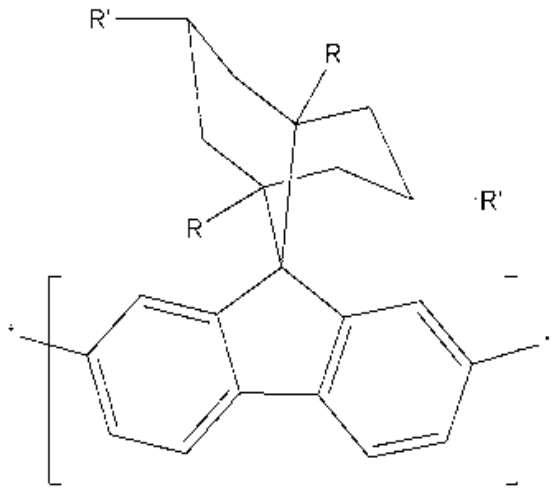
[0133] 또한 스피로[시클로펜탄-1,9'-플루오렌]-2',7'디일(구조 22), 스피로[시클로헥산-1,9'-플루오렌]-2',7',디일(구조 23), 스피로[시클로헵탄-1,9'-플루오렌]-2',7'디일(구조 24), 스피로[비시클로[2,2,1]헵탄-7,9'-플루오렌]-2',7'디일(구조 10), 또는 스피로[비시클로[3,3,1]노난-9,9'-플루오렌]-2',7'디일(구조 11) 디라디칼이 이들의 대칭성 및 합성의 용이성 때문에 본 발명의 일반식에서 Fl 단위로서 선택되는 것이 바람직하다.

[0134] 또한, 모든 R 치환기는 동일한 것이 바람직하다. 이는 R 치환기가 상이한 분자는 이들 재료에 대해 필요로 하는 전자 수준의 정제를 복잡하게 할 위치 또는 입체이성질체현상(stereoisomerism)을 나타낼 것이기 때문이다.

[0135] 디라디칼 Fl을 구조 10 내지 26과 함께 포함하는 본 발명의 화합물은 9-위치에서 플루오렌 고리 구조와 연결되는 지환식 및 비시클로지방족(bicycloaliphatic) 고리 상 위치(이미 R 기로 치환된 위치 이외의 위치)에서 추가로 치환될 수 있다. 그러나, 이들 다른 위치에 치환기가 있는 화합물은, 이들 화합물의 정제를 복잡하게 할 기하학적 또는 입체이성질체현성에 대한 가능성 때문에 덜 바람직하다. 예외적으로 하기 구조를 가지는 화합물이 유용하며,



[0136] 및



[0137] 삭제

[0138] 여기에서, R은 상기와 같고 R'은 바람직하게 사슬 길이가 CH_3- 내지 C_5H_{11}-의 범위인 알킬로부터 선택되는 것이다.

[0139] 삭제

[0140] 본 발명의 이미터 재료는, A에 대한 화학식에서 아래첨자 n이 3 내지 6인 것이 바람직하다. 낮은 n 값은 더 낮은 발광 효율을 가지는 분자를 야기한다. 높은 n 값은 합성하기에 더 어렵고/어렵거나 정제하기에 더 어려운 분자를 야기한다.

[0141] 본 발명에 따른 재료는 함께 혼합되어 액정 혼합물을 형성할 수 있다. 이는 재료의 특성을 최적화하는 관점으로부터 매우 유리할 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 각각의 화합물은 녹는점(등축(monotropic) 액정 상)보다 훨씬 아래의 등방성(isotropic) 액체 전이 온도에 대한 액정을 가질 수 있다. 소자 제작 적용에서, 이는 충분히 열역학적으로 불안정한 재료의 유리질 또는 과냉각 액체 필름을 야기하여 상기 필름 내 결정화의 위험 및 이후의 유용한 전자 특성의 파괴로 이어질 수 있다. 다수의 구성 요소 화합물을 함께 혼합하는 것은 액정 미만으로 생성된 혼합물의 녹는점을 등방성 액체 전이 온도로 떨어뜨리거나 또는 적어도 충분히 결정화를 억제하여 이러한 문제점을 제거할 수 있다.

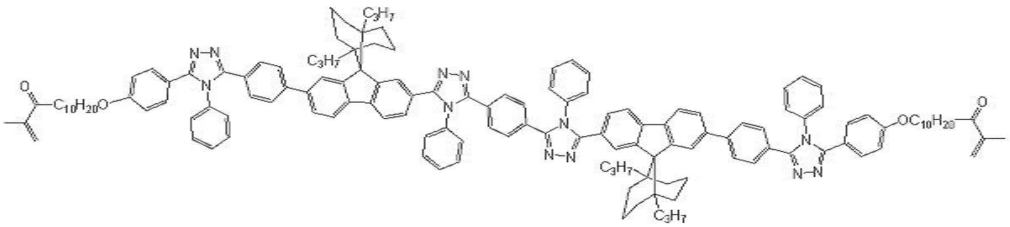
[0142] 본 발명의 재료의 혼합물의 사용의 다른 이점은, 다른 매우 유용한 소자 적용 특성을 가진 재료를 순수한 재료로서 사용할 수 없게 만드는 특정 특성을 가지지만, 상기 재료가 사용될 수 있게 하는 것이다. 예를 들어 네마틱 액정 구조를 가지는 발광 중합체 필름을 제조하는 것이 바람직할 수 있다. 본 발명의 화합물은 매우 높은 효율의 발광 재료일 수 있고 다른 유용한 특성을 가질 수 있지만, 동시에 네마틱 액정 상보다는 스메틱 액정 상을 가지는 것으로 발견될 수 있다. 네마틱 상을 가지는 본 발명의 다른 화합물의 혼합물로 상기 바람직한 화합물을 용해시킴으로써, 네마틱 상 구조와 조합된 제1의 매우 바람직한 재료의 발광 특성을 가지는 혼합물이 생길 수 있다.

[0143] 또한 종종 유기 발광성 재료에 의해 방출된 빛의 자기 흡수를 감소시키는 것이 바람직하다. 유기 발광성 재료의 광흡수(spectral absorbance) 및 방출 밴드는 다양한 재료에서 더 크거나 또는 더 낮은 정도로 겹치므로 이러한 자기 흡수가 일어난다. 예를 들어 색소 레이저의 분야에서 잘 알려진 이러한 문제점에 대한 해결책은 발광성 용질 보다 더 짧은 파장에서 빛을 흡수하는 호스트(host)에 발광성 재료를 용해시키는 것이다. 예를 들어 1% 내지 2%로 용액이 희석되면, 발광성 용질의 자기 흡수는 거의 완전히 억제된다. 본 발명의 다양한 화합물의 용이한 상호 혼화성은 이러한 유형의 용액의 제조를 매우 용이하게 만든다.

[0144] 유기 발광 소자 적용에서, 호스트 재료로부터 발광성 용질 재료로의 용이한 여기 에너지 이동이 있을 것이 필요하다. 이는 전하 운반체(전자 및 정공(hole))가 호스트 매체체를 통하여 운반되어 재결합하여 빛을 발하는 엑시톤(전기적으로 여기된 분자 오비탈 상태)을 형성하여야 하기 때문이다. 주로 구성 성분인 호스트 분자로 구성된 혼합물에서, 이러한 재조합 및 엑시톤 형성은 주로 호스트 분자에서 일어날 것이다. 그러면 여기 에너지는 호스트 분자로부터 발광성 용질 분자로 이동되어야 한다. 호스트 재료의 스펙트럼 발광성 방출 밴드(들)가 발광성 용질의 흡수 밴드와 겹치는 것이 이러한 에너지 이동의 필요조건이다. 따라서, 본 발명의 중요한 양태는 구성 요소간에 이러한 스펙트럼 관계를 가지는 본 발명의 화합물의 혼합물의 제조이다. 예를 들어, 스펙트럼의 청색 영역에서 방출하는 화합물 28은 녹색 빛 이미터(light emitter)인 화합물 27에 대한 호스트로서의 역할을 할 수 있다. 화합물 28에서 5% 화합물 27의 용액의 UV 유도 가교결합에 의하여 제조된 중합체 필름은 순수한 화합물 27의 UV 가교결합에 의하여 제조된 필름보다 화합물 27에 의하여 방출된 녹색 빛의 상당히 더 적은 자기 흡수를 나타낼 것이다.

[0145] 본 발명의 다른 양태는 양성 및 음성 전하 운반체의 소자의 전기적으로 활성인 영역 또는 층으로의 균형잡힌 수송 및 삽입에 관한 것이다. 예를 들어, 통상적인 (종래 기술) OLED 구성이 도 1에 나타나 있다. 이 소자는 보통 유리 기판 상에 전도성 인듐-주석 산화물 필름으로서 제조된 애노드(110), 정공 수송층(130)으로의 용이한 정공의 주입을 지지하는 정공 주입층(120)을 포함한다. 본 발명의 경우에서 정공 수송층(130)은 정공에 대한 높은 이동성을 위하여 선택된 본 발명의 화합물 또는 본 발명의 화합물의 혼합물의 중합된 필름이다. 상기 소자는 추가로 전자 수송층(150)으로 전자를 주입하는 캐소드(160)로 이루어진다. 캐소드(160)와 전자 수송층(150) 사이에 선택적인 전자 주입층(도시하지 않음)이 있을 수 있다. 전자 수송층(150) 및 정공 수송층(130)은 각각 전자 및 정공을 발광층(140)으로 삽입하고, 발광층에서 전자 및 정공은 재조합하여 엑시톤, 그 다음에 빛을 형성한다. 본 발명의 전자 수송층(150)은 전자에 대한 높은 이동성을 위하여 선택된 본 발명의 화합물 또는 본 발명의 화합물의 혼합물의 중합된 필름이다. 본 발명의 발광층은 또한 본 발명의 화합물 또는 본 발명의 화합물의 혼합물의 중합된 필름이다.

[0146] 전자 수송층(150)의 추가적인 기능은 (140)으로 주입된 정공이 (140)의 다른 측의 밖으로 계속 나아가서 결국 비발광 사건에서 캐소드의 표면에서 전자와 재조합하는 것을 방지하는 것이다. 이를 달성하기 위하여, (150)의 재료(들)는 발광층(140)의 HOMO(최고준위 점유 분자궤도) 에너지 수준에 비하여 상당히 낮은 HOMO 에너지 수준을 가지도록 선택된다. (140)의 재료에 대해서는 진공 하에서 약 5.25eV인 것과 대조적으로, 보통은 진공 하에서 약 6.5eV(전자볼트)이다. 결과는 정공이 (150)으로 들어가는 것을 방지하는 매우 높은 에너지 장벽이 있다는 것이다. 이러한 유형의 전자 수송층 재료는 정공 차단이라고 한다. 정공을 차단하는, 본 발명의 전자 수송 반응성 메조겐 재료는 하기와 같다.



구조 37

[0147]

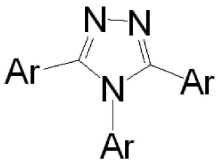
[0148] 이러한 재료는 다음의 유형인 것으로 볼 수 있으며,

[0149] B—S—A—S—B

[0150] 여기에서 A는 다음의 구조를 가지고,

[0151] —Ar(—Fl—Ar)$_n$—

[0152] 상기한 바와 같지만, 여기에서 Ar은 3,4,5-트리아릴 치환된 1,2,4-트리아졸을 포함한다:

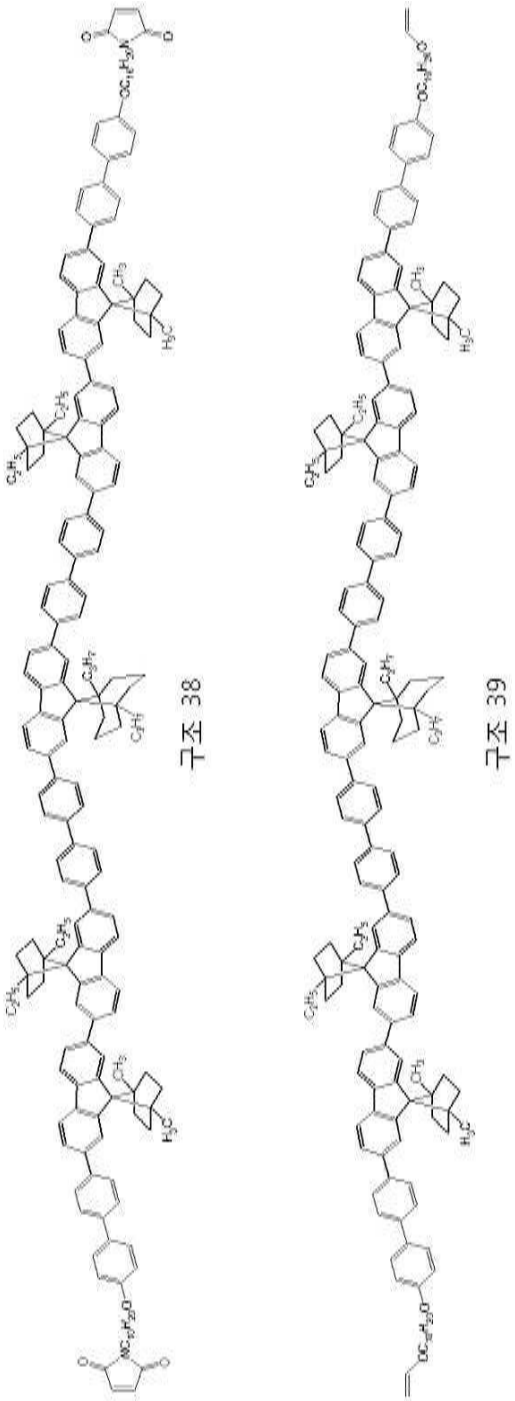
[0153] 
.

[0154] 재료 내에서 전자 및 정공 이동성이 거의 동일하다면, 소자(100)의 발광층(140)은 최적으로 실행될 것이다. 유감스럽게도 본 발명에 따른 가장 우수한 발광 재료의 대부분은 전자 이동성보다 정공 이동성이 상당히 더 높다. 그러나, 본 발명의 재료의 혼합물을 생성하는 능력은 화합물 37 및 유사 화합물이 본 발명의 발광 재료로 혼합되어 정공 이동성과 전자 이동성이 실질적으로 동일한 혼합물을 형성하게 할 수 있다. 그 후 이들 혼합물은 UV 노출에 의하여 중합되어 최적화된 발광층을 형성할 수 있다.

[0155] 본 발명의 재료의 혼합물을 사용하는 또 다른 이점은 반응성 메조겐 재료의 혼합물의 사용을 허용하는 것이며, 여기에서 이온 또는 자유 라디칼 개시에 반하여 광개시된(photoinitiated) 전자 공여체-전자 수용체의 상호작용이 중합을 개시하는데 사용된다. 이는 메타크릴레이트계 시스템보다 (수명의 관점에서) 훨씬 더 안정한 반응성 메조겐 재료를 만들어낼 수 있으며, 동시에 낮은 UV 가교결합성 플루엔스(fluence)를 유지할 수 있다. 이들 혼합물에서, 반응성 메조겐 재료 중 적어도 하나는 전자 풍부 가교결합성 기로 치환되지만, 적어도 하나의 다른 구성 성분인 반응성 메조겐 재료는 전자 결핍 가교결합성 기로 치환된다. 상기 재료 상에서 자외선을 방사하는 것은 일부 반응성 메조겐 분자 상의 전자 결핍 가교결합성 기를 전기적 여기 상태로 촉진한다. 여기 상태, 즉 전자 결핍 가교결합성 기는 그 다음 공중합 가교결합성 반응을 개시하는 다른 반응성 메조겐 분자 상의 전자 풍부(전자 공여체) 가교결합성 기로부터 전자를 분리해낸다. 광중합의 이러한 방식의 설명은 예를 들어 문헌 ["Photoinitiated radical polymerization of vinyl ether-maleate systems", Polymer **38**, (9) pp. 2229-37 (1997); 및 "Co-Polymerization of Maleimides and Vinyl Ethers: A Structural Study", Macromolecules **1998**, (31) pp. 5681-89]에서 찾아볼 수 있다.

[0156] 전자 결핍 가교결합성 기는 말레이미드, 말리에이트, 푸마레이트 및 다른 불포화 에스테르를 포함한다. 전자 공여체 군은 비닐 에테르, 1-프로페닐 에테르 및 다른 유사한 알케닐 에테르를 포함한다. 이들과 같은 혼합물은 각각의 성분이 뛰어난 수명과 함께 열적으로 그리고 광화학적으로 안정하다는 점에서 유리하다. 그러나, 상기

재료가 조합될 때, 혼합물은 높은 광화학적 민감도를 가지고 가교결합에 대하여 비교적 적은 UV 양만을 필요로 한다. 전자 결핍 가교결합성 기 및 전자 공여체 가교결합성 기를 모두 함유하는 본 발명의 반응성 메조겐 혼합물의 예는 화합물 38 및 화합물 39의 50:50 혼합물이다. 이러한 유형의 혼합물은 이러한 예에서의 경우와 같이 동일한 분자 코어 구조를 가지는 구성 성분을 함유할 필요가 없다.



구조 38

구조 39

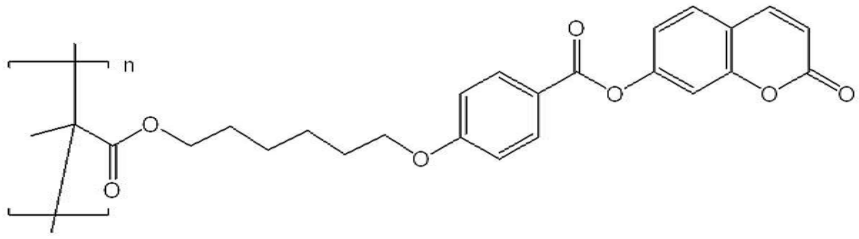
[0157]

[0158] 예시적인 OLED 소자(100)는 하기와 같이 제작될 수 있다. 인듐-주석 산화물 코팅된 유리의 기판(30옴/평방)은, 기판 상에 포토레지스트를 코팅하는 단계, 포토마스크를 통해 자외선 노출로 포토레지스트를 패터닝하는 단계, 재료를 현상하는 단계, 및 그 후에 20% HCl/5% HNO_3으로 ITO를 에칭하는 단계의 표준 공정으로 픽셀 또는 다중 픽셀 패턴으로 패터닝된다. 포토레지스트는 ITO로부터 분리하고, ITO는 탈이온수로 세정하며, 그 다음 산소 플라즈마로 세정한다. 정공 주입층(120)은 패터닝된 ITO 위의 기판 유리 상으로 H.C. Starck 사(GmbH.)로부터 입수가능한 Baytron P(AI 4083) 폴리에틸렌 디옥시티오펜 폴리스티렌 술포네이트(PEDT/PSS)의 1.6% 수용액을 스핀 코팅함으로써 형성한다. 그 후에 기판은 120℃에서 굽는다. 그 다음 클로로포름 내 화합물 34의 0.75% 용액은 PEDT/PSS 상으로 스핀코팅하여 정공 수송층(130)을 형성한다. 재료는 50℃에서 30분 동안 건조하고 90℃에서 1

분 동안 어닐링한다. 그 후에 재료는 30줄/cm^2의 플루엔스에서 아르곤 이온 레이저로부터의 351nm 복사를 사용하여 광경화한다. 그 후에 발광층(140)은 0.40% 화합물 37, 0.35% 화합물 35 및 0.05% 화합물 36으로 이루어진 클로로포름 용액을 층(130) 상에 스핀 코팅함으로써 형성한다. 이러한 층은 층(130)에서와 동일한 방법으로 건조하고 가교결합성 UV 노출에 노출시킨다. 그 다음 전자 수송층(150)은 층(140) 상에 화합물 37의 0.75% 클로로포름 용액을 스핀코팅함으로써 형성한다. 이 층은 그 다음에 앞선 층에서와 동일한 방법으로 건조하고 광경화한다. 마지막으로 알루미늄 캐소드는 층(150) 상에 진공 증착되어 도면에 나타낸 소자(100)을 만들어낸다.

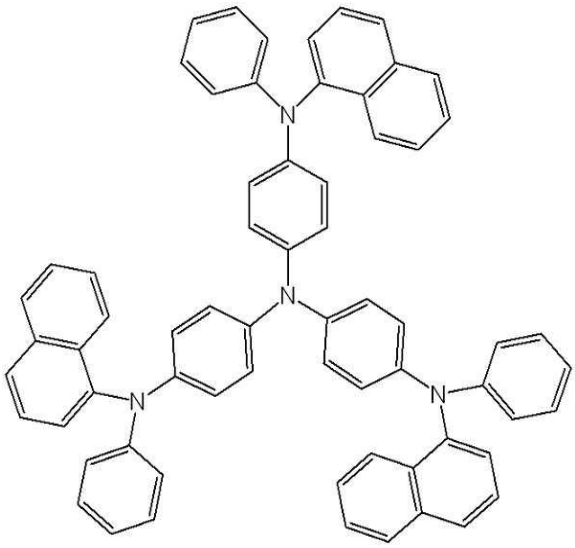
[0159] 종래 기술을 사용함으로써 액정 광배향 재료를 도 2에 나타낸 바와 같은 소자(100)로 삽입하는 것이 가능하다. 이러한 새로운 소자(200)에서, 정공 수송 광배향층(210)은, 정공 주입층(130)이 광가교결합(photocrosslinking)에 의해 형성된 스핀코팅된 액정층에서 분자의 분자 장축을 정렬한다. (130) 내의 정렬은, 상기 층을 형성하는 중합체 매트릭스 내 액정 분자 코어 단위의 장축이 서로 및 소자 기판 표면에 대해 평행이 되게 한다. (130) 내 분자 코어의 균일한 정렬은 발광층(140)이 정렬 템플릿(alignment template)으로서 작용함으로써 형성되는 액정 분자의 분자 장축을 정렬한다. 유사하게, 층(140)의 정렬은, 전자 수송층(150)이 형성된 액정 분자의 정렬에 대하여 템플릿으로서 작용한다. 따라서, 3개의 모든 액정 중합체층(130, 140 및 150)은 결국 정렬층(210)의 삽입에 의하여 균일하게 정렬되어 새로운 소자(200)를 형성하게 된다.

[0160] (210)과 같은 정공을 수송하는 광배향층의 형성은 미국 특허 제7,118,787호에 기재되어 있다. 이들 층은 용매 캐스팅(solvent casting)에 의해, 예를 들어 시클로펜타논 내 0.5% 용액; 상업적 광배향 중합체의 배합물, 예를 들어 구조 40을 가지는 재료와 같은 쿠마린 치환된 폴리메틸 메타크릴레이트; 및 상업적으로 이용가능한 정공 수송 재료, 예를 들어 트리아릴 치환된 아민 재료(구조 41)로부터 형성된다. 층(210)은 용매 캐스팅에 의하여 전자 주입층 상에 형성되며 액정 분자를 정렬하는데 필요한 표면 에너지 바이어스(bias)는 이후의 층이 편광된 자외선, 예를 들어 아르곤 이온 레이저의 300nm부터의 스펙트럼선에의 노출에 의하여 유도된 것이다.



화학식 40

[0161]



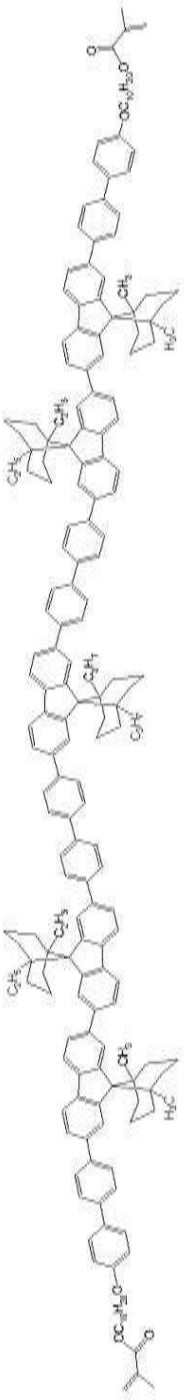
화학식 41

[0162]

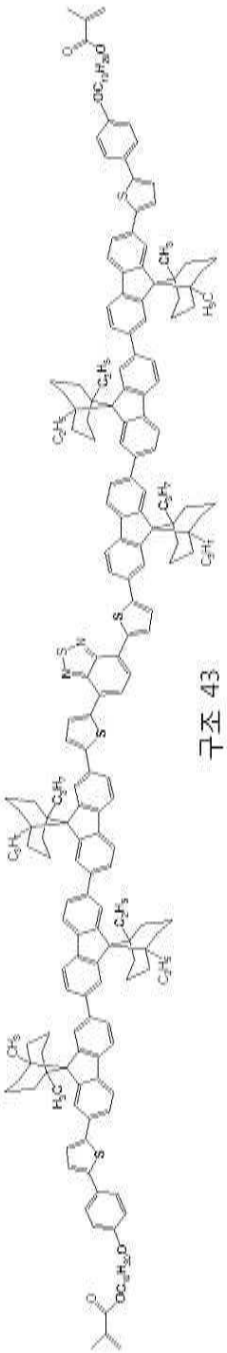
[0163] 소자(200)에서와 같이 액정 중합체층이 균일하게 정렬된 발광성 분자 코어를 가진다면, (140)과 같은 본 발명의 발광, 액정 중합체층은 매우 편광된 빛을 방출하기 때문에 소자(200)와 같은 소자들이 유용하다. 결과적으로, 소자(200)는 매우 편광된 빛을 방출하는 OLED이다. (200)과 같은 OLED는, 3차원 디스플레이에서, 및 매우 편광된 빛의 유효한 방출이 유리한 다른 적용에서 액정 디스플레이 백라이트로서의 용도가 발견될 수 있다. 소자

(200)에서 사용되는 유형의 정렬된 발광 액정층은 또한 다른 장치, 예를 들어 광발광성 편광판(photoluminescent polariser)에서 유리하게 사용될 수 있다.

[0164] 본 발명의 발광 및 전하 수송 재료는 일반적인 포토레지스트와 같이 광패터닝될 수 있으므로, 상기 재료는 용이하게 그리고 비용 효과적으로 다양한 색깔의 화소로 된 소자를 생산하는데 사용될 수 있다. 예를 들어, 각각 개별적인 소자(100)의 구조를 가지는 녹색 발광 요소의 매트릭스 어레이는 유리 기판 상에서 제작될 수 있다. 그 다음 동일한 수의 청색 발광 요소의 제2 어레이는 (100)과 동일한 구조를 가지지만, 상기 예에서와 같이 층(140)에 대한 제형을 사용하는 것보다 층(130) 상에 0.40% 화합물 37, 0.35% 화합물 42 및 0.05% 화합물 35로 이루어지는 클로로포름 용액을 스핀코팅함으로써 층(140)을 형성하는 것에 의하여 제작될 수 있다. 마지막으로 녹색 발광 픽셀에 대한 수와 동일한 적색 발광 요소의 어레이는 (100)과 동일한 구조를 가지지만, 층(130) 상에 0.40% 화합물 37, 0.35% 화합물 35 및 0.05% 화합물 43으로 이루어지는 클로로포름 용액을 스핀코팅함으로써 층(140)을 형성하는 것에 의하여 제작될 수 있다. 3가지 상이한 색깔의 발광 요소의 어레이는, 하나는 녹색 발광, 하나는 청색 발광, 하나는 적색 발광 요소인 그룹이 컬러 평판 디스플레이에서 사용되는 것과 같이 완전 컬러 픽셀 그룹을 형성하도록 배열될 수 있다. 일부 소자층, 예를 들어 정공 주입층(120), 정공을 수송하는 광배향층(120), 및 캐소드(160)는 3가지 모든 색깔의 발광 요소에 대하여 일반적일 수 있음이 분명해야 한다.



구조 42



구조 43

[0165]

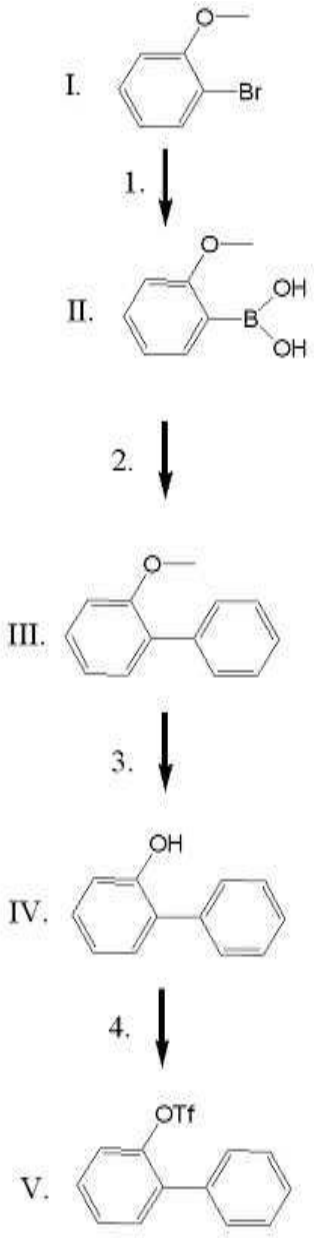
[0166] 보다 전통적인 OLED 이미터 및 전하 수송 재료에 대하여 본 발명에 기재된 재료의 추가 이점은 다수의 층을 캐스팅하여 그 다음에 그 중 하나의 층을 불용성의 고정된 액정 중합체 재료로 광경화하는 능력이다. 다른 중합체 OLED 이미터 및 전하 수송 재료는 소자 기판 상으로의 증착 후에 용매 용해성으로 남아 용매로부터의 이후의 재료 증착은 다른 중합체 OLED 이미터 및 전하 수송 재료를 씻어버리게 될 결과를 가져온다. 이는 소자(100)에서와 같이 다층 구조의 제작을 불가능하게 만든다. 소자(100)보다 훨신 더 많은 층을 가지는 소자는 더 많은 증착 및 경화 단계를 추가함으로써 용이하게 제작될 수 있음이 분명해야 한다.

[0167] 싸게 그리고 경제적으로, 인접한 층이 상이한 최고준위 점유 분자궤도 또는 최저준위 비점유 분자궤도(HOMO 및 LUMO) 에너지 수준뿐만 아니라 상이한 전하 운반체 이동성을 가지는 다층 소자를 생산하는 능력은 플라스틱 전자장치(electronics)에서 일반적인 유틸리티를 가진다. 예를 들어, p-n 접합의 등가물은 본 발명의 재료 및 공정을 사용하여 형성될 수 있으며, 상기 재료 및 공정은 다이오드, 트랜지스터 및 광전지 소자에서 유틸리티를 찾을 수 있다. 포토리소그래피로 패터닝될 수 있는 본 발명의 재료의 능력은 거의 모든 크기 및 기재의 플라스틱 전자 소자의 큰 어레이가 제작될 수 있게 한다.

[0168] 본 발명의 산화 방지 재료의 합성은 하기 VIII, XVIII 및 XXVII과 같은 지환식 및 이환식(bicyclic) 화합물의 케토 디에스테르 유도체를 통해 진행한다. 이들 재료는 아세톤디카르복시산 에스테르(VI 및 XVI)의 에놀(enol)의 알킬화에 의해 생산된다. 그 다음 케토 화합물은 상당하는 브로모 화합물(X, XX 및 XXIX)로 전환된다. 그 다음 브로마이드는 미야우라 보릴화 반응(Miyaura borylation reaction)을 겪어 알킬보론산 피나콜 에스테르(XI, XXI 및 XXX)를 생성하였다. 그 다음 이들 화합물은 적절한 비페닐 유도체 V와 커플링된다. 이러한 유형의 보로네이트(boronate)를 사용하는 스즈키 커플링 반응은 경쟁적인 β-제거 반응 때문에 보통 성공적이지 않다. 그러나, 이 경우에 보로네이트는 β-치환된 수소를 가지지 않으므로, 경쟁 반응은 가능하지 않다. 그 다음 생성되는 중간체는 상응하는 9-스피로 치환된 플루오렌 디에스테르(XIV, XXIV 및 XXXIII)에 대하여 닫힌 고리이다. 디에스테르는 환원, 또는 그리나르 또는 알킬 리튬 시약을 이용한 반응 후 환원에 의하여 원하는 알킬 치환된 고리계(예를 들어, XVII, XXVI 또는 XXXVI)로 전환될 수 있다.

[0169] 스피로 치환된 플루오렌은 디할로겐화(반응식 5)하여 반응성 메조겐 백본으로의 포함을 위하여 준비된다. 반응식 6, 8, 7 및 9는 일련의 슈틸레(Stille) 및 스즈키(Suzuki) 커플링 반응을 사용하여 반응성 메조겐 LVII의 합성을 표현한다.

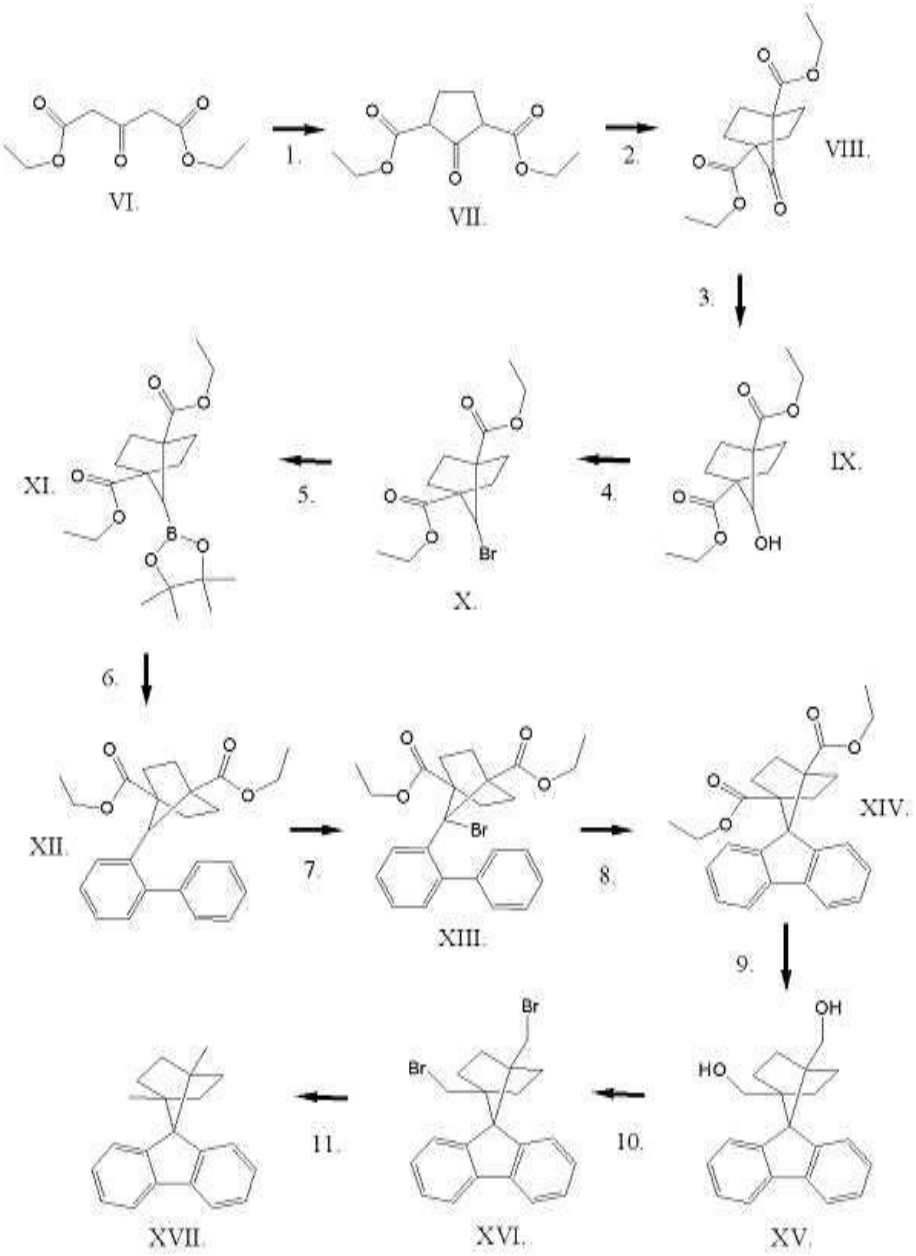
[0170] 반응식 1: 비페닐-2-일 트리플레이트의 합성



1. a. Mg, Et_2O; b. $B(OMe)_3$, THF; 2. 브로모벤젠, 2당량 수성 K_2CO_3, 3 몰% $Pd(PPh_3)_4$; 3. BBr_3, CH_2Cl_2, -80°C; 4. $(CF_3SO_2)_2O$, 피리딘.

[0171]

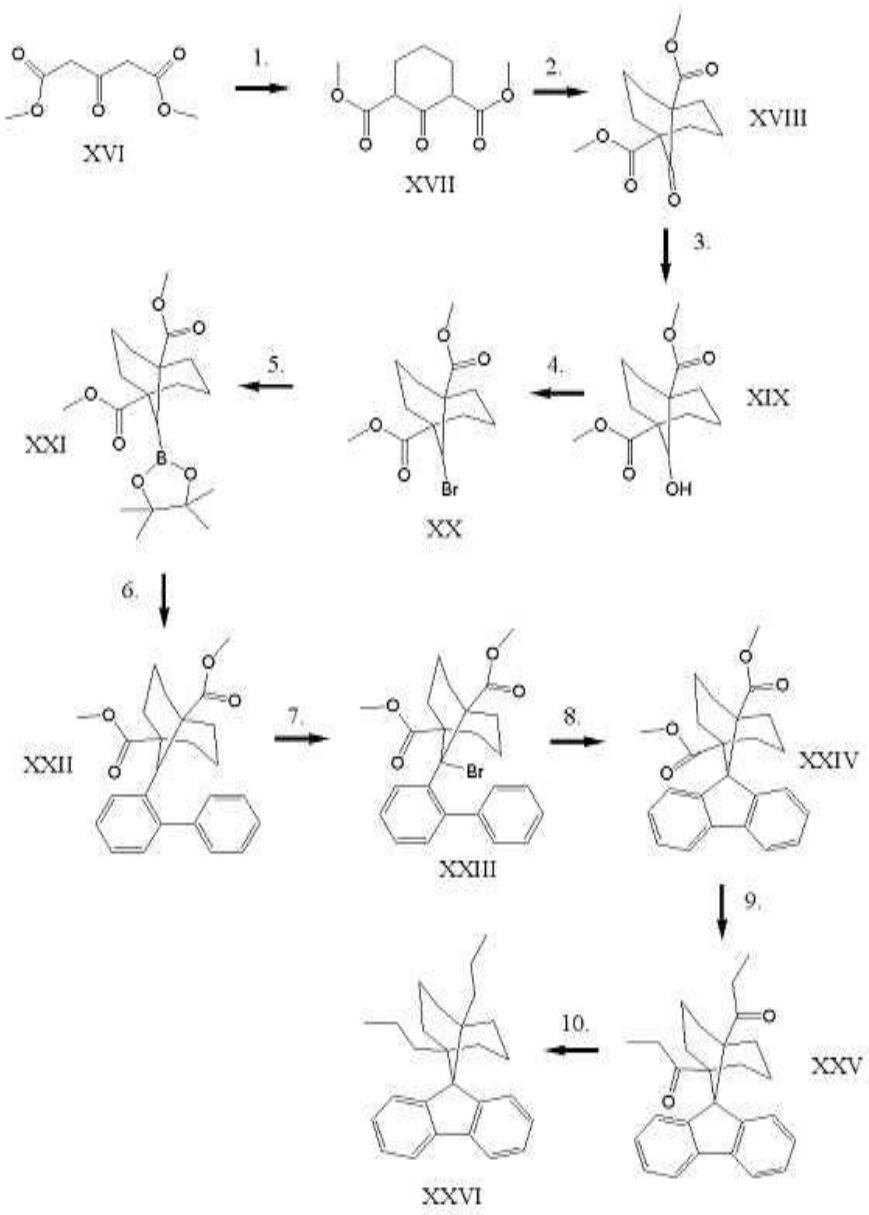
[0172] 반응식 2: 1,4-디메틸 스피로[비시클로[2,2,1]헵탄-7,9'-플루오렌]의 합성



1. a.리튬 디이소프로필아미드, THF; b. 1,2-디브로모에탄 , c. NaH, THF; 2. a. 리튬 디이소프로필아미드, THF; b. 1,2-디브로모에탄 , c. NaH, THF; 3. $NaBH_4$, CH_3OH; 4. Ph_3PBr_2, CH_3CN; 5. 비스(피나콜라토)디보론, $PdCl_2(dppf)$, 수성 KOAc, 디옥산 ; 6. 화합물 V, $Pd(PPh_3)_4$, 톨루엔, 수성 Na_2CO_3; 7. Br_2, CCl_4, 디벤조일 페록사이드, 자외선 ; 8. 보론 트리플루오라이드 에테레이트, THF; 9. $LiEt_3BH$, THF; 10. Ph_3PBr_2, CH_3CN; 11. $LiEt_3BH$, THF.

[0173]

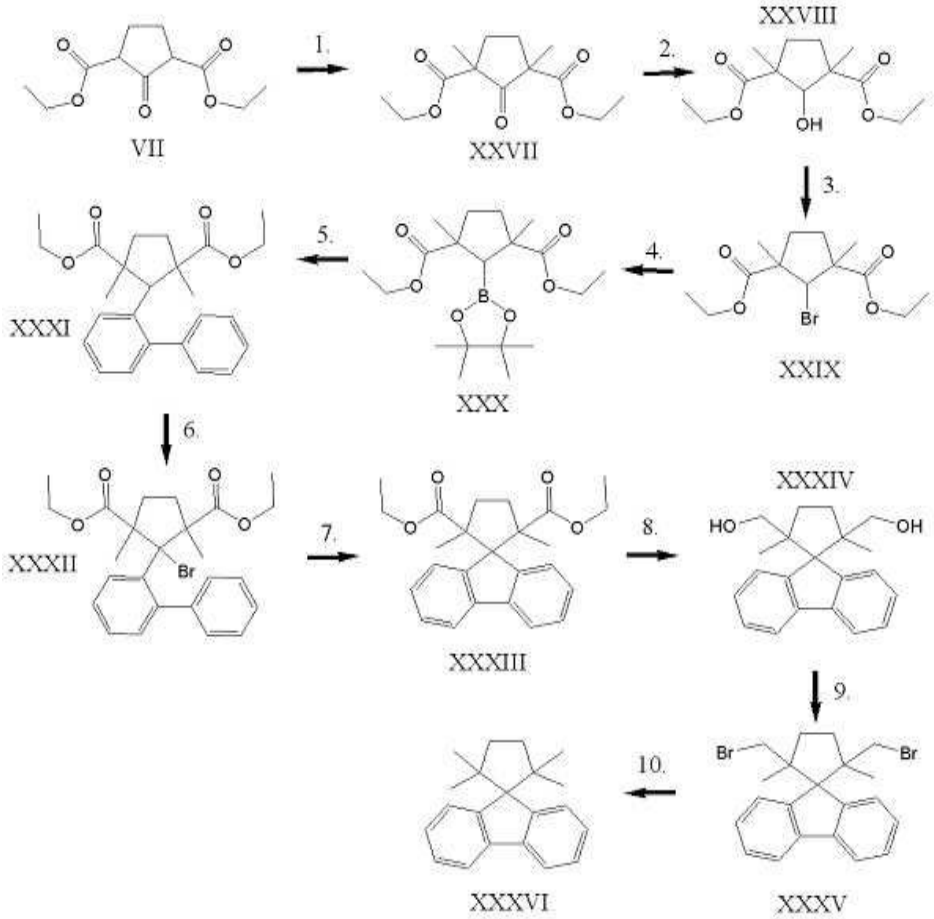
[0174] 반응식 3: 1,5-디프로필 스피로[비시클로[3,3,1]노난-9,9'-플루오렌]의 합성



1. a.리튬 디이소프로필아미드, THF, b. 1,3-디브로모프로판, c. NaH, THF; 2. a. 리튬 디이소프로필아미드, THF; b. 1,3-디브로모프로판, c. NaH, THF; 3. $NaBH_4$, CH_3OH; 4. Ph_3PBr_2, CH_3CN; 5. 비스(피나콜라토)디보론, $PdCl_2(dppf)$, 수성 KOAc, 디옥산; 6. 화합물 V, $Pd(PPh_3)_4$, 톨루엔, 수성 Na_2CO_3; 7. Br_2, CCl_4, 디벤조일 퍼록사이드, 자외선; 8. 보론 트리플루오라이드 에테레이트, THF; 9. a. C_2H_5MgBr, THF, b. HCl 희석; 10. a. $H_2NNH_2 \cdot H_2O$, $N(C_2H_5OH)_3$, 환류, b. KOH, 환류.

[0175]

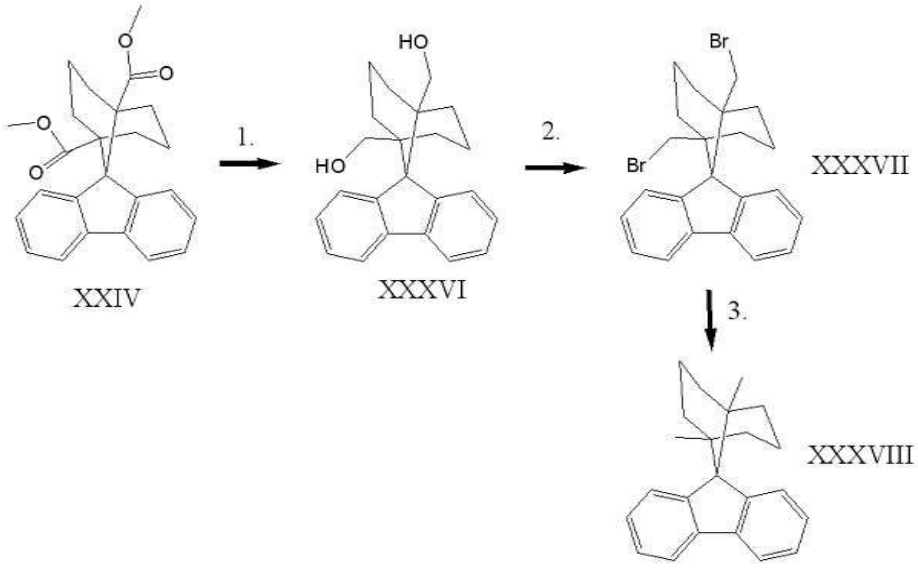
[0176] 반응식 4: 2,2,5,5-테트라메틸 스피로[시클로펜탄-1,9'-플루오렌]의 합성



1. a.리튬 디이소프로필아미드, THF; b.메틸 요오다이드; 2. $NaBH_4$, CH_3OH; 3. Ph_3PBr_2, CH_3CN; 4. 비스(피나콜라토)디보론, $PdCl_2(dppf)$, 수성 KOAc, 디옥산; 5. 화합물 V, $Pd(PPh_3)_4$, 톨루엔, 수성 Na_2CO_3; 6. Br_2, CCl_4, 디벤조일 페록사이드, 자외선 ; 7. 보론 트리플루오라이드 에테레이트, THF; 8. $LiEt_3BH$, THF; 9. Ph_3PBr_2, CH_3CN; 10. $LiEt_3BH$, THF.

[0177]

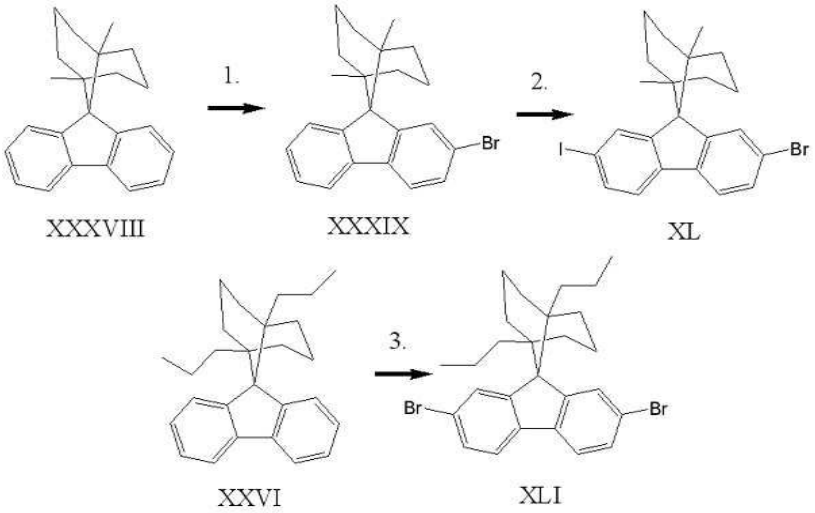
[0178] 반응식 5: 1,5-디메틸 스피로[비시클로[3,3,1]노난-9,9'-플루오렌]의 합성



1. $LiEt_3BH$, THF; 2. Ph_3PBr_2, CH_3CN; 3. $LiEt_3BH$, THF.

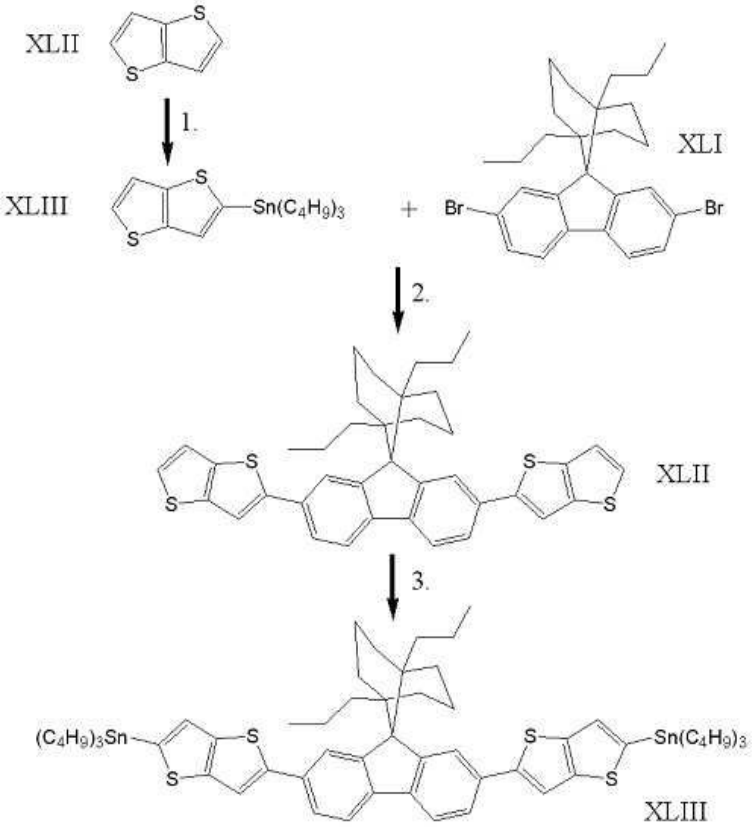
[0179]

[0180] 반응식 5: 디할로플루오렌의 합성



[0181] 1. Br_2, $CHCl_3$; 2. I_2, HIO_4, CH_3COOH; 3. Br_2, $CHCl_3$

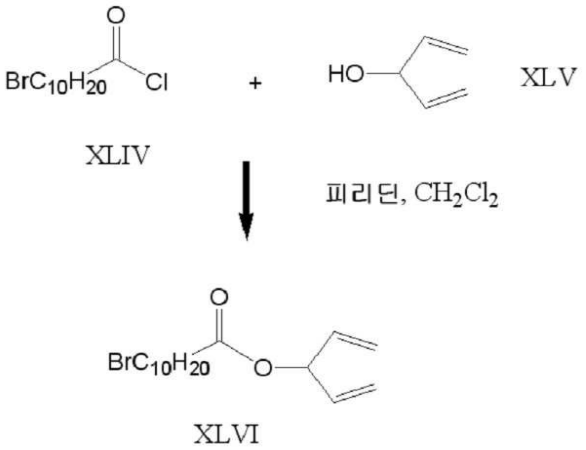
[0182] 반응식 6: 주요 중간체인, 2',7'-비스(2,5-디[트리-n-부틸스태닐]티에노[4,5-b]티에닐)-1,5-디프로필 스피로[비시클로[3,3,1]노난-9,9'-플루오렌]의 합성



1. a. C_4H_9Li, THF (무수), -78°C, b. $ClSn(C_4H_9)_3$ (실온) 2. $Pd(PPh_3)_4$, DMF, 80°C
3. a. C_4H_9Li, THF (무수), -78°C, b. $ClSn(C_4H_9)_3$ (실온)

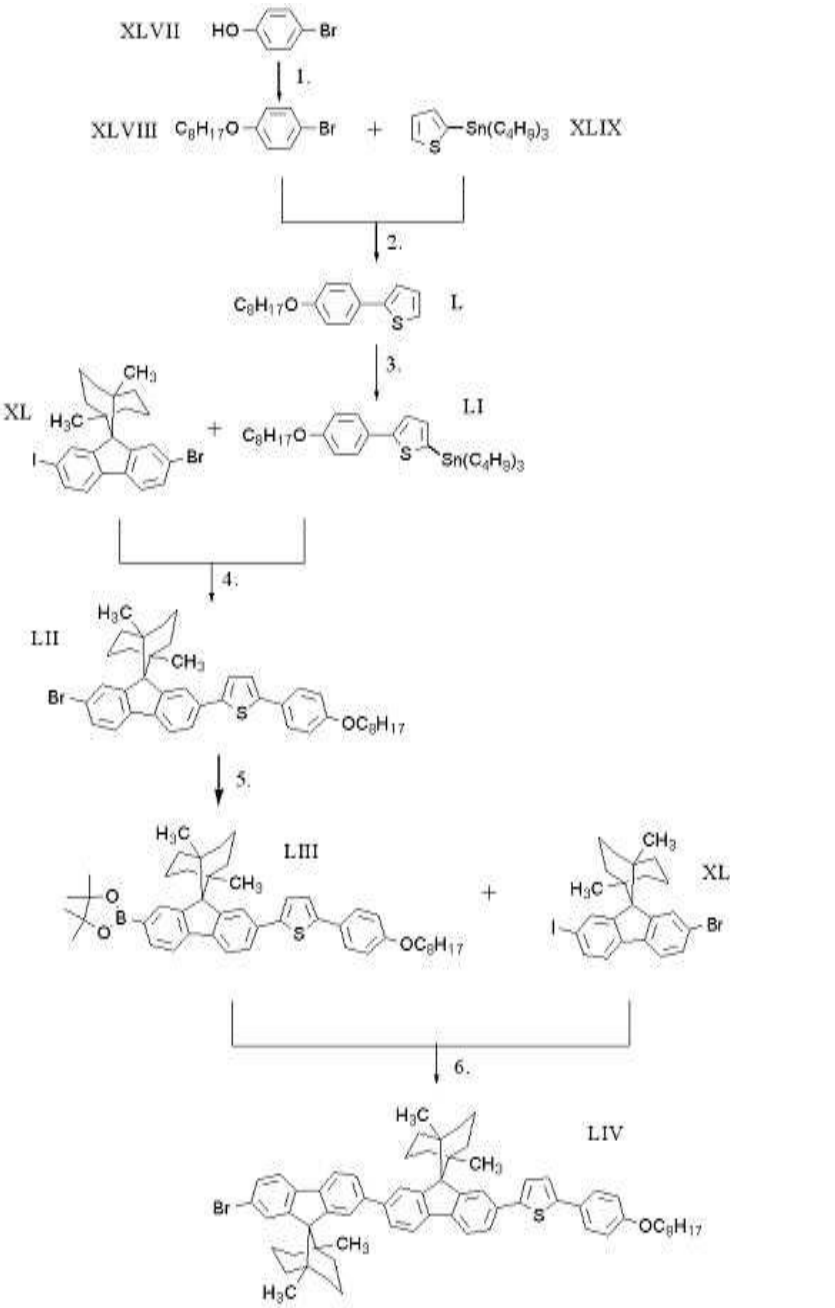
[0183]

[0184] 반응식 7: 스페이서/가교결합제의 합성



[0185]

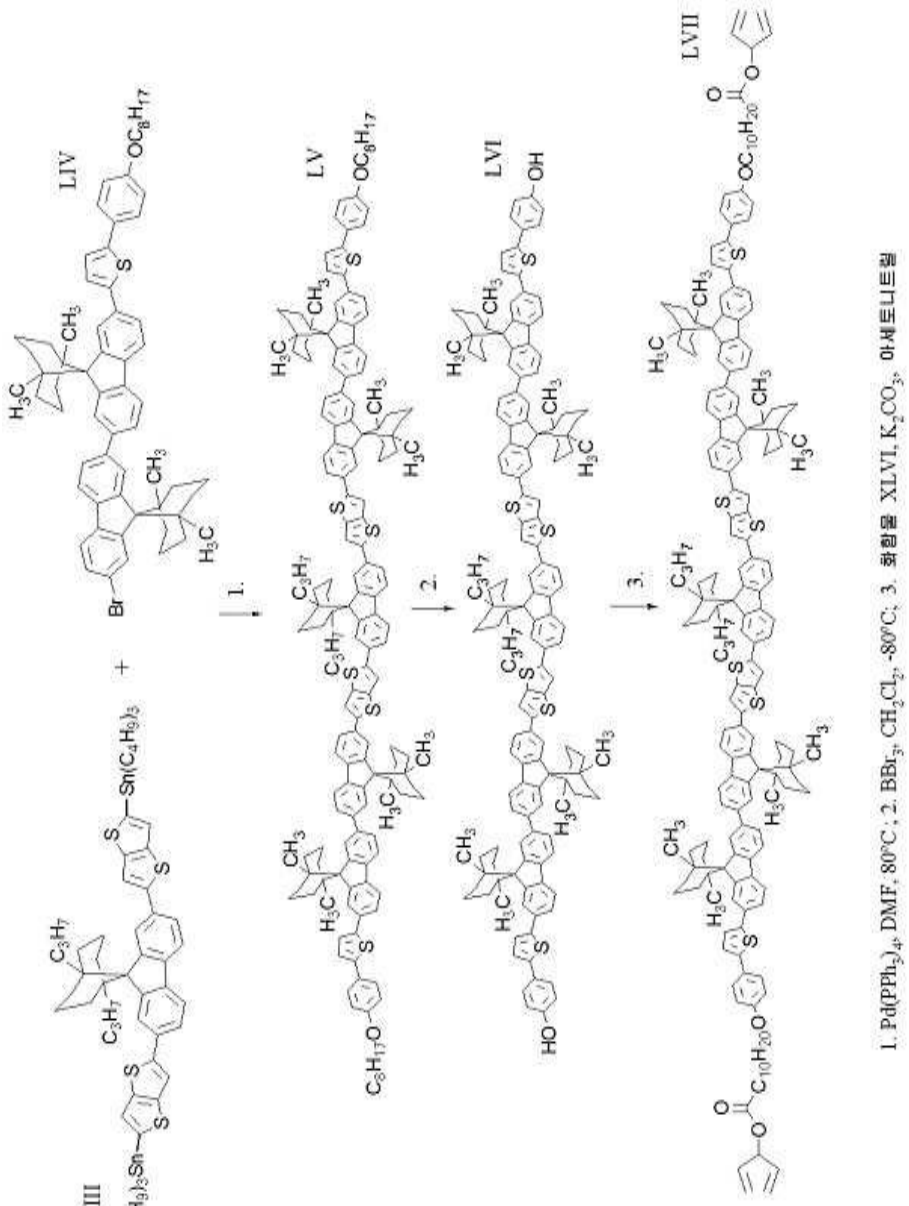
[0186] 반응식 8: 주요 중간체인 7-([4-옥틸옥시페닐]티엔-2-일) 2-(7-브로모{1,5-디메틸 스피로[비시클로[3,3,1]노난-9,9'-플루오렌]}-2'-일) 스피로[비시클로[3,3,1]노난-9,9'-플루오렌]의 합성



1. 1-브로모옥탄, K_2CO_3, 부탄온, 환류; 2. $Pd(PPh_3)_4$, DMF, 80°C; 3. a. C_4H_9Li, THF (무수), -78°C, b. $ClSn(C_4H_9)_3$ (실온) 4. $Pd(PPh_3)_4$, DMF, 80°C; 5. 비스(피나콜라토)디보론, $PdCl_2(dppf)$, 수성 KOAc, 디옥산; 6. 화합물 XXXX, $Pd(PPh_3)_4$, 톨루엔, 수성 Na_2CO_3.

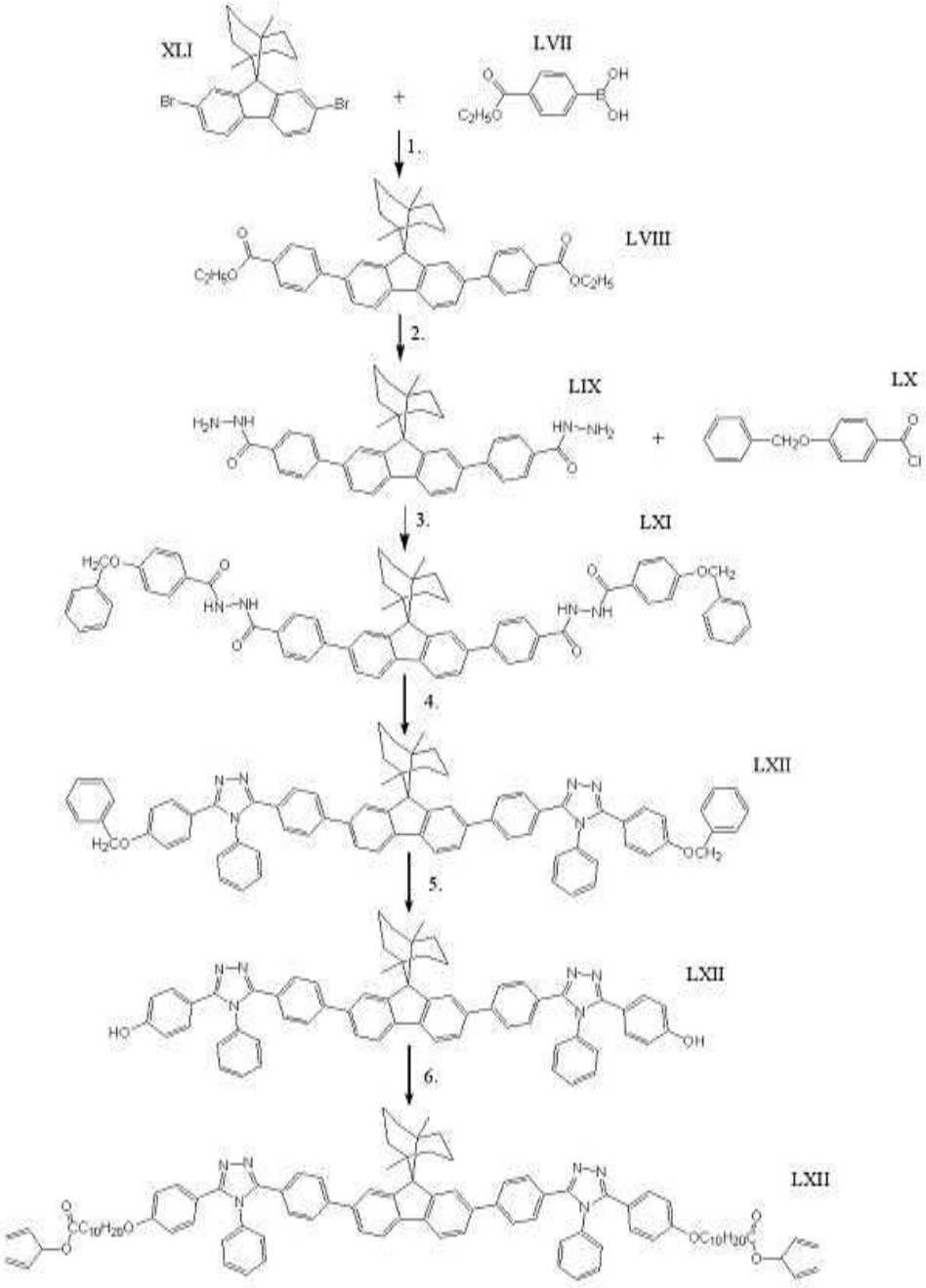
[0187]

[0188] 반응식 9: 전기발광 반응성 메조겐의 합성



[0189]

[0190] **반응식 10: 전하 수송 반응성 메조겐의 합성**



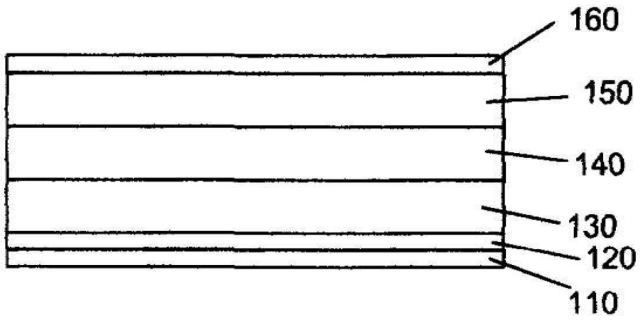
1. $Pd(PPh_3)_4$, 톨루엔, 수성 Na_2CO_3; 2. H_2NNH_2, EtOH; 3. CH_2Cl_2, 피리딘 4. 아닐린, PCl_3, 톨루엔; 5. H_2, Pd/C; 6. 화합물 XLVI, K_2CO_3, 아세토니트릴

[0191]

도면

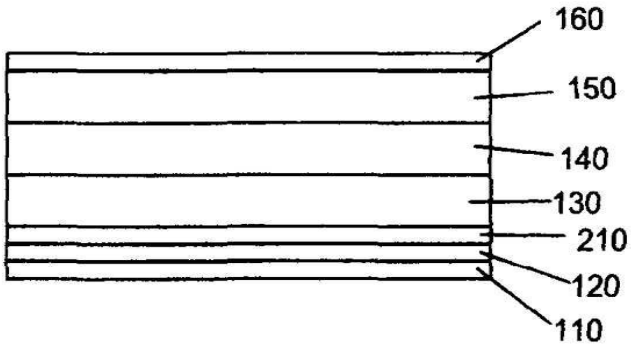
도면1

100

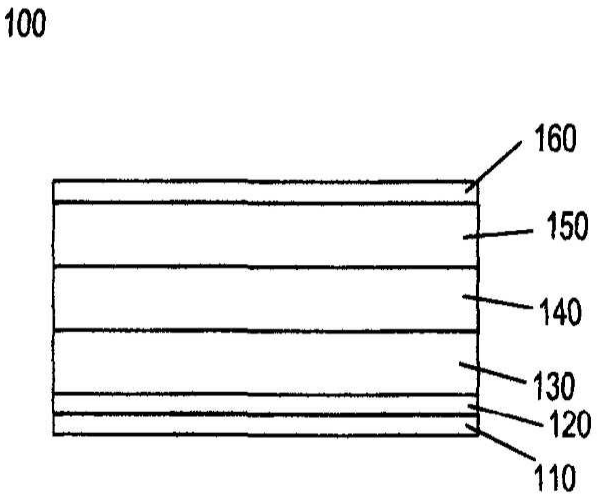


도면2

200



专利名称(译)	包含芴衍生物的电致发光材料		
公开(公告)号	KR101833074B1	公开(公告)日	2018-02-27
申请号	KR1020127011267	申请日	2010-09-29
[标]申请(专利权)人(译)	洛马克斯有限公司		
申请(专利权)人(译)	当穆斯品牌		
当前申请(专利权)人(译)	当穆斯品牌		
[标]发明人	KOCH GENE KARL 코크진칼		
发明人	코크,진칼		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	C07C69/54 C07D333/18 C07C43/215 C07D403/14 C07D417/14 C07D249/08 C07D487/04 C07D207/452 C07D519/00 C09K11/06 H01L51/0032 C07C2603/94 C07D333/16 C07D471/22 C07D495/04 C09K2211/1416 C09K2211/1425 C09K2211/1458 C09K2211/1466 C09K2211/1475 H01L51/0037 H01L51/0039 H01L51/004 H01L51/0058 H01L51/0067 H01L51/0068 H01L51/0072 H01L51/0074 H01L51/0508 H01L51/42 H01L51/5012 H01L51/5048 H01L51/5293 H01L2251/308 Y02E10/549 C07C59/72 H01L51/005 H01L51/0069		
代理人(译)	允许记录		
优先权	2009017083 2009-09-30 GB		
其他公开文献	KR1020120106731A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

其中棒状核A包含稠合芳环结构，并且又包含至少一个另外的芴环结构和稠合芴环结构，其中稠合芳香结构芴环系统在9-位被取代，其中芴的9-位难以氧化。 专利号10-1833074