



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2013-0097639
(43) 공개일자 2013년09월03일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/54 (2006.01) C07F 15/00 (2006.01)
- (21) 출원번호 10-2012-7030351
- (22) 출원일자(국제) 2011년04월28일
심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2012년11월20일
- (86) 국제출원번호 PCT/AU2011/000486
- (87) 국제공개번호 WO 2011/134013
국제공개일자 2011년11월03일
- (30) 우선권주장
2010901797 2010년04월28일 오스트레일리아(AU)
- (71) 출원인
커먼웰쓰 사이언티픽 앤드 인더스트리얼 리서치
오가니제이션
오스트레일리아 오스트레일리안 캐피탈 테리토리
2612 캠벨 라임스톤 애비뉴
- (72) 발명자
그로아케 미셀
오스트레일리아 3178 빅토리아 로우빌 프리오 코
트 4
우에노 가즈노리
오스트레일리아 3125 빅토리아 베우드 텐니슨 스
트리트 유닛 1/10
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
김진희, 김성기

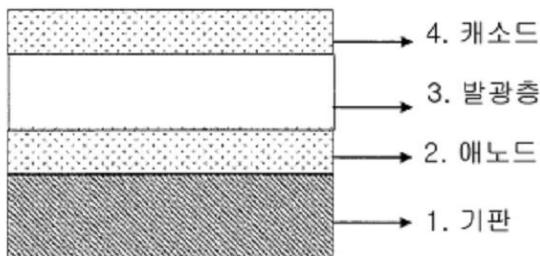
전체 청구항 수 : 총 17 항

(54) 발명의 명칭 인광 이리듐 및 관련 제8족 금속 다중고리 화합물을 기본물로 하는 전계발광 장치

(57) 요 약

Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속 원자 M과 하나 이상의 리간드 L(상기 리간드 L은 화학식 1에 의해 표현됨)의 착물을 포함하는 인광 물질이 개시된다. 또한 이러한 인광 물질을 함유하는 유기 전계발광 장치가 개시된다.

대 표 도 - 도1



(72) 발명자

바운 마크

오스트레일리아 3168 빅토리아 노팅 힐 아쿠나 에
베뉴 6

안트레젠 스벤

오스트레일리아 3169 빅토리아 클레이튼 사우쓰 헨
레나 스트리트 2/9

특허청구의 범위

청구항 1

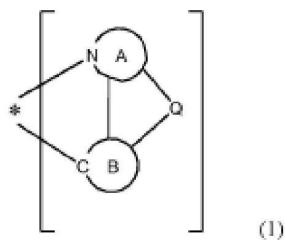
유기 전계발광 장치에 있어서,

- 애노드 및 캐소드를 포함하는 한 쌍의 전극과,
- 상기 한 쌍의 전극 사이에 배치되는 하나 이상의 유기 화합물층을 포함하며;

상기 유기 화합물층 또는 하나 이상의 유기 화합물층은 인광 물질을 함유하고,

상기 인광 물질은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속원자 M과 하나 이상의 리간드 L의 착물을 포함하고,

상기 리간드 L은 하기 화학식 1에 의해 표현되고,



상기 화학식에서,

- 고리 A는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-원 헤테로고리이고,
- 고리 B는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 탄소원자를 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5- 또는 6-원 탄소고리 또는 헤테로고리이고,
- 고리 A와 B는 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 연결되어 있고,
- 고리 A와 B는 테더 Q에 의해 연결되어 있고,
- 상기 Q는 길이가 3 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 테더이며, 상기 테더 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-로 치환될 수 있고, 상기 -Si- 및 -P- 원자는 그 원자가를 기초로 하는 치환기를 가지며, 상기 테더의 탄소, 질소, 규소 또는 인 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설플라이드, 설플론, 설플록사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 헤테로아릴, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 함유하는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 가지거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리계를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 장치.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 인광 물질의 고리 A 및 B의 치환기는 독립적으로,

- 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설플라이드, 설플론, 설플록사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기, 및
- 치환 또는 비치환 알킬, 치환 또는 비치환 아릴, 및 치환 또는 비치환 알킬-아릴로 이루어진 군으로부터 선택

되며;

- 상기 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 내의 하나 이상의 탄소 원자는 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO_2-$, $-CH=CH-$, $-C=C-$, $-CONH-$, $-C=N-$, $-NH-$, $-Si-$ 및 뺏-로 이루어진 군으로부터 선택되는 기 또는 원자로 치환될 수 있고, 상기 $-Si-$ 및 $-P-$ 원자는 원자가를 기초로 하여 중성을 위한 치환기를 함유하고,

- 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 상의 치환기는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설파이드, 설플론, 설플록사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

- 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴은 추가적으로 테더 Q와 연결되거나, 두 지점에서 중심 고리(A 또는 B)에 부착되어 융합 고리 또는 고리계를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 장치.

청구항 3

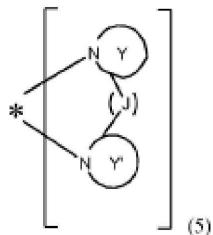
제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 인광 물질은 1, 2 또는 3개의 화학식 1의 리간드 L 및 0, 1 또는 2개의 리간드 L과 다른 이좌배위 리간드 L'를 함유하는 것을 특징으로 하는 장치.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 인광 물질의 리간드 L'는 화학식 5의 리간드, 화학식 6의 리간드, 또는 화학식 7의 리간드이며,

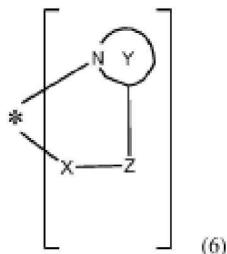


상기 화학식 5에서,

- 고리 Y는 상기 화학식에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 헤테로고리이고,

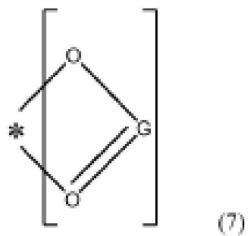
- 고리 Y'는 상기 화학식에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 헤테로고리이고,

- 고리 Y와 Y'는 화학식 5에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 또는 링커 J에 의해 연결되어 있고, 상기 J(존재하는 경우)는 고리 Y 및 Y'둘다에 공유결합되는 B, C, O, N, P, Si 또는 S 원자이며 그 원자가에 따라 치환 또는 비치환될 수 있으며,



상기 화학식 6에서,

- 고리 Y는 화학식 5에서 기술한 바와 같고
- Z는 고리 Y와 공유결합에 의해 연결되어 있고 X에 의해 금속 원자와 연결되어 있는 리간드 컴포넌트이고,
- X는 별표(*) 위치에서 금속 M과 결합하는 N, O, S 또는 P 원자이며, 상기 N 또는 P 원자는 비치환 또는 치환되며,



상기 화학식 7에서,

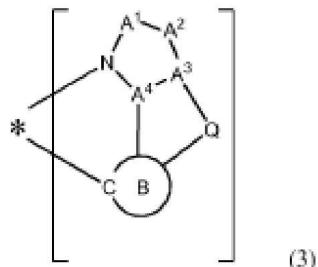
G는 일- 또는 이-치환되거나 비치환된 탄소원자를 함유하는 리간드 컴포넌트로 2개의 O 원자와 공유결합에 의해 연결되어 있고,

O 원자는 각각 별표(*) 위치에서 금속과 결합하는 것을 특징으로 하는 장치.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 인광 물질의 리간드 L은 화학식 3을 가지며,



상기 화학식 3에서, Q 및 고리 B는 청구항 1에서 기술한 바와 같고,

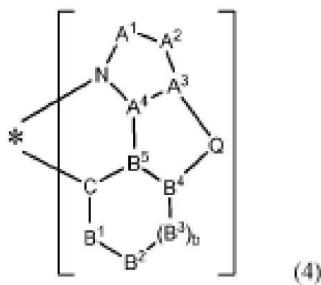
A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 C, N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 C 또는 N은 치환 또는 비치환될 수 있고,

A^3 및 A^4 는 C 및 N으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 C는 치환 또는 비치환될 수 있는 것을 특징으로 하는 장치.

청구항 6

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 인광 물질의 리간드 L은 화학식 4를 가지며,



상기 화학식 4에서, O는 제1항에서 기술한 바와 같고,

A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 C, N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 C 또는 N은 치환 또는 비치환될 수 있고,

A^3 및 A^4 는 C 및 N으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 C는 치환 또는 비치환될 수 있고,

B^1 및 B^2 는 각각 독립적으로 C, N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 C 또는 N은 치환 또는 비치환될 수 있고,

B^3 는 존재하는 경우, C, N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 C 또는 N은 치환 또는 비치환될 수 있고,

b는 0 또는 1이고,

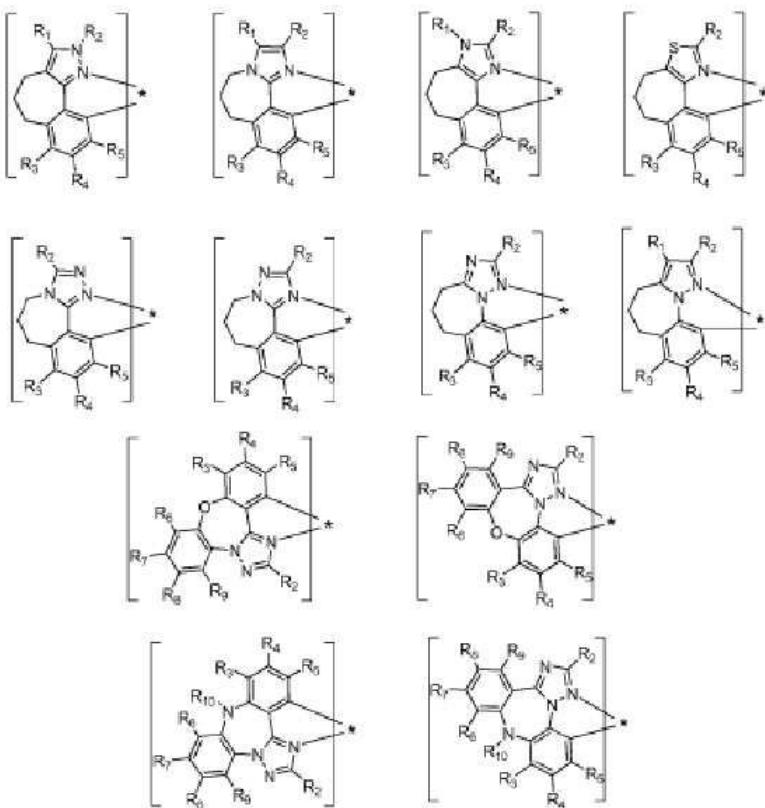
B^4 는 C 및 N으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 C는 치환 또는 비치환될 수 있고,

B^5 는 C인 것을 특징으로 하는 장치.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 인광물질의 리간드 L은 하기 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되며,



상기 화학식들에서,

R₁, R₂, R₃, R₄, R₅, R₆, R₇, R₈, R₉ 및 R₁₀은 독립적으로,

- 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설파이드, 설풀, 설풀사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기, 및

- 치환 또는 비치환 알킬, 치환 또는 비치환 아릴, 및 치환 또는 비치환 알킬-아릴로 이루어진 군으로부터 선택되며;

- 상기 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-로 이루어진 군으로부터 선택된 기나 원자로 치환될 수 있고, 상기 -Si- 및 -P- 원자는 원자각을 기초로 한 치환기를 함유하고,

- 상기 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 상의 치환기는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설파이드, 설풀, 설풀사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 장치.

청구항 8

유기 전계발광 장치에 있어서,

- 애노드 및 캐소드를 포함하는 한 쌍의 전극과,
- 상기 한 쌍의 전극 사이에 배치되는 하나 이상의 유기 화합물층을 포함하며;

상기 유기 화합물층 또는 하나 이상의 유기 화합물층은 인광 물질을 함유하고,

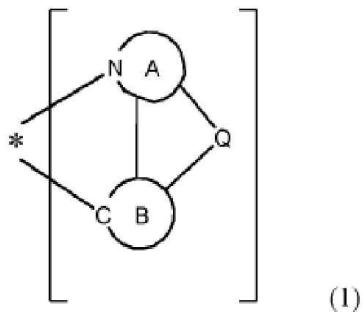
상기 인광 물질은 화학식 2를 가지며,



상기 화학식 2에서,

M은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속원자이고;

L은 하기 화학식 1에 의해 표현되는 리간드이고;



상기 화학식에서,

- 고리 A는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-원 헤테로고리이고,
- 고리 B는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 탄소원자를 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5- 또는 6-원 탄소고리 또는 헤테로고리이고,
- 고리 A와 B는 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 연결되어 있고,
- 고리 A와 B는 테터 Q에 의해 연결되어 있고,
- 상기 Q는 길이가 3 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 테터이고 상기 테터 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-로 치환될 수 있고, 상기 -Si- 및 -P- 원자는 그 원자가를 기초로 한 치환기를 가지고, 상기 테터의 탄소, 질소, 규소 또는 인 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 세파이드, 세폰, 세폭사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 헤테로아릴, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 함유하는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 가지거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리 계를 형성할 수 있고,

L'는 L과 다른 이좌배위 리간드이고;

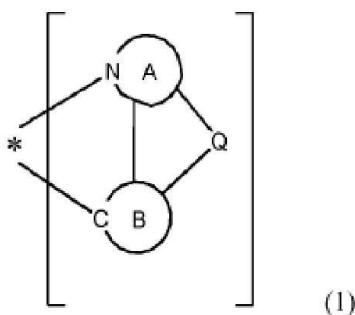
m은 1, 2 및 3으로부터 선택되는 정수이고;

n은 0, 1 및 2로부터 선택되는 정수인 것을 특징으로 하는 장치.

청구항 9

Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속 원자 M과 하나 이상의 리간드 L의 촉물을 포함하는 인광 물질에 있어서,

상기 리간드 L은 화학식 1에 의해 표현되며,



상기 화학식에서,

- 고리 A는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-원 혼태로고리이고,
- 고리 B는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 탄소원자를 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5- 또는 6-원 탄소고리 또는 혼태로고리이고,
- 고리 A와 B는 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 연결되어 있고,
- 고리 A와 B는 테더 Q에 의해 연결되어 있고,
- 상기 Q는 길이가 3 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 테더이고, 상기 테더 내의 하나 이상의 탄소 원자는 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO_2-$, $-CH=CH-$, $-C=C-$, $-NH-$, $-CONH-$, $-C=N-$, $-Si-$ 및 $-P-$ 로 치환될 수 있고, 상기 $-Si-$ 및 $-P-$ 원자는 그 원자가를 기초로 한 치환기를 가지고, 상기 테더의 탄소, 질소, 규소 또는 인 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 세파이드, 세폰, 세폭사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 혼태로아릴, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 함유하는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 가지거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리계를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 인광물질.

청구항 10

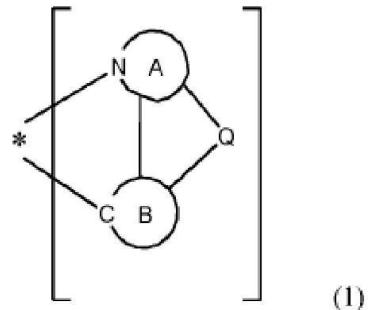
화학식 2를 갖는 인광물질에 있어서,



상기 화학식에서,

M은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속원자이고;

L은 하기 화학식 1에 의해 표현되는 리간드이고;



상기 화학식에서,

- 고리 A는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-원 헤테로고리이고,
- 고리 B는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 탄소원자를 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5- 또는 6-원 탄소고리 또는 헤테로고리이고,
- 고리 A와 B는 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 연결되어 있고,
- 고리 A와 B는 테더 Q에 의해 연결되어 있고,
- 상기 Q는 길이가 3 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 테더이고 상기 테더 내의 하나 이상의 탄소 원자는 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO_2-$, $-CH=CH-$, $-C=C-$, $-NH-$, $-CONH-$, $-C=N-$, $-Si-$ 및 $-P-$ 로 치환될 수 있고, 상기 $-Si-$ 및 $-P-$ 원자는 그 원자가를 기초로 한 치환기를 가지며, 상기 테더의 탄소, 질소, 규소 또는 인 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 살파이드, 살폰, 살폭사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 헤테로아릴, 알카닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 함유하는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 가지거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리계를 형성할 수 있고,

L' 는 L 과 다른 이좌배위 리간드이고;

m 은 1, 2 및 3으로부터 선택되는 정수이고;

n 은 0, 1 및 2로부터 선택되는 정수인 것을 특징으로 하는 인광물질.

청구항 11

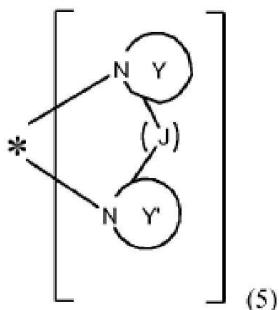
제10항에 있어서,

상기 $m + n = 2$ 또는 3인 것을 특징으로 하는 인광 물질.

청구항 12

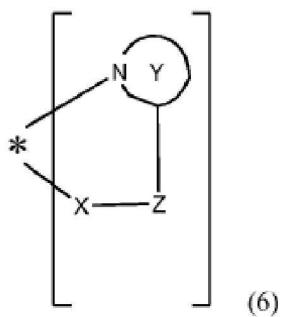
제10항 또는 제11항에 있어서,

상기 리간드 L' 는 화학식 5의 리간드, 화학식 6의 리간드, 또는 화학식 7의 리간드이며,



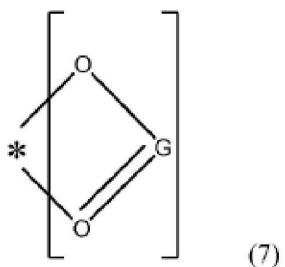
상기 화학식 5에서,

- 고리 Y는 상기 화학식에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 헤테로고리이고,
- 고리 Y'는 상기 화학식에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 헤테로고리이고,
- 고리 Y와 Y'는 화학식 5에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 또는 링커 J에 의해 연결되어 있고, 상기 J는 존재하는 경우, 고리 Y 및 Y'둘다에 공유결합되는 B, C, O, N, P, Si 또는 S 원자이며 그 원자가에 따라 치환 또는 비치환될 수 있고,



상기 화학식 6에서,

- 고리 Y는 화학식 5에서 기술한 바와 같고
- Z는 고리 Y와 공유결합에 의해 연결되어 있고 X에 의해 금속 원자와 연결되어 있는 리간드 컴포넌트이고,
- X는 별표(*) 위치에서 금속 M과 결합하는 N, O, S 또는 P 원자이고, 상기 N 또는 P 원자는 비치환 또는 치환되며,



상기 화학식 7에서,

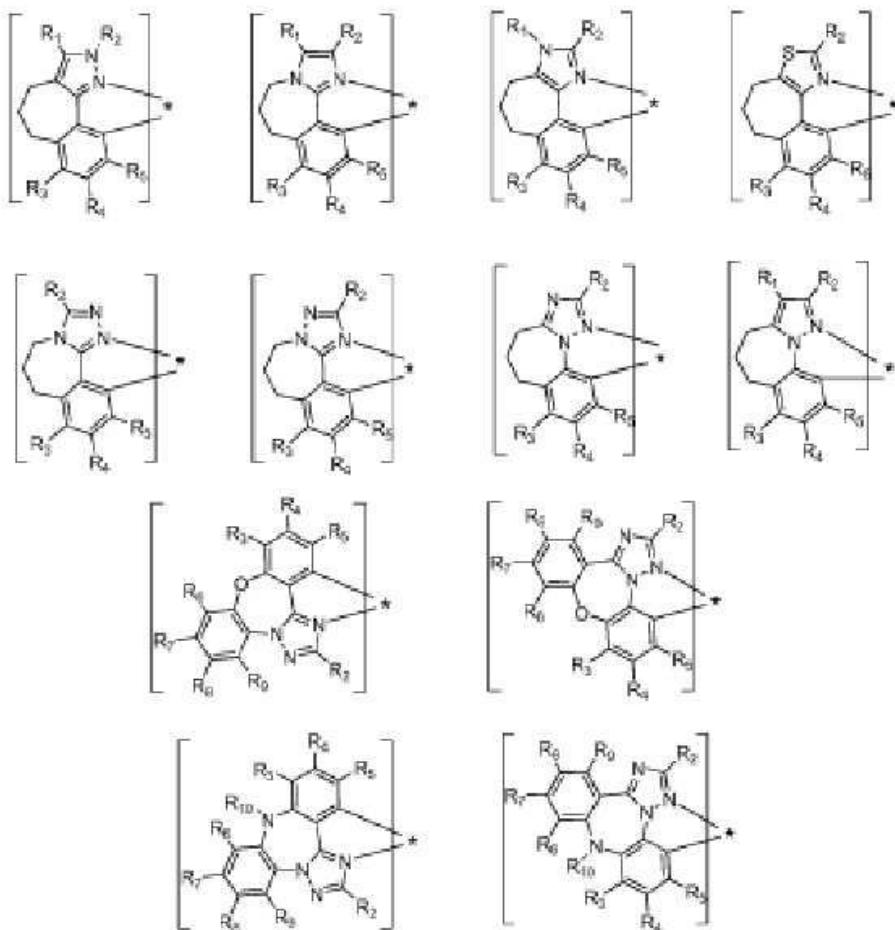
G는 일- 또는 이-치환되거나 비치환된 탄소원자를 함유하는 리간드 컴포넌트로 2개의 O 원자와 공유결합에 의해 연결되어 있고,

O 원자는 각각 별표(*) 위치에서 금속과 결합하는 것을 특징으로 하는 인광 물질.

청구항 13

제9항 내지 제12항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 인광 물질의 리간드 L은 하기 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되고,



상기 화학식들에서,

R₁, R₂, R₃, R₄, R₅, R₆, R₇, R₈, R₉ 및 R₁₀은 독립적으로,

- 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설파이드, 설풀, 설포사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기, 및

- 치환 또는 비치환 알킬, 치환 또는 비치환 아릴, 및 치환 또는 비치환 알킬-아릴로 이루어진 군으로부터 선택되고;

- 상기 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-로 이루어지는 군으로부터 선택된 기나 원자로 치환될 수 있고, 상기 -Si- 및 -P- 원자는 원자가를 기초로 한 치환기를 함유하며,

- 상기 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 상의 치환기는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설파이드, 설풀, 설포사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 인광 물질.

청구항 14

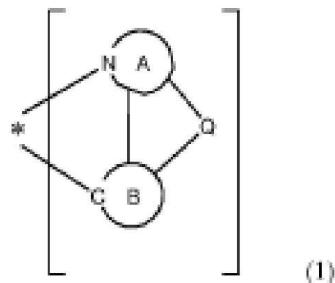
인광 물질의 제조방법에 있어서,

- 전구물질 착물인 금속 M과 리간드 L을 원하는 수의 리간드 L이 금속 M과 배위결합될 수 있는 생성물을 수득하기에 적합한 비로 반응시키는 단계와, 임의선택적으로,

- 상기 생성물과 또 다른 리간드 L'를 생성물에 원하는 수의 리간드 L'를 주입하기에 적합한 비로 반응시키는 단계를 포함하며;

상기 M은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속 원자이고;

L은 화학식 1에 의해 표현되는 리간드이고;



상기 화학식에서,

- 고리 A는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합될 수 있는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-원 혼합고리이고,
- 고리 B는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합될 수 있는 탄소원자를 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5- 또는 6-원 탄소고리 또는 혼합고리이고,
- 고리 A와 B는 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 연결되어 있고,
- 고리 A와 B는 테더 Q에 의해 연결되어 있고,
- 상기 Q는 길이가 3 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 테더이며, 상기 테더 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-로 치환될 수 있고, 상기 -Si- 및 -P- 원자는 그 원자가를 기초로 하는 치환기를 가지고, 상기 테더의 탄소, 질소, 규소 또는 인 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 세파이드, 세포, 세포사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 혼합알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 함유하는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 가지거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리체를 형성할 수 있으며,

L'는 L과 다른 이좌배위 리간드인 것을 특징으로 하는 제조방법.

청구항 15

제9항 내지 제13항 중 어느 한 항에 따르는 인광 물질을 함유하는 유기 전계발광 장치.

청구항 16

유기 전계발광 장치에 사용되는 제9항 내지 제13항 중 어느 한 항에 따르는 인광 물질의 용도.

청구항 17

유기 전계발광 장치에 발광 물질로서 사용되는 제9항 내지 제13항 중 어느 한 항에 따르는 인광 물질의 용도.

명세서

기술 분야

[0001] 본 발명은 신규한 인광 물질 및 이를 함유하는 전계발광 장치에 관한 것이다.

배경기술

- [0002] 유기 전계발광 장치는 일반적으로 애노드(anode)와 캐소드(cathode)로 이루어지는 한 쌍의 전극과, 정공수송층(hole transporting layer), 발광층(emission layer)(발광물질을 함유) 및 전자수송층을 포함하는 단층 또는 다층으로 구성된다. 정공 및 전자는 각각 애노드 및 캐소드로부터 유기층으로 주입되고 그럼으로써 발광물질 내의 엑시톤(excitons)을 형성한다. 엑시톤이 기저상태로 천이되면 발광물질은 광을 방출한다.
- [0003] Eastman Kodak Co. ("Appl. Phys. Lett", vol. 51, pp. 913 (1987)의 최초 연구에 따르면, 알루미늄 퀴놀리놀착물(전자수송 및 발광 물질)층과 트리페닐아민 유도체(정공 수송물질)층을 포함하는 유기 전계발광 장치는 10V의 전압 인가시 약 $1,000 \text{ cd/m}^2$ 발광을 갖는다. 관련 미국 특허의 예는 미국 특허 제 4,539,507호, 제4,720,432호 및 제 4,885,211호를 포함한다.
- [0004] 이러한 장치의 발광은 두 주요 카테고리 중의 하나, 즉 발광 물질이 형광 물질인지 또는 인광 물질인지에 따라, 형광 또는 인광이 될 수 있다. 발광이 획득되는 메커니즘은 상기 카테고리의 물질 간에 다르다. 최근, 인광 물질의 수율(quantum yield)이 높기 때문에 유기 전계발광 장치에 이러한 물질을 사용하는 것에 관심이 증가하고 있다.
- [0005] 일례로서, Baldo 외(Baldo et al.)의 연구에서 도편트(dopant)로서 인광 물질을 사용하는 유망한 OLED(유기 발광 다이오드)가 발표되었다. 이 인광 OLED의 수율은 현저하게 향상되었다(미국 특허 제 6,830,828호). 구성요소로서 소분자 및 고분자 유기 물질을 함유하는 OLED 장치가 보고되어 있다.

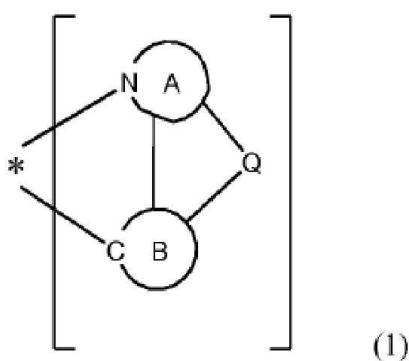
발명의 내용

해결하려는 과제

- [0006] 과거 20년 동안, OLED는 그 성능 면에서 현저한 진전을 보여왔으나, 여전히 해결해야 할 문제점이 존재한다. 예를 들어, 발광 물질 특성은 OLED가 방출할 수 있는 광의 가변성(tunability) 면에서 개선의 여지가 있다. 따라서, 신규한 또는 향상된 특성을 가지는 신규한 인광 물질을 개발하는데 관심을 두고 있다.

과제의 해결 수단

- [0007] 본 발명은 신규한 범위의 인광 물질을 제공한다. 또한 본 발명은 이러한 인광 물질을 함유하는 신규한 유기 전계발광 장치를 제공한다.
- [0008] 본 발명의 제1 양태는
- [0009] - 애노드 및 캐소드를 포함하는 한 쌍의 전극과,
 - [0010] - 상기 한 쌍의 전극 사이에 배치되는 하나 이상의 유기 화합물층을 포함하는 유기 전계발광 장치로서,
 - [0011] 상기 유기 화합물층 또는 하나 이상의 유기 화합물층은 인광 물질을 함유하며,
 - [0012] 상기 인광 물질은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속원자 M과 하나 이상의 리간드 L의 착물(complex)을 포함하고,
 - [0013] 상기 리간드 L은 하기 화학식 1에 의해 표현되고,



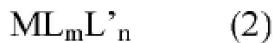
- [0014]

- [0015] 이 화학식에서,
- [0016] - 고리 A는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 가지며 비치환 또는 하나 이상의 치환기(substituent)로 치환된 5-원 헤테로고리(5-membered heterocycle)이고,
- [0017] - 고리 B는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 탄소원자를 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5- 또는 6-원 탄소고리(carbocycle) 또는 헤테로고리이고,
- [0018] - 고리 A와 B는 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 연결되어 있고,
- [0019] - 고리 A와 B는 테더(tether) Q에 의해 연결되어 있고, 여기서
- [0020] - Q는 길이가 3 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 테더이며, 상기 테더 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-로 치환될 수 있고, 상기 -Si- 및 -P- 원자는 그 원자가(valency)를 기초로 하는 치환기를 가지고, 상기 테더의 탄소, 질소, 규소 또는 인 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 포스포네이트, 세파이드, 세폰, 세폭사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 헤테로아릴, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 함유하는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 가지거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리계(fused ring system)를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 장치를 제공한다.
- [0021] 인광 물질은 유기 전계발광 장치의 발광 물질로서 사용될 수 있다. 인광 물질은 장치의 한 층 또는 장치의 한 층의 구성요소를 형성할 수 있다. 예를 들어, 인광 물질은 호스트 물질(host material) 내에 도편트로서 존재할 수 있는데, 이 때 호스트 물질은 전자수송 물질 또는 정공수송 물질이거나 둘 다 일 수 있다.
- [0022] 유기 전계발광 장치에 사용되는 인광 물질의 고리 A 및 B의 가능한 치환기는 독립적으로,
- [0023] - 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 세파이드, 세폰, 세폭사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기, 및
- [0024] - 치환 또는 비치환 알킬, 치환 또는 비치환 아릴, 및 치환 또는 비치환 알킬-아릴로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 여기서:
- [0025] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -CONH-, -C=N-, -NH-, -Si- 및 -P-(이 때, -Si- 및 -P- 원자는 원자가를 기초로 하여 중성을 위한 치환기를 함유)로 이루어진 군으로부터 선택되는 기 또는 원자로 치환될 수 있고,
- [0026] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 상의 치환기는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 세파이드, 세폰, 세폭사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0027] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴은 추가적으로 테더 Q와 연결되거나, 두 지점에서 중심 고리(A 또는 B)에 부착되어 융합 고리 또는 고리계를 형성할 수 있다.
- [0028] 본 발명의 제2 양태는
- [0029] - 애노드 및 캐소드를 포함하는 한 쌍의 전극과,
- [0030] - 상기 한 쌍의 전극 사이에 배치되는 하나 이상의 유기 화합물층을 함유하는 유기 전계발광 장치로서;
- [0031] 여기서, 유기 화합물층 또는 하나 이상의 유기 화합물층은 인광 물질을 함유하고,
- [0032] 상기 인광 물질은 하기 화학식 2를 가지며,

$ML_mL'_n$ (2)

[0033]

- [0034] 상기 화학식에서,
- [0035] M은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속 원자이고,
- [0036] L은 상술한 바와 같이 화학식 1에 의해 표현되는 리간드이고,
- [0037] L'은 L과 다른 아이덴티티의 이좌배위(bidentate) 리간드이고,
- [0038] m은 1, 2 및 3으로부터 선택되는 정수이고,
- [0039] n은 0, 1 및 2로부터 선택되는 정수인 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 장치를 제공한다.
- [0040] 본 발명의 제3 양태는 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속 원자 M과 하나 이상의 리간드 L(여기서, 리간드 L은 상술한 바와 같이 화학식 1에 의해 표현되는 리간드임)의 착물을 포함하는 인광 물질을 제공한다.
- [0041] 본 발명의 제4 양태는 하기 화학식 2를 갖는 인광물질로서,



- [0042]
- [0043] 상기 화학식에서,
- [0044] M은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속 원자이고,
- [0045] L은 상술한 바와 같이 화학식 1에 의해 표현되는 리간드이고,
- [0046] L'은 L과 다른 이좌배위 리간드이고,
- [0047] m은 1, 2 및 3으로부터 선택되는 정수이고,
- [0048] n은 0, 1 및 2로부터 선택되는 정수인 것을 특징으로 하는 인광 물질을 제공한다.
- [0049] 본 발명의 제5 양태는 인광 물질의 제조방법으로서,
- [0050] - 전구물질 착물인 금속 M과 리간드 L을 원하는 수의 리간드 L이 금속 M과 배위결합되는 생성물을 수득하기에 적합한 비로 반응시키는 단계와, 임의선택적으로,
- [0051] - 상기 생성물과 또 다른 리간드 L'를 생성물에 원하는 수의 리간드 L을 주입하기에 적합한 비로 반응시키는 단계를 포함하며,
- [0052] M은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속 원자이고,
- [0053] L은 상술한 바와 같이 화학식 1에 의해 표현되는 리간드이고,
- [0054] L'은 L과 다른 이좌배위 리간드인 것을 특징으로 하는 인광 물질의 제조방법을 제공한다.
- [0055] 본 발명의 제6 양태는 제3 또는 제4 양태의 인광 물질을 함유하는 유기 전계발광 장치를 제공한다.
- [0056] 본 발명의 제7 양태는 유기 전계발광 장치에 사용되는 제3 또는 제4 양태의 인광 물질의 용도를 제공한다.
- [0057] 본 발명의 제8 양태는 유기 전계발광 장치에 발광 물질로서 사용되는 제3 또는 제4 양태의 인광 물질의 용도를 제공한다.

도면의 간단한 설명

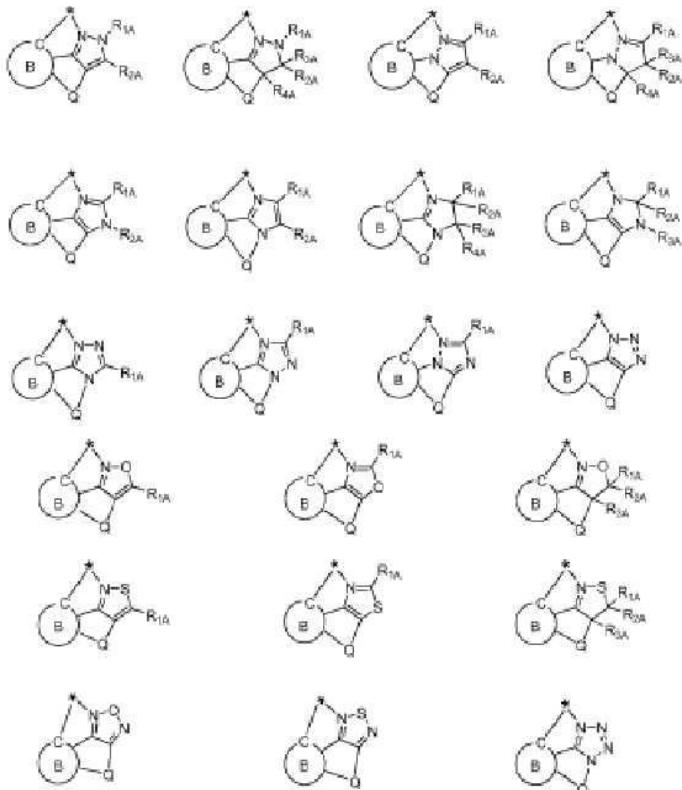
- [0058] 도 1은 본 발명의 제1 구현예에 따르는 유기 전계발광 장치의 기본 구조를 도시한 개략도이다.
 도 2는 본 발명의 제2 구현예에 따르는 유기 전계발광 장치의 기본 구조를 도시한 개략도이다.
 도 3은 본 발명의 제3 구현예에 따르는 유기 전계발광 장치의 기본 구조를 도시한 개략도이다.
 도 4는 본 발명의 제4 구현예에 따르는 유기 전계발광 장치의 기본 구조를 도시한 개략도이다.
 도 5는 10으로서 예시되는 화합물의 실온에서의 발광 스펙트럼(emission spectrum)을 보여주는 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0059] 본 발명의 유기 전계발광 장치에 사용되는 인광 물질은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되는 금속 원자 M과 하나 이상의 화학식 1의 리간드 L의 착물을 포함한다.
- [0060] 일부 구현예에서 인광 물질은 동종리간드성(homoleptic)(즉, 화학식 1에 의해 표현되는 리간드 L의 범주에 속하는 동일한 리간드들 포함)일 수 있다.
- [0061] 대체적 구현예에서 인광 물질은 이종리간드성(heteroleptic)(즉, 화학식 1에 의해 표현되는 리간드 L의 범주에 속하는 상이한 리간드들을 포함하거나, 화학식 1에 의해 표현되는 리간드 L의 범주에 속하는 하나 이상의 리간드 및 다른 리간드(예컨대, 이후에 기술되는 화학식 5, 화학식 6 또는 화학식 7을 갖는 이좌배위 리간드 L')를 포함함)일 수 있다.
- [0062] 본 명세서에서 "인광 물질"이라는 표현에서 "물질"이라는 용어는 필요한 금속 및 화학식 1의 리간드를 함유하는 화학물질을 의미하는 것으로 광범위한 의미로 사용되며, 화합물, 착물, 고분자, 모노머 및 유사 물질까지 포함한다. 인광 물질의 몇가지 형태는 고분자 형태인 것으로 이해될 것이다. 물질이 "인광"이라는 의미는 여기 후 액시톤의 기저 상태로의 천이를 통해 광을 방출할 수 있는 특성을 가진 물질을 말한다. 이는 전형적으로 트리플렛 액시톤 상태로부터 유래한다.
- [0063] 인광 물질은 인광 착물 또는 인광 유기금속 착물이라고도 불릴 수 있다.
- [0064] 일부 구현예에 따르면, 금속 원자는 Ir이다. 금속 원자로서 Ir을 함유하는 이러한 인광 물질은 인광 이리듐 착물이라고 불릴 수 있다.
- [0065] 인광 이리듐 착물의 경우, 이리듐은 대상 리간드와 6-배위(hexa-coordinate) 착물을 형성하는 경향이 있다. 화학식 1의 리간드는 이리듐과 2개의 배위 자리에서 배위결합한다. 인광 물질은 3개 이하의 화학식 1의 리간드 L을 함유하거나, 하나 또는 2개의 화학식 1의 리간드와 하나 이상의 추가적 리간드를 함유할 수 있다.
- [0066] 금속 원자가 6-배위결합되고 착물의 모든 리간드가 이좌배위인 경우, 인광 물질은 3개의 이좌배위 리간드, 특히 하나 내지 3개의 화학식 1의 리간드 L 및 0, 1 또는 2개의 추가적 리간드 L'함유할 수 있다.
- [0067] 인광 물질은 화학식 2를 갖는 물질일 수 있다.

$ML_mL'_n$ (2)

- [0068]
- [0069] 상기 화학식에서, M 및 L은 앞서 기술한 바와 같고, L'는 L과 다른 이좌배위 리간드이고, m은 1, 2 및 3으로부터 선택되는 정수이고, n은 0, 1 및 2로부터 선택되는 정수이다.
- [0070] 금속 원자가 Ir, Ru, Rh 또는 Os인 경우와 같이 6-배위결합되는 경우, m + n은 3이다.
- [0071] 인광 물질에 존재할 수 있는 추가적 리간드 L'에 관한 상세한 설명은 이후 기술된다.
- [0072] Pt, Pd와 같은 금속 원자의 경우, 인광 물질은 1 또는 2개의 화학식 1의 리간드 L 및 0 또는 1개의 추가적 이좌배위 리간드를 함유할 수 있다. 따라서 이러한 금속 원자의 경우, 화학식 2에서 m + n은 2이다.
- [0073] 고리 A
- [0074] 화학식 1에 의해 표현되는 리간드 L은 하나 이상의 질소 원자를 갖는 5-원 방향족 또는 비방향족 헤테로고리인 고리A를 함유하며, 이 때 질소 원자는 금속 원자와 결합될 수 있거나 연결되어 있다. 고리 A의 다른 4개 원자는 탄소(H 또는 치환기 함유), 질소(임의선택적으로 H 또는 치환기 함유), 산소 및 황 원자로부터 선택될 수 있다.
- [0075] 본 발명에 포함될 수 있는 고리 A의 예를 들면,
- [0076] N 및 C를 함유하는 고리, 예컨대 피라졸, 피라졸린, 이미다졸, 이미다졸린, 트리아졸, 테트라졸;
- [0077] N, C 및 O를 함유하는 고리, 예컨대 옥사졸, 옥사졸린, 옥사디아졸;
- [0078] N, C 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 티아졸, 티아졸린, 티아디아졸; 및 그 융합 유도체가 있다. 이러한 고리의 일부가 하기에 예로서 예시되어 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0079]

[0080] 한 구현예에 따르면, 고리 A의 화학식 1에 예시된 질소 원자가 아닌 4개의 원자는 탄소 또는 질소이며, 이 때 탄소 원자는 H 또는 치환기를 가지고 질소 원자는 H 또는 치환기를 가질 수 있다.

[0081] 고리 A의 원자 상의 가능한 치환기(예컨대, 상기 기재된 고리 A의 예에서 보여준 치환기 R_{1A} to R_{4A})는

[0082] - 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설플라이드, 설휐, 설포사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기, 및

[0083] - 치환 또는 비치환 알킬, 치환 또는 비치환 아릴, 및 치환 또는 비치환 알킬-아릴로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 여기서;

[0084] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-(이 때, -Si- 및 -P- 원자는 원자가를 기초로 하여 중성을 위한 치환기를 함유)로 이루어진 군으로부터 선택되는 기 또는 원자로 치환될 수 있고,

[0085] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 상의 치환기는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설플라이드, 설휐, 설포사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0086] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴은 추가적으로 테더 Q와 연결되거나, 두 지점에서 고리 A에 부착되어 융합고리 또는 고리계를 형성할 수 있다.

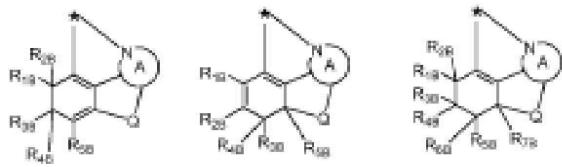
[0087] 고리 B

[0088] 화학식 1로 나타난 리간드 L은, 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 금속 원자와 결합되어 있거나 결합될 수 있는 탄소원자를 함유하는 5-원 또는 6-원 방향족 또는 비방향족 탄소고리 또는 헤테로고리인 고리 B를 함유한다.

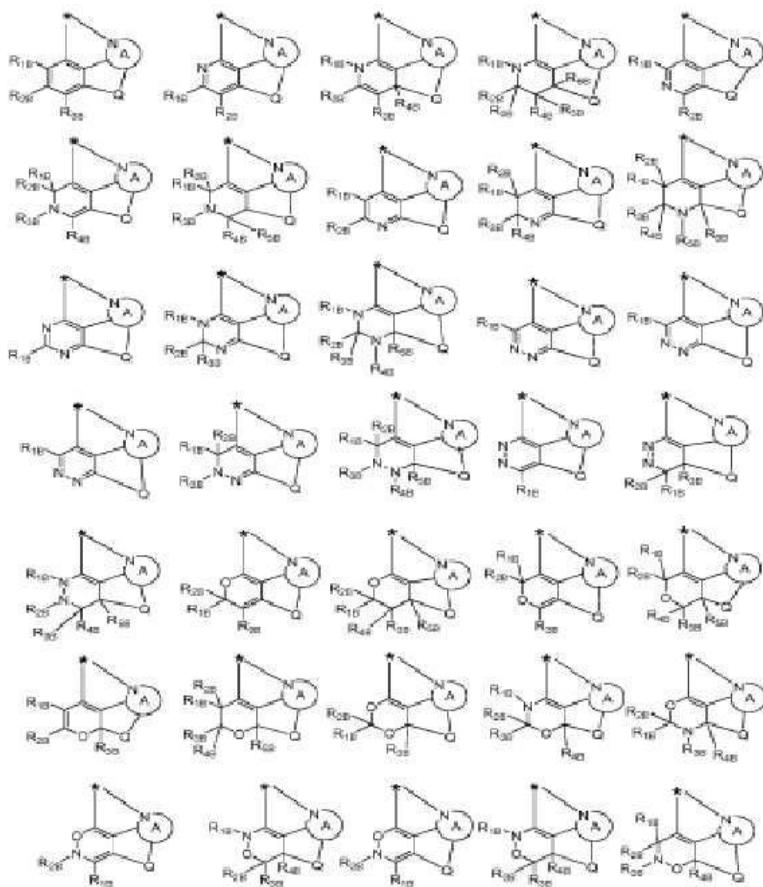
[0089] 고리 B의 다른 4 또는 5개의 원자는 탄소(H 또는 치환기 함유), 질소(치환 또는 비치환될 수 있음), 산소 및 황

원자로부터 선택된다. 일부 예로서, 고리 B는 C만을 함유하는 고리, 예컨대 벤젠, 시클로헥센, 시클로헥사디엔, 시클로펜텐 및 시클로펜타디엔; N 및 C를 함유하는 고리, 예컨대 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피롤, 피라졸, 디하이드로피리딘, 디하이드로피리다진, 디하이드로피리미딘, 피롤린, 피라졸린; O 및 C를 함유하는 고리, 예컨대 피란, 디옥신, 푸란, 디하이드로피란, 디하이드로푸란; S 및 C를 함유하는 고리, 예컨대 티오펜, 디하이드로티오펜; N, C 및 O를 함유하는 고리, 예컨대 옥사진, 옥사졸, 디하이드로옥사진; S, C 및 O를 함유하는 고리, 예컨대 옥사티아진, 디하이드로옥사티아진; N, C 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 티아졸; N, C, O 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 옥사티아졸; 및 그 용합 유도체로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

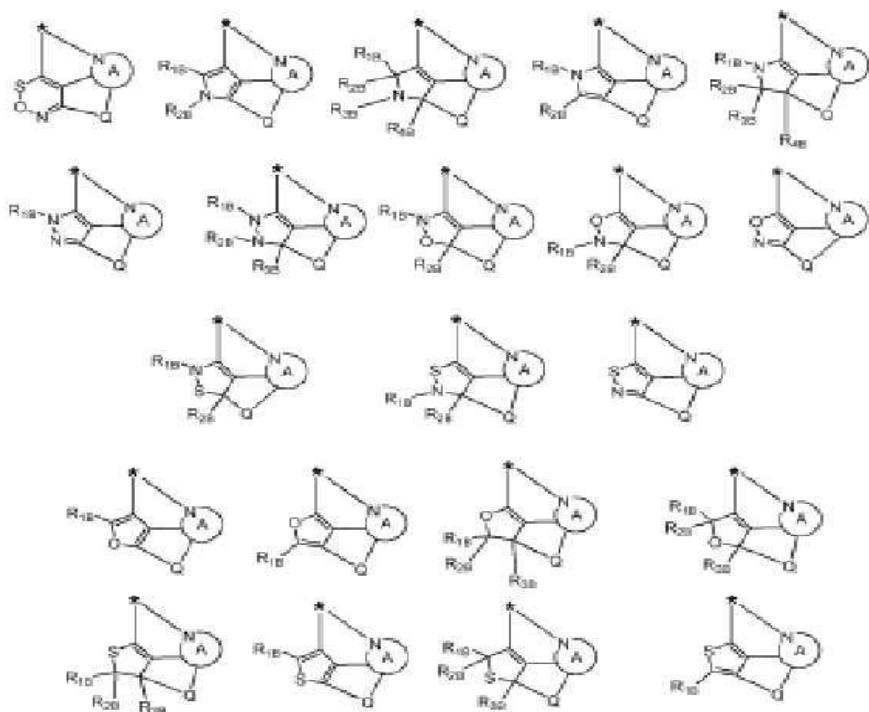
[0090] 고리 B로 가능한 몇몇 고리 구조의 예를 하기에 예시하고 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0091]



[0092]



[0093]

[0094] 한 구현예에 따르면, 고리 B에서 기술된 탄소 원자가 아닌 4 또는 5개의 원자는 각각 탄소, 질소 또는 황이다.

[0095] 고리 B의 원자 상의 가능한 치환기(예컨대, 상기 기재된 고리 B의 예에서 보여준 치환기 R_{1B} 내지 R_{4B})는

[0096] - 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설파이드, 설폰, 설포사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기, 및

[0097] - 치환 또는 비치환 알킬, 치환 또는 비치환 아릴, 및 치환 또는 비치환 알킬-아릴로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 여기서:

[0098] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-(이 때, -Si- 및 -P- 원자는 원자가를 기초로 한 치환기를 함유)로 이루어진 군으로부터 선택되는 기 또는 원자로 치환될 수 있고,

[0099] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 상의 치환기는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설파이드, 설폰, 설포사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0100] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴은 추가적으로 테더 Q와 연결되거나, 두 지점에서 고리 B에 부착되어 융합고리 또는 고리계를 형성할 수 있다.

[0101] 고리 A와 B는 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 연결되어 있다.

[0102] 또한 고리 A와 B는 테더 Q에 의해 연결되어 있다.

[0103] 테더 Q

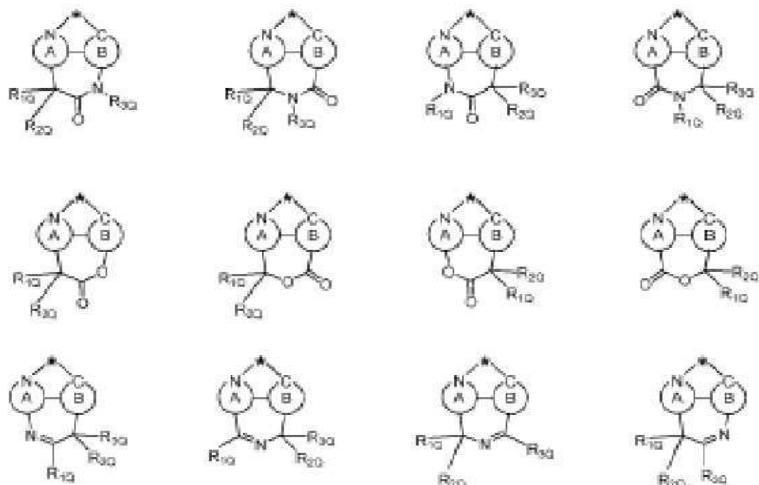
[0104] Q는 길이가 3 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 테더이며, 여기서,

[0105] - 상기 테더 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -P-(Si- 및 -P- 원자는 원자가를 기초로 한 치환기를 함유)로 치환될 수 있고,

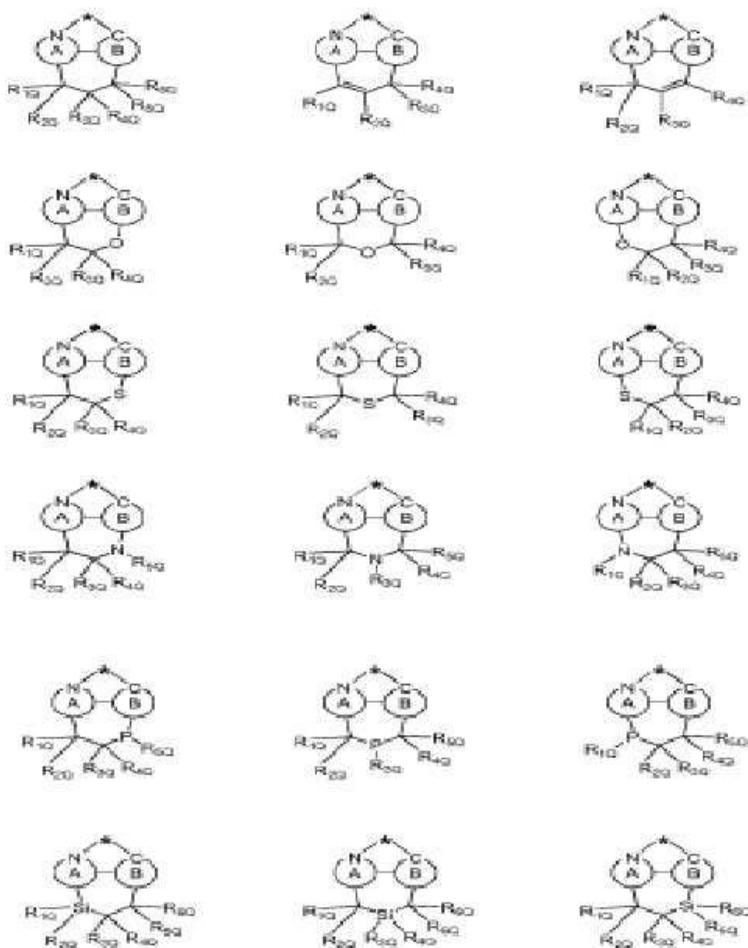
[0106] - 상기 테더의 탄소, 질소, 규소 또는 인 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘,

아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 살파이드, 살폰, 살폭사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 헤테로아릴, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기(예컨대, R_{1Q} 내지 R_{6Q}로서 하기에 기술)를 함유하거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리계를 형성할 수 있다. 융합 고리계의 고리는 임의선택적으로 고리 A 및 B 중의 하나 또는 둘 다에 부착되거나 융합될 수 있다.

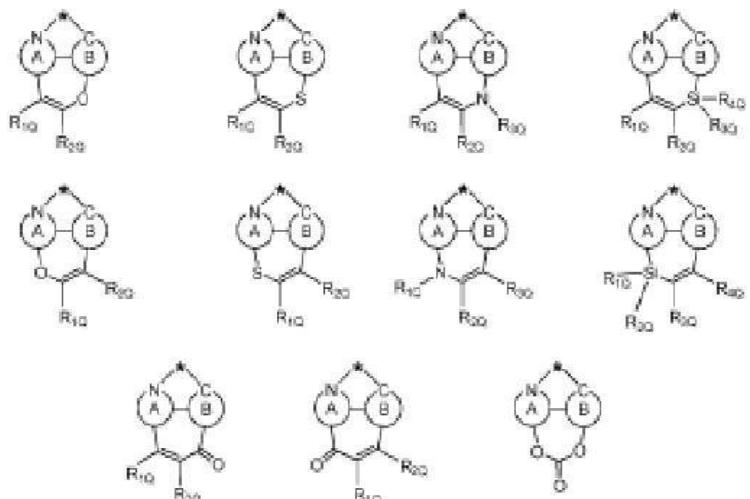
[0107] 적합한 테더 Q의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0108]



[0109]

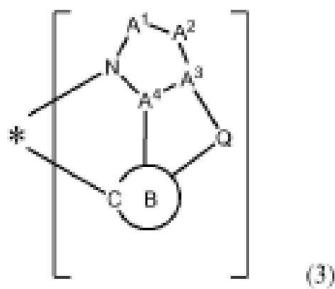


[0110]

[0111] 테더는 3개 이상의 탄소원자의 길이를 갖는다는 점에 주목할 것이다. 따라서 고리 A 및 B의 원자와 결합되면, 최소한 7-원 고리가 형성된다. 4개 원자(탄소 또는 탄소 치환기)의 길이를 갖는 테더는 8-원 고리를 형성하며, 테더 길이의 증가에 의해 그에 따른 고리가 형성된다.

[0112] 리간드 L의 특정 구현예

[0113] 한 구현예에 따르면, 리간드 L은 하기 화학식 3을 갖는다.



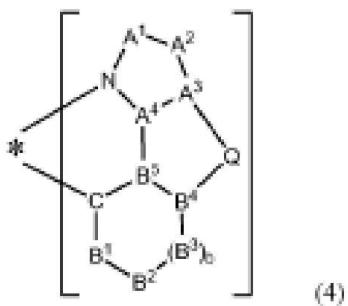
[0114]

[0115] 상기 화학식에서, Q 및 고리 B는 앞서 기술한 바와 같으며,

[0116] A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 C, N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이 때 C 또는 N은 치환 또는 비치환될 수 있고,

[0117] A^3 및 A^4 는 C 및 N으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이 때 C는 치환 또는 비치환될 수 있다.

[0118] 한 구현예에 따르면, 리간드 L은 하기 화학식 4를 갖는다.



[0119]

[0120] 상기 화학식에서, Q는 앞서 기술한 바와 같으며,

[0121] A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 C, N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이 때 C 또는 N은 치환 또는 비치환될 수 있으며,

[0122] A^3 및 A^4 는 C 및 N으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이 때 C는 치환 또는 비치환될 수 있으며,

[0123] B^1 및 B^2 는 각각 독립적으로 C, N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이 때 C 또는 N은 치환 또는 비치환될 수 있으며,

[0124] B^3 는 존재하는 경우, C, N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이 때 C 또는 N은 치환 또는 비치환될 수 있으며,

[0125] b는 0 또는 1이며,

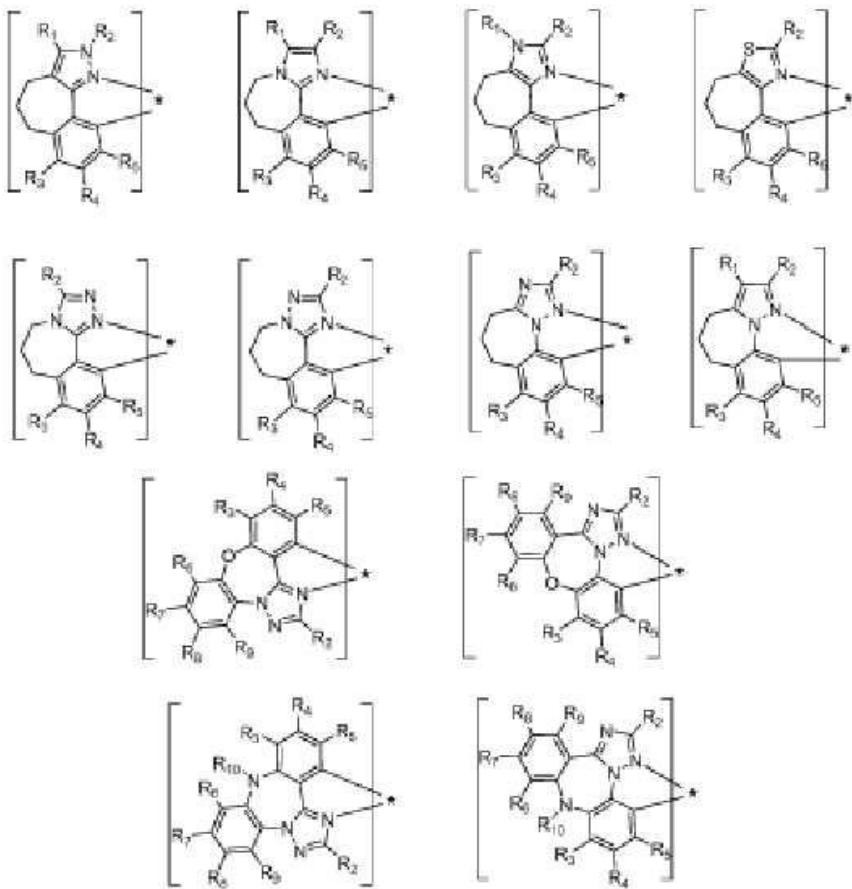
[0126] B^4 는 C 및 N으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이 때 C는 치환 또는 비치환될 수 있으며,

[0127] B^5 는 C이다.

[0128] A^1 , A^2 , B^1 , B^2 및 B^3 (존재하는 경우) 상의 임의선택적 치환기는 고리 A 및 B의 임의선택적 고리 치환기에 대해 앞서 기술한 바와 같다.

[0129] 일부 구현예에 따르면, A^1 및 A^2 는 C 또는 N이고, 이 때 C 또는 N은 치환 또는 비치환된다. 일부 구현예에 따르면, B^1 , B^2 및 B^3 (존재하는 경우)는 C, N 또는 S로부터 선택되고, 이 때 C 또는 N은 치환 또는 비치환된다.

- [0130] 적합한 리간드 L의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



- [0131]

- [0132] 상기 화학식들에서,

- [0133] $R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9$ 및 R_{10} 은 독립적으로,

- [0134] - 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설플라이드, 설폰, 설포사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기, 및

- [0135] - 치환 또는 비치환 알킬, 치환 또는 비치환 아릴, 및 치환 또는 비치환 알킬-아릴로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며;

- [0136] - 상기 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 내의 하나 이상의 탄소 원자는 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO_2-$, $-CH=CH-$, $-C=C-$, $-NH-$, $-CONH-$, $-C=N-$, $-Si-$ 및 $-P-$ (이 때, $-Si-$ 및 $-P-$ 원자는 원자가를 기초로 한 치환기를 함유)로 이루어진 군으로부터 선택되는 기 또는 원자로 치환될 수 있고,

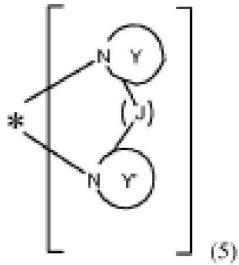
- [0137] - 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 상의 치환기는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 설플라이드, 설폰, 설포사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

- [0138] 추가적 리간드 L

- [0139] 일반적으로 당해 분야에 알려진 리간드는 화학식 1의 리간드 L의 수가 금속 원자와의 모든 배위결합 자리를 차지하기에 충분하지 못한 경우, 금속 원자와 착물을 형성할 수 있는 추가적 리간드로서 사용될 수 있다. 이는 일좌배위(monodentate)일 수도 있고, 이좌배위, 삼좌배위, 사좌배위 등과 같은 다좌배위(multidentate)일 수도 있

다. 바람직한 것은 이좌배위 리간드이다.

- [0140] 일부 구현예에 따르면, 추가적 리간드 L'가 이좌배위이다. 몇몇 예는 하기 화학식 5, 화학식 6 및 화학식 7을 갖는다.



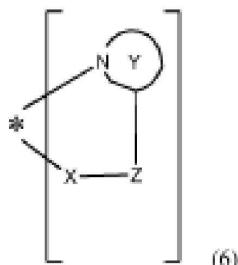
[0141]

[0142] 상기 화학식에서,

- [0143] - 고리 Y는 상기 화학식에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합될 수 있는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 혼태로고리이고,

- [0144] - 고리 Y는 상기 화학식에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합될 수 있는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 혼태로고리이고,

- [0145] - 고리 Y'는 화학식 5에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 또는 링커 J에 의해 연결되어 있고, 여기서 J(존재하는 경우)는 고리 Y 및 Y' 둘 다에 공유결합되는 B, C, O, N, P, Si 또는 S 원자이며 그 원자가에 따라 치환 또는 비치환될 수 있다.



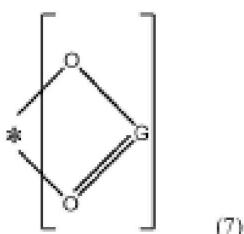
[0146]

[0147] 상기 화학식에서,

- [0148] - 고리 Y는 앞서 기술한 바와 같고

- [0149] - Z는 고리 Y와 공유결합에 의해 연결되어 있고 X에 의해 금속 원자와 연결되어 있는 리간드 컴포넌트이고,

- [0150] - X는 별표(*) 위치에서 금속 M과 결합할 수 있는 N, O, S 또는 P 원자이며, 이 때 N 또는 P 원자는 비치환 또는 치환된다.



[0151]

[0152] 상기 화학식에서,

- [0153] G는 일- 또는 이-치환되거나 비치환된 탄소원자를 함유하는 리간드 컴포넌트로서, 2개의 O 원자와 공유결합에 의해 연결되어 있고,

- [0154] 0 원자는 별표(*) 위치에서 금속 M과 각각 결합할 수 있다.
- [0155] Y 및 Y'
- [0156] 각각의 화학식 5 및 화학식 6의 Y 및 Y'각각은 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 헤테로고리로부터 독립적으로 선택된다. Y 및 Y'는 화학식 5 및 화학식 6에 나타나 있는 바와 같이 하나 이상의 질소원자를 함유한다.
- [0157] 고리 Y 및 Y'의 다른 4, 5, 또는 6개 원자는 탄소(H 또는 치환기 함유), 질소(치환 또는 비치환), 산소, 황 및 규소(치환 또는 비치환) 원자로부터 선택된다.
- [0158] 일부 예로서, 고리 Y 및 Y'(하나 이상의 질소 원자를 함유)는
- [0159] N 및 C를 함유하는 고리, 예컨대 피라졸, 피라졸린, 이미다졸, 이미다졸린, 트리아졸, 테트라졸, 피롤리딘, 피롤린, 피롤, 이미다졸리딘, 피라졸리딘, 피페리딘, 피리딘, 디하이드로피리딘, 피페라진, 디하이드로페라진, 피라진, 피리다진, 디하이드로피리다진, 디하이드로피리미딘, 피리미딘, 디하이드로트리아진, 트리아진, 아제핀, 디하이드로아제핀, 테트라하이드로아제핀, 아제판, 디아제핀, 디하이드로디아제핀, 테트라하이드로디아제판, 디아제판;
- [0160] N, C 및 O를 함유하는 고리, 예컨대 옥사졸, 옥사졸린, 옥사디아졸, 디옥사졸, 옥사트리아졸, 모르폴린, 옥사진, 디하이드로옥사진, 옥사디아진, 디하이드로옥사디아진;
- [0161] N, C 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 티아졸, 티아졸린, 티아디아졸, 티오모르폴린, 티아진, 디하이드로티아진;
- [0162] N, C, O 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 옥사티아졸; 및
- [0163] 그 융합 유도체; 및
- [0164] 상기 고리의 실라-함유 변이체로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.
- [0165] 고리 Y 및 Y'의 원자 상의 가능한 치환기는 독립적으로,
- [0166] - 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 살파이드, 살폰, 살폭사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기, 및
- [0167] - 치환 또는 비치환 알킬, 치환 또는 비치환 아릴, 및 치환 또는 비치환 알킬-아릴로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며;
- [0168] 여기서, 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -CONH-, -C=N-, -NH-, -Si- 및 -P-(이 때, -Si- 및 -P- 원자는 그 원자가를 기초로 한 치환기 함유)로 이루어진 군으로부터 선택되는 기 또는 원자로 치환될 수 있고,
- [0169] 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 상의 치환기는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 살파이드, 살폰, 살폭사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0170] 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴은 추가적으로 다른 리간드의 고리와 연결되거나, 두 지점에서 중심 고리에 부착되어 융합 고리 또는 고리계를 형성할 수 있다.
- [0171] 리간드 컴포넌트 J
- [0172] J(존재하는 경우)는 그 원자가에 따라서 치환 또는 비치환될 수 있는 B, C, O, N, P, Si, S로부터 선택된다. 이러한 치환기는 독립적으로,
- [0173] -길이가 1 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기(이 때, 상기 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-으로 치환될 수 있고, 상기 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기의 탄소 또는 질소 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 살파이드, 살폰, 살폭사이드, 알케닐, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

폭사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 헤테로아릴, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 함유하거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리계를 형성할 수 있음), 또는

[0174] - 자체적으로 비치환 또는 치환될 수 있는 5-, 6- 및 7-원 탄소고리 또는 헤테로고리로부터 선택될 수 있다.

[0175] 5-, 6- 및 7-원 탄소고리 또는 헤�테로고리의 예로는

[0176] C를 함유하는 고리, 예컨대 벤젠;

[0177] N 및 C를 함유하는 고리, 예컨대 피롤리딘, 피롤린, 피롤, 이미다졸리딘, 이미다졸린, 이미다졸, 피라졸리딘, 피라졸린, 피라졸, 트리아졸, 테트라졸, 피페리딘, 피리딘, 디하이드로피리딘, 피페라진, 디하이드로피라진, 피라진, 피리다진, 디하이드로피리다진, 디하이드로피리미딘, 피리미딘, 디하이드로트리아진, 트리아진, 아제핀, 디하이드로아제핀, 테트라하이드로아제핀, 아제판, 디아제핀, 디하이드로디아제핀, 테트라하이드로디아제판, 디아제판;

[0178] N, C 및 O를 함유하는 고리, 예컨대 옥사졸린, 옥사졸, 옥사디아졸, 디옥사졸, 옥사트리아졸, 모르폴린, 옥사진, 디하이드로옥사진, 옥사디아진, 디하이드로옥사디아진;

[0179] N, C 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 티아졸린, 티아졸, 티아디아졸;

[0180] N, C, O 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 옥사티아졸, 티오모르폴린, 티아진, 디하이드로티아진; 및

[0181] 상기 고리의 실라-함유 변이체가 있다.

리간드 컴포넌트 Z

[0183] Z는 고리 Y와 공유결합에 의해 연결되어 있고 X에 의해 금속 원자와 연결되어 있는 리간드 컴포넌트이다.

[0184] 리간드 컴포넌트 Z에 관한 기술에서, "리간드 컴포넌트"라는 용어는 고리 Y와 원자 X 사이에 위치하여 이에 의해 리간드가 금속 원자와 부착될 수 있는 기 또는 모이어티(moiety)를 의미한다. 예로서 리간드 컴포넌트는

[0185] - 길이가 1 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기(이 때, 상기 리간드 컴포넌트 내의 하나 이상의 탄소 원자는 -O-, -S-, -CO-, -CO₂-, -CH=CH-, -C=C-, -NH-, -CONH-, -C=N-, -Si- 및 -B-(이 때, -Si- 및 -B-는 원자가를 기초로 한 치환기를 함유)으로 치환될 수 있고, 상기 리간드 컴포넌트의 탄소, 질소, 규소 또는 봉소 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 세파이드, 세풀론, 세폭사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 헤테로아릴, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 함유하거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리계를 형성할 수 있음); 또는

[0186] - 비치환 또는 치환될 수 있는 5-, 6- 및 7-원 탄소고리 또는 헤테로고리로부터 선택될 수 있다.

[0187] 5-, 6- 및 7-원 탄소고리 또는 헤�테로고리의 예로는

[0188] C를 함유하는 고리, 예컨대 벤젠;

[0189] N 및 C를 함유하는 고리, 예컨대 피롤리딘, 피롤린, 피롤, 이미다졸리딘, 이미다졸린, 이미다졸, 피라졸리딘, 피라졸린, 피라졸, 트리아졸, 테트라졸, 피페리딘, 피리딘, 디하이드로피리딘, 피페라진, 디하이드로피라진, 피라진, 피리다진, 디하이드로피리다진, 디하이드로피리미딘, 피리미딘, 디하이드로트리아진, 트리아진, 아제핀, 디하이드로아제핀, 테트라하이드로아제핀, 아제판, 디아제핀, 디하이드로디아제핀, 테트라하이드로디아제판, 디아제판;

[0190] N, C 및 O를 함유하는 고리, 예컨대 옥사졸린, 옥사졸, 옥사디아졸, 디옥사졸, 옥사트리아졸, 모르폴린, 옥사진, 디하이드로옥사진, 옥사디아진, 디하이드로옥사디아진;

[0191] N, C 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 티아졸린, 티아졸, 티아디아졸;

[0192] N, C, O 및 S를 함유하는 고리, 예컨대 옥사티아졸, 티오모르폴린, 티아진, 디하이드로티아진; 및

[0193] 상기 고리의 실라-함유 변이체가 있다.

[0194] 리간드 컴포넌트 X

[0195] X는 N, O, S 또는 P 원자로부터 선택된다. X는 별표(*) 위치에서 금속 M과 1가 결합(monovalent bond)을 형성한다.

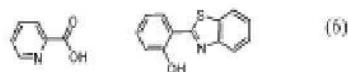
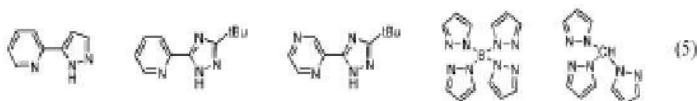
[0196] X가 N 또는 P이면, N 및 P 원자는 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴(이 때, 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기의 하나 이상의 탄소 원자가 N, O, S, P 또는 Si로 치환될 수 있으며 상기 대체 원자는 필요에 따라 그 원자를 기초로 하여 H 또는 다른 치환기를 함유), 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 셀파이드, 셀폰, 셀폭사이드, 알케닐, 알ки닐 또는 실릴기로 이루어지는 하나 이상의 치환기를 함유할 수 있다.

[0197] 리간드 컴포넌트 G

[0198] G는 일- 또는 이-치환되거나 비치환된 탄소원자를 함유하는 리간드 컴포넌트로, 부가적으로 응합 고리계의 일부를 형성할 수 있다. 적합한 치환기는 알킬, 아릴, 알케닐, 헤테로아릴, 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 셀파이드, 셀폰, 셀폭사이드, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 가지는 치환기를 포함한다. 임의선택적으로, 두 치환기가 함께 고리 또는 응합 고리계를 형성할 수 있다. G는 단일결합 또는 이중 결합에 의해 2개의 O 원자와 공유결합으로 연결되어 있다.

[0199] 화학식 5, 화학식 6 및 화학식 7의 리간드 L'의 예는 다음과 같다.

[0200]



[0201]

[0202] 착물

[0203] 앞서 기술한 바와 같이, 인광 물질은 하기 화학식 2를 가질수 있다.



[0204]

[0205] 상기 화학식에서, M 및 L은 앞서 기술한 바와 같으며, L'는 L과 다른 이좌배위 리간드이고, m은 1, 2 및 3으로부터 선택되는 정수이고, n은 0, 1 및 2로부터 선택되는 정수이다. 한 구현예에 따르면, m + n = 3이다.

[0206] 앞서 기술한 다양한 구현예를 조합하면, 본 발명의 한 구현예의 인광 물질은 하기 화학식 2를 갖는다.

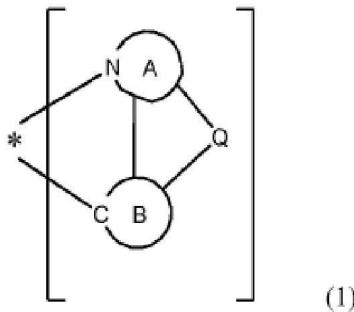


[0207]

[0208] 상기 화학식에서,

[0209] - M은 Ir, Pt, Rh, Pd, Ru 및 Os로부터 선택되고;

[0210] - L은 하기 화학식 1의 리간드이고;



[0211]

[0212] (여기서,

[0213] - 고리 A는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-원 혼테로고리이고,

[0214] - 고리 B는 상기 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 탄소원자를 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5- 또는 6-원 탄소고리 또는 혼테로고리이고,

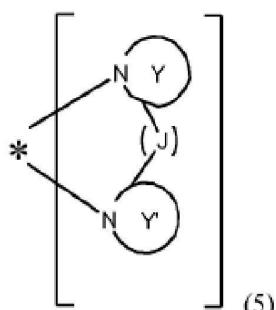
[0215] - 고리 A와 B는 화학식 1에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 연결되어 있고,

[0216] - 고리 A와 B는 테더 Q에 의해 연결되어 있고, 이 때

[0217] - Q는 길이가 3 내지 20개의 탄소원자인 직선형, 가지형 또는 고리형 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴 테더이고 상기 테더 내의 하나 이상의 탄소 원자는 $-O-$, $-S-$, $-CO-$, $-CO_2-$, $-CH=CH-$, $-C=C-$, $-NH-$, $-CONH-$, $-C=N-$, $-Si-$ 및 $-P-$ 로 치환될 수 있고, 상기 $-Si-$ 및 $-P-$ 원자는 그 원자가를 기초로 한 치환기를 가지고, 상기 테더의 탄소, 질소, 규소 또는 인 원자는 할로겐, 시아노, 아미드, 이민, 이미드, 아미딘, 아민, 니트로, 하이드록시, 에테르, 카보닐, 카복시, 카보네이트, 카바메이트, 포스핀, 포스페이트, 포스포네이트, 세파이드, 세폰, 세폭사이드, 알케닐, 아릴, 알킬, 혼테로아릴, 알키닐, 실릴 및 중합될 수 있는 작용기나 고분자 사슬을 함유하는 치환기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 가지거나, 두 치환기가 함께 고리 또는 융합 고리계를 형성할 수 있고, 상기 고리 또는 융합 고리계는 임의선택적으로 고리 A 및 B 중의 하나 또는 둘다에 부착되거나 융합될 수 있음)

[0218] - m은 1, 2 및 3으로부터 선택되는 정수이고;

[0219] - L'는 화학식 5, 화학식 6 및 화학식 7의 리간드로부터 선택되는 이좌배위 리간드이고;



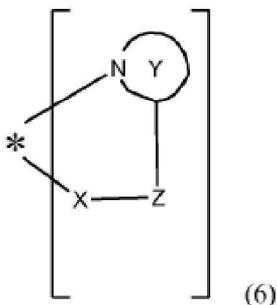
[0220]

[0221] (상기 화학식에서,

[0222] - 고리 Y는 상기 화학식에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 혼테로고리이고,

[0223] - 고리 Y'는 상기 화학식에 나타나 있는 바와 같이 별표(*) 위치에서 금속원자와 결합되는 질소원자를 하나 이상 함유하며 비치환 또는 하나 이상의 치환기로 치환된 5-, 6- 또는 7-원 혼테로고리이고,

- [0224] - 고리 Y와 Y'는 화학식 5에 나타나 있는 바와 같이 직접 공유결합에 의해 또는 링커 J에 의해 연결되어 있고, 여기서 J(존재하는 경우)는 고리 Y 및 Y'들 사이에 공유결합되는 B, C, O, N, P, Si 또는 S 원자이며 그 원자가에 따라 치환 또는 비치환될 수 있음)



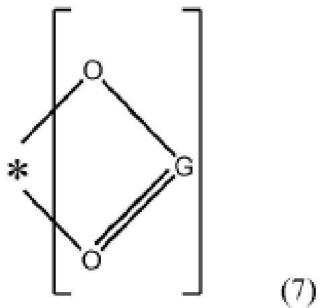
[0225]

[0226] (상기 화학식에서,

[0227] - 고리 Y는 앞서 기술한 바와 같고

[0228] - Z는 고리 Y와 공유결합에 의해 연결되어 있고 X에 의해 금속 원자와 연결되어 있는 리간드 컴포넌트이고,

[0229] - X는 별표(*) 위치에서 금속 M과 결합하는 N, O, S 또는 P 원자이며, 이 때 N 또는 P 원자는 비치환 또는 치환됨)



[0230]

[0231] (상기 화학식에서,

[0232] - G는 일- 또는 이-치환되거나 비치환된 탄소원자를 함유하는 리간드 컴포넌트로, 2개의 O 원자와 공유결합에 의해 연결되어 있고,

[0233] - O 원자는 각각 별표(*) 위치에서 금속 M과 결합되어 있음)

[0234] - n은 0, 1 및 2로부터 선택되는 정수이고; 및

[0235] - m + n = 2 또는 3이다.

인광 물질의 제조

[0237] 본 발명의 인광 물질은 하기 문헌에서 예로서 기술되어 있는 합성 절차를 이용하여 제조될 수 있다.

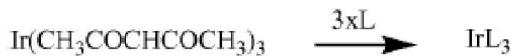
[0238] - Nonoyama, M., *Bull. Chem Soc. Jpn.*, 1974, 47, 767[0239] - Sergey Lamansky, Peter Djurovich, Drew Murphy, Feras Abdel-Razzaq, Raymond Kwong, Irina Tsyba, Manfred Bortz, Becky Mui, Robert Bau, and Mark E. Thompson *Inorg. Chem.* 2001, 40, 1704-1711[0240] - Sergey Lamansky, Peter Djurovich, Drew Murphy, Feras Abdel-Razzaq, Hae-Eun Lee, Chihaya Adachi, Paul E. Burrows, Stephen R. Forrest and Mark E. Thompson *J. Am. Chem. Soc.* 2001, 123, 4304-4312

[0241] 인광 물질은,

[0242] - 전구물질 착물인 금속 M과 리간드 L을 원하는 수의 리간드 L이 금속 M과 배위결합될 수 있는 생성물을

수득하기에 적합한 비로 반응시키는 단계와; 임의선택적으로,

- [0243] - 상기 생성물과 또 다른 리간드 L' 를 생성물에 원하는 수의 리간드 L' 를 주입하기에 적합한 비로 반응시키는 단계에 의해 간단하게 제조될 수 있다.
- [0244] 이 제조 기술의 예는 이후에 설명될 것이며 대표적인 금속으로서 Ir을 사용하였다. 그러나, 다른 금속을 함유하는 해당 인광 물질은 그에 상응하는 제조 기술에 의해 제조될 수 있다는 점을 이해해야 할 것이다.
- [0245] 한 예에서, 치환가능한 리간드(이 경우, $3\text{CH}_3\text{COCHCOCH}_3$ 리간드)를 포함하는 Ir(금속으로서)의 전구물질 착물을 3몰 당량의 리간드 L 과 반응시킴으로써 $\text{Ir}(L)_3$ 가 생성되도록 한다.



[0246]

- [0247] 다른 한 예에서, 치환가능한 리간드를 포함하는 Ir의 전구물질 착물(이 경우, 착체는 $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 이고, 리간드는 $-\text{Cl}$ 및 H_2O 임)을 2몰 당량의 리간드 L 과 반응시킴으로써 $[\text{IrL}_2\text{Cl}]_2$ 가 생성되도록 한 다음, 이 생성물을 1몰 당량의 리간드 L 과 반응시킴으로써 IrL_3 가 생성되도록 한다.



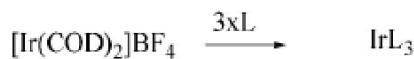
[0248]

- [0249] 또 다른 예에서, 치환가능한 리간드를 함유하는 Ir의 전구물질 착물(이 경우, 착물은 $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 이고, 리간드는 $-\text{Cl}$ 및 H_2O 임)을 2몰 당량의 리간드 L 과 반응시킴으로써 $[\text{Ir}(L)_2\text{Cl}]_2$ 가 생성되도록 한 다음, 이 생성물을 1몰 당량의 리간드 L' 와 반응시킴으로써 $\text{IrL}_2\text{L}'$ 가 생성되도록 한다.



[0250]

- [0251] 또 다른 예에서, 치환가능한 리간드를 함유하는 산화수(oxidation state) +1가의 Ir의 전구물질 착물(예컨대, ² 합토수(hapticity)의 알켄 리간드; 이 경우, 1,5-시클로옥타디엔)을 3몰 당량의 리간드 L 과 반응시킴으로써 직접 IrL_3 가 생성되도록 한다.



[0252]

- [0253] 화학 용어에 대한 정의

- [0254] "헤테로고리", "헤테로고리형" 또는 "헤테로고리기(heterocyclic group)"라는 용어는 화학분야에서는 잘 알려진 용어로, 1 내지 5개의 고리, 3 내지 50개(바람직하게는 5 내지 20개)의 고리 원자를 가지며 이 중 적어도 하나의 원자가 헤테로원자인 고리기를 의미한다. 특정 구현예에서, 헤테로고리기는 특히 5-원, 6-원 또는 7-원 헤테로고리기(단일-고리 헤테로고리기)이다. 그러나 이러한 기에 대한 임의선택적 치환기가 메인 헤테로고리에 융합되는 제 2 고리를 형성할 수 있다. 헤테로원자는 하나 이상의 O, N, S, Si 및 P로부터 선택될 수 있다. 헤테로

고리기의 하나의 서브클래스는 헤테로방향족(또는 헤테로아릴)기로서, 하나 이상의 O, N 및 S로부터 선택되는 헤테로원자를 하나 이상 가지는 방향족기를 의미한다. 이러한 헤테로방향족기도 또한 아릴기의 정의에 포함된다. 인광 물질 중 특정 모이어티를 구성할 수 있는 헤테로고리기의 특정 예는 앞서 약술하고 있다. "헤테로고리기", "헤테로방향족기" 또는 "헤테로아릴기"의 다른 예로는 이미다졸, 벤즈이미다졸, 피롤, 푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 옥사디아졸린, 인돌린, 카바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조퀴논, 피라졸린, 이미다졸리딘, 피페리딘 등이 있다.

[0255] "고리(cyclic)"라는 용어는 3 내지 50개의 고리 원자를 가진 고리기 및 링크된 또는 융합된 고리계를 지칭하는데에 광범위한 의미로 사용되며, 탄소고리(탄소고리 원자 만을 함유) 또는 헤테로고리(탄소 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 함유)이고 포화 또는 불포화인 것을 포함할 수 있다. 고리의 수는 1 내지 5인 것이 적합하며, 바람직하게는 1 또는 2이다. 5-, 6- 및 7-원 고리기의 경우, 이는 5, 6 또는 7개의 고리 원자를 가지는 단일 고리이다. 일부 구현예에서, 고리기는 탄소고리, 즉 고리 원자로서 탄소원자를 함유하는 고리이다. 고리 원자의 수가 확실하지 않은 다른 경우에서, 고리기는 적합한 수의 고리 원자를 가지는 단일 고리를 포함할 수도 있고, 각각 적합한 수의 고리 원자를 가지는 5개 이하의 링크된 또는 융합된 고리를 포함할 수도 있다.

[0256] "알킬"이라는 용어는 1 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 직선형 또는 가지형 알킬기 또는 고리형 알킬기를 의미한다. 이는 알칸으로부터 유도된다. 직선형 알킬기의 예로는 메틸, 프로필 또는 데실 등이 있으며, 가지형 알킬기의 예로는 이소-부틸, tert-부틸 또는 3-메틸-헥실 등이 있다. 고리형 알킬기의 예로는 시클로헥실 및 융합된 알킬 시클릭 고리계 등이 있다.

[0257] "아릴" 또는 "아릴기"라는 용어는 화학분야에서는 잘 알려진 용어로, 방향족 치환기를 의미하는 것으로 사용된다. 방향족 치환기는 하나의 방향족 고리, 4개 이하의 융합된 방향족 고리 및 5 내지 50개의 고리 원자를 가지는 것이 바람직하다. 방향족 기는 고리형 공액 분자 개체로서 $n = 0$ 또는 양의 정수일 때 $4n + 2$ 의 비편재화된 (delocalized) 파이 전자를 가진다(Hückel $4n + 2$ -법칙). 이 법칙에 적용되는 방향족 기는 아릴의 정의에 포함된다. 아릴기는 탄소고리(즉, 탄소와 수소만을 함유)일 수도 있고, 헤테로방향족(즉, 탄소, 수소 및 하나 이상의 헤테로원자를 함유)일 수도 있다. 아릴기는 폐닐과 같은 단일고리일 수도 있고, 나프탈 또는 안트릴과 같은 다중고리 아릴기일 수도 있다. 아릴기의 예로는 폐닐기, 비페닐기, 테르페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 피페닐기 등이 있다. "아릴"라는 용어는 또한 임의의 치환도(degree of substitution)를 가진 방향족 고리도 포함하는 의미로 사용된다.

[0258] "알킬-아릴"이라는 용어는 알킬기와 아릴기가 결합되어 있는 기를 의미한다.

[0259] "테더"라는 용어는 두 고리 A와 B와 같이, 두 기가 함께 연결되어 있는 사슬을 의미한다.

[0260] "할로겐" 또는 할로라는 용어는 불소, 염소, 브롬 및 요오드를 의미한다.

[0261] 아미드라는 용어는 $-C(O)NRR'$ (이 식에서, R 및 R'는 H, 앞서 정의한 바와 같은 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기로부터 선택됨)기를 포함하는 치환기를 의미한다. "이미드"라는 용어는 $-C(O)NRC(O)R'$ (이 식에서, R 및 R'는 H, 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기로부터 선택됨)기를 포함하는 치환기를 의미한다. "이민"이라는 용어는 $-C(=NR)R'$ (이 식에서, R 및 R'는 H, 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기로부터 선택됨)기를 포함하는 치환기를 의미한다. "아미딘"이라는 용어는 $-C(=NR)NR'R"$ (이 식에서, R, R' 및 R"는 H, 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기로부터 선택됨)기를 포함하는 치환기를 의미한다.

[0262] "아민"이라는 용어는 아미노기 $-NH_2$ 를 의미하며, 이에는 또한 2차 및 3차 알킬아미노, 아릴아미노 및 알킬아릴아미노기 등이 포함된다. "아릴아미노기"의 예를 들면, 디페닐아미노기, 디톨릴아미노기, 이소프로필디페닐아미노기, t-부틸디페닐아미노기, 디이소프로필디페닐아미노기, 디-t-부틸디페닐아미노기, 디나프틸아미노기, 나프틸페닐아미노기 등이 있다. "알킬아미노기"의 예를 들면 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디헥실아미노기 등이 있다.

[0263] "니트로"라는 용어는 $-NO_2$ 를 의미한다. "시아노"라는 용어는 $-C=N$ 을 의미한다. "하이드록시"라는 용어는 $-OH$ 를 의미한다. "에테르"라는 용어는 에테르기 $R-O-R'$ (여기서 R 및 R'는 H, 앞서 정의한 바와 같은 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴기로부터 선택됨)를 함유하는 기를 의미한다.

[0264] "카보닐"이라는 용어는 카보닐기 $-C=O$ 를 함유하는 치환기를 의미한다. 이러한 기에는 예를 들어 케톤 (-COR), 알데히드 (-CHO), 카복실산 ($-CO_2H$), 에논 ($-C=O-CR=CR'R''$), 에스테르 ($-CO_2R$), 아실 할라이드(-CO할로겐), 산무수화물($-C(=O)-O-C(=O)-R'$) 및 카보네이트 $R-O-C(=O)-O-R'$ (R, R' 및 R" 각각은 알킬 또는 아릴기임) 등이 있

다. "카복실"이라는 용어는 예를 들어 카복실레이트기 (RCO_2^-) (R 이 알킬 또는 아릴임)를 함유하는 치환기를 의미한다. "카바메이트"라는 용어는 카바메이트기 $-\text{O}-\text{C}(=\text{O})-\text{NRR}'$ (여기서, R 및 R' 는 전형적으로 알킬 또는 아릴이며, 함께 고리를 형성할 수 있음)를 함유하는 치환기를 의미한다.

[0265] "포스핀"이라는 용어는 $-\text{PR}_2$ (여기서 R 은 H, 알킬, 아릴 또는 알킬-아릴로부터 선택됨)를 의미한다. "포스페이트"라는 용어는 H, 아릴 및/또는 알킬과 같은 적합한 말단기를 가진, PO_4^- 기를 함유하는 치환기를 의미한다. 예로는 $-\text{OP}(=\text{O})-(\text{OR})_2$ (여기서 R 각각은 독립적으로 H, 알킬, 아릴 등임)를 포함한다. "포스포네이트"는 화학식 $\text{O}=\text{P}(\text{OR})_2\text{R}'$ 을 가지는 포스포네이트로부터 원자를 제거함으로써 유도되는 모이어티를 의미한다.

[0266] "설파이드"라는 용어는 예를 들어 $-\text{SR}$ (R 은 H, 알킬 또는 아릴임)를 의미한다. "설폰"이라는 용어는 예를 들어 $-\text{S}(=\text{O})_2-\text{R}$ (R 은 알킬 또는 아릴임)과 같은 $-\text{S}(=\text{O})_2-$ 단위를 가지는 기를 의미한다. "설폭사이드"라는 용어는 예를 들어 $-\text{S}(=\text{O})-\text{R}$ (R 은 알킬 또는 아릴임)과 같은 $-\text{S}(=\text{O})-$ 단위를 가지는 기를 의미한다.

[0267] "알케닐"이라는 용어는 하나 이상의 $-\text{C}=\text{C}-$ 기를 가지며 길이가 2 내지 20개의 탄소원자인 탄화수소 사슬을 의미한다. 그 예로는 비닐, 일릴(그 치환 변이체 포함) 및 프로페닐, 부테닐, 햄테닐, 헥세닐 등의 모든 이성질체가 있다. "알키닐"이라는 용어는 하나 이상의 $-\text{C}=\text{C}-$ 기를 가지며 길이가 2 내지 20개의 탄소원자인 탄화수소 사슬을 의미한다. 그 예로는 프로피닐, 부티닐, 햄티닐, 헥시닐 등이 있다.

[0268] "실릴"이라는 용어는 화학식 Si_2R_3 (여기서 R 은 H, 알킬, 아릴 등과 같은 치환기임), 및 실릴 에테르 $-\text{Si}_2\text{R}'_2\text{OR}$ (여기서 R' 및 R "는 알킬, 아릴, 알킬-아릴 등과 같은 적합한 치환기임)의 모이어티를 의미한다. 추가적인 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 메틸디페닐실릴기, 디메틸페닐실릴기, 트리페닐실릴기 등이 있다.

[0269] 일부 구현예에 따르면, 리간드는 중합될 수 있는 작용기 또는 고분자 사슬을 가지는 치환기를 함유할 수 있다. 작용기 또는 고분자 사슬은 적합한 2가 연결기(divalent linking group)에 의해 부착될 수 있으며, 이를 $-\text{R}_{\text{linker}}-$ 라고도 부른다. 2가 연결기의 예로는 $-\text{O}-$, $-\text{NH}-$, $-\text{Nalkyl}-$, $-\text{Naryl}-$, $-\text{alkyl}-$ 예컨대 $-(\text{CH}_2)_x-$, $-\text{CO}_2^-$, $-\text{CO}-$, $-\text{aryl}-$, $-\text{heteroaryl}-$ 및 그 조합체 등이 있다. 조합체의 예로는 $-\text{O}-\text{아릴}-$, $-\text{NH}-\text{아릴}-$, $-\text{N}-\text{알킬}-\text{아릴}-$, $-(\text{CH}_2)_x-\text{아릴}-$ 등이 있다.

[0270] 중합될 수 있는 작용기에는 $-\text{R}_{\text{linker}}-\text{CR}_1=\text{CHR}_2$ (여기서, R_{linker} 는 상술한 바와 같으며, R_1 는 수소, 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴이고 R_2 는 수소, 할로겐 원자, 니트로기, 아세틸기, 아크릴레이트기, 아미드기, 시아노기, 카복실레이트기, 설포네이트기, 아릴, 알킬 또는 헤테로고리기)이 포함된다. 이러한 각각의 치환기는 앞서 기재한 고리 A의 가능한 치환기 범위에서 선택되는 하나 이상의 추가적 치환기에 의해 더 치환될 수 있다. 모노머 세그먼트의 부착 지점은 'C 마킹된 탄소원자이다. 그 다음, 모노머를 중합시킴으로써 고분자 형태의 인광 물질을 생성시킨다. 중합할 수 있는 작용기의 또 다른 예로는 아미노산, 락탐, 하이드록시산, 락톤, 아릴 할라이드, 봉소산, 알킨, 에폭사이드 및 포스포디에스테르 등이 있다.

[0271] 한 쌍의 치환기가 함께 고리 또는 융합된 고리계를 형성하는 경우, 고리는 크기가 5 내지 20개의 원자인 단일 고리(이 때, 고리는 탄소고리 또는 헤테로고리(즉, 원자가 탄소 및 헤테로원자로부터 선택됨))일 수도 있고, 2 내지 4개의 고리를 가지며 크기가 5 내지 50개 원자인 융합된 고리계일 수도 있다. 또한 융합된 고리계는 중심화합물의 다른 고리(예컨대, 화학식 1의 리간드 L의 경우 고리 A 또는 B)와 융합될 수 있다. 적합한 고리 및 융합된 고리의 예는 앞서 기술한 고리에 관한 설명에서 언급한 것을 포함한다.

인광 물질의 특성

[0273] 고리 A 및 B의 고리 원자의 적절한 조합뿐만 아니라 이러한 고리 상의 치환기, 보조 리간드 L' 및 테더 Q의 길이 및 아이덴티티의 선택을 통해, 인광 물질로부터 인광성 발광의 색을 제어하는 것이 가능하다. 따라서 본 발명의 인광 물질은 400 ~ 800nm의 발광색을 생성하도록 할 수 있는 유기 전계발광 장치를 제조하는데 사용될 수 있다.

유기 전계발광 장치

본 발명은

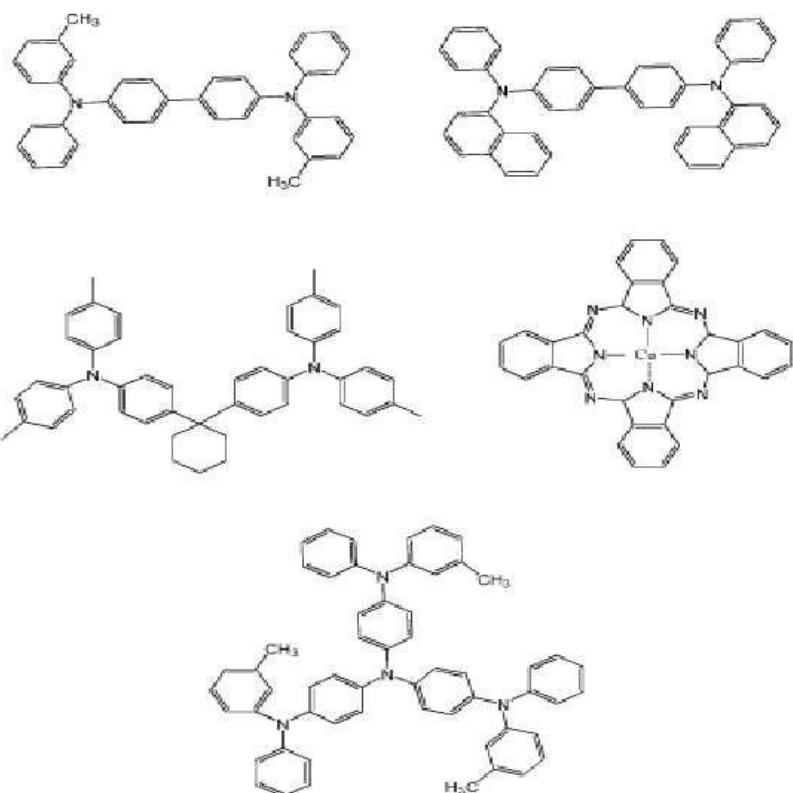
- 애노드 및 캐소드를 포함하는 한 쌍의 전극과,

- [0277] - 상기 한 쌍의 전극 사이에 배치되는 하나 이상의 유기 화합물층(상기 유기 화합물층 또는 하나 이상의 유기 화합물층은 앞서 기술한 바와 같은 인광 물질을 함유함)을 포함하는 유기 전계발광 장치를 제공한다.
- [0278] 본 발명에 따르는 유기 전계발광 장치는 애노드와 케소드 사이에 유기 화합물층을 배치함으로 형성된다.
- [0279] 유기층은
- [0280] - 본 발명의 인광 물질로 도핑된 단일층, 또는
- [0281] - 본 발명의 인광 물질로 도핑될 수 있는 층을 하나 이상 가지는 다층, 또는
- [0282] - 전적으로 본 발명의 인광 물질로만 구성될 수 있는 층을 하나 이상 가지는 다층으로 구성될 수 있다.
- [0283] 본 발명의 유기 전계발광 장치에 있어서, 앞서 언급한 본 발명의 인광 물질을 함유하는 유기 화합물층은 별도로 형성될 수도 있고, 한 쌍의 전극(케소드 및 애노드) 사이에서 다른 층(다른 층이 존재하는 경우)과 함께 형성될 수 있다. 적합한 형성 방법에는 진공 증착 또는 용액 공정 등이 있다.
- [0284] 유기 화합물층의 두께는 바람직하게는 최대 10 μm 미만, 더 바람직하게는 0.5 μm 미만, 훨씬 더 바람직하게는 0.001 ~ 0.5 μm 이다.
- [0285] 이제 본 발명의 장치에 대해 가능한 구성 범위를 설명해 주는 첨부 도면을 참조하여 본 발명의 특정 구현예를 보다 상세히 기술할 것이다. 이들 구현예는 단지 실례를 제공하는 것으로, 본 발명의 범위를 제한하기 위한 의도는 아니라는 점을 이해해야 할 것이다.
- [0286] 본 발명의 구현예의 유기 전계발광 장치는 도 1에 도시된 바와 같이 화학식 1에서 정의된 바와 같은 화합물만으로 구성되는 단일층 구조를 가질 수도 있고, 도 2, 3 및 4에 도시된 바와 같이 2개 이상의 층으로 된 다층 구조를 가질 수도 있다.
- [0287] 보다 상세히 설명하자면, 도 1은 본 발명의 유기 전계발광 장치의 제 1 구현예의 개략적인 단면도이다. 도 1에서, 유기 전계발광 장치는 기판(1), 애노드(2)(기판(1) 상에 증착), 발광층(애노드(2) 상에 증착) 및 케소드(발광층(3) 상에 증착)를 포함한다. 이 구현예에서, 발광층(3)은 유기 화합물 타입-단일층을 형성한다. 이 단일층은 그 고유 특성에 의거해서 또는 상기 물질의 특성과 호스트 또는 도편트의 조합을 통해서 정공 수송기능, 전자 수송기능 및 발광 기능(전자와 정공의 재조합과 관련됨)을 갖는 화합물로만 구성될 수도 있다. 일부 구현예에 따르면, 본 발명의 인광 물질은 도편트로서 역할을 할 수 있다. 또 다른 구현예에 따르면, 본 발명의 인광 물질은 정공 또는 전자 수송층으로서의 역할을 할 수 있다.
- [0288] 도 1에서, 발광층(3)은 바람직하게 5nm ~ 1 μm , 보다 바람직하게는 5 ~ 50nm의 두께를 가질 수 있다.
- [0289] 도 2는 정공 수송층(5) 및 전자 수송층(6)을 포함하는 다층-타입 장치 형태로서 본 발명의 유기 전계발광 장치의 또 다른 구현예를 보여준다.
- [0290] 도 2를 참조하면, 유기 전계발광 장치는 기판(1) 및 애노드(2)(기판(1) 상에 증착)을 포함한다. 정공 수송층(5)은 애노드(2) 상에 증착된다. 전자 수송층(6)은 정공 수송층(5) 상에 증착되고, 케소드(4)는 전자 수송층(6) 상에 증착된다. 이 구현예에서, 정공 수송층(5) 및 전자 수송층(6)은 발광층(3) 형성을 위한 도편트로서 본 발명의 인광 물질을 함유할 수 있다.
- [0291] 도 2의 구현예에서, 정공 수송층(5) 및 전자 수송층(6) 각각은 5nm ~ 1 μm , 보다 바람직하게는 5nm ~ 50nm의 두께를 가질 수 있다.
- [0292] 도 3은 정공 수송층(5), 발광층(3) 및 전자 수송층(6)을 포함하는 다층-타입 장치 형태로서 본 발명의 유기 전계발광 장치의 또 다른 구현예를 보여준다. 도 3에서, 유기 전계발광 장치는 기판(1), 애노드(2)(기판(1) 상에 증착), 정공 수송층(5)(애노드(2) 상에 증착), 발광층(3)(정공 수송층(5) 상에 증착), 전자 수송층(6)(발광층(3) 상에 증착) 및 케소드(4)(전자 수송층(6) 상에 증착)를 포함한다. 이 구현예에서, 각각의 정공 수송층(5), 발광층(3) 및 전자 수송층(6)은 정공 수송 화합물, 발광 화합물 및 전자 수송 화합물을 각각 또는 이러한 종류의 화합물의 혼합물로서 사용함으로써 형성될 수 있다. 본 발명의 인광 물질은 발광층(3)을 형성할 수도 있고, 정공 수송층(5)의 구성요소(예컨대, 도편트)일 수도 있고, 전자 수송층(6)의 구성요소(예컨대, 도편트)일 수도 있다.
- [0293] 도 4는 정공 주입층(7), 정공 수송층(5), 발광층(3) 및 전자 수송층(6)을 포함하는 다층 형태로서 본 발명의 유기 전계발광 장치의 또 다른 구현예를 보여준다. 도 4에서, 유기 전계발광 장치는 기판(1), 애노드(2)(기판(1)

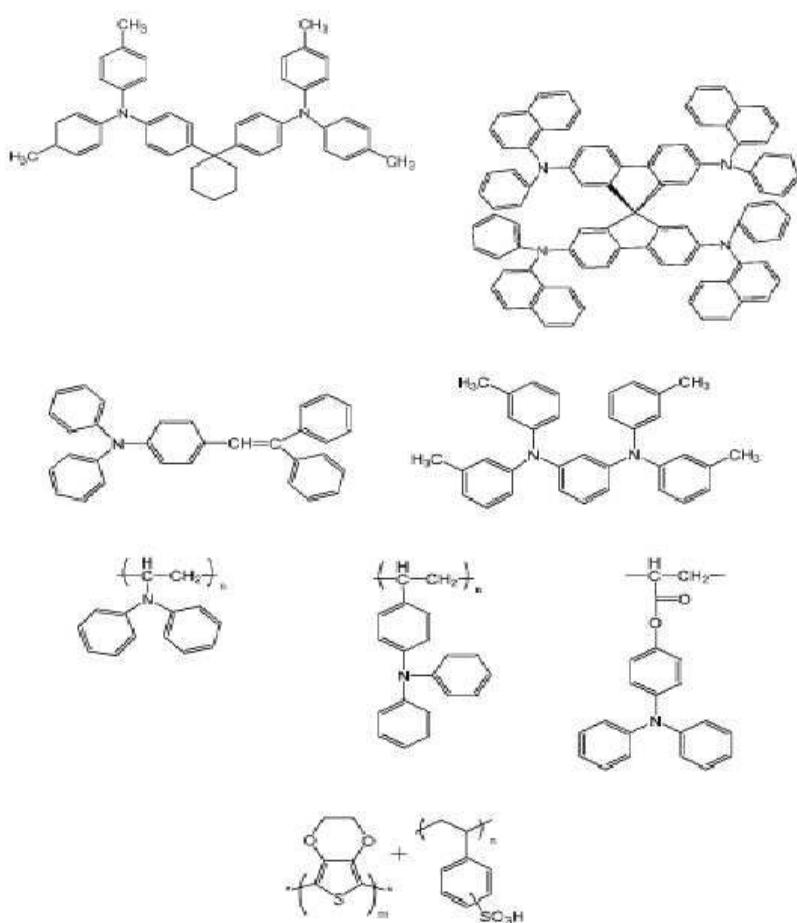
상에 증착), 정공 주입층(7)(애노드(2) 상에 증착), 정공 수송층(5)(정공 주입층(7) 상에 증착), 발광층(3)(정공 수송층(5) 상에 증착), 전자 수송층(6)(발광층(3) 상에 증착) 및 캐소드(4)(전자 수송층(6) 상에 증착)를 포함한다. 이 구현예에서, 각각의 정공 주입층(7), 정공 수송층(5), 발광층(3) 및 전자 수송층(6)은 정공 주입 화합물, 정공 수송 화합물, 발광 화합물 및 전자 수송 화합물을 각각 사용하거나 이러한 종류의 화합물의 혼합물로서 사용함으로써 형성될 수 있다. 본 발명의 인광 물질은 발광층을 형성할 수도 있고, 정공 수송층(5) 또는 전자 수송층(6)의 구성요소(예컨대, 도편트)일 수도 있다.

- [0294] 도 1, 2, 3 및 4에서, 각 층은 저분자량이나 고분자 화합물 또는 저분자량 화합물과 고분자 화합물의 혼합물을 사용한 진공 증착 또는 습식 공정(wet process)에 의해 형성될 수 있다. 층(3, 5 및 6)의 각각의 두께는 바람직하게 1nm ~ 1μm일 수 있다. 캐소드 및 애노드의 각각의 두께는 바람직하게 100 ~ 200nm일 수 있다.
- [0295] 도 1, 2, 3 및 4에 도시된 장치의 유기층 구조는 각각 기본 구조를 나타낸 것으로 이 구조는 요구되는 특성에 따라 적절하게 최적화될 수 있다. 적합한 변경의 예를 들면 하나 이상의 추가 층을 포함하는 것이다.
- [0296] 예를 들어, 정공 수송층은 정공 주입층(애노드 상에 증착)과 정공 수송층(정공 주입층 상에 증착)으로 구성되도록 변경될 수 있다.
- [0297] 도 1, 2, 3 및 4에 도시된 것과 다른 장치 구조에 관한 특정 구현예는 하기에 기재하고 있으나, 이들 장치 구조에 한정되는 것은 아니다.
- [0298] (1) 애노드/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/캐소드
- [0299] (2) 애노드/정공 주입층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/캐소드
- [0300] (3) 애노드/전하 차단층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/캐소드
- [0301] (4) 애노드/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전하 차단층/캐소드
- [0302] (5) 애노드/무기 반도체/전하 차단층/정공 수송층/발광층/전하 차단층/ 캐소드
- [0303] (6) 애노드/전하 차단층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전하 차단층/ 캐소드
- [0304] (7) 애노드/전하 차단층/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/ 전자 주입층/캐소드
- [0305] (8) 애노드/전하 차단층/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/ 전자 주입층/전하 차단층/캐소드
- [0306] 상기 구현예들 중 보다 바람직한 장치 구조는 (1), (2), (3), (7) 및 (8)이나, 이에 한정되는 것은 아니다. 일부 구현예에 따르면, 본 발명의 인광 물질은 발광층으로서, 혹은 정공 수송층이나 전자 수송층의 도편트로서 형성될 수 있다. 일부 구현예에 따르면, 본 발명의 인광 물질은 유기 전계발광 장치의 발광 물질로서, 혹은 정공 수송층의 도편트로서, 혹은 전자 수송층의 도편트로서 사용된다.
- [0307] 일부 구현예에서, 본 발명의 인광 물질은 정공 주입물질, 정공 수송화합물(또는 물질), 전자 수송화합물 및/또는 추가적 발광 화합물 중 하나 이상과 함께 사용될 수 있으며, 그러한 화합물의 예는 다음과 같다.

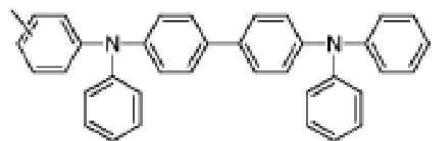
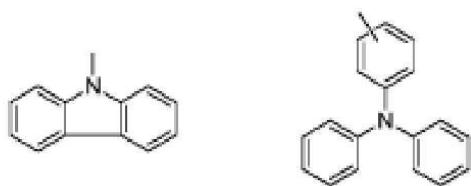
[0308] 예시적인 정공 수송 물질/화합물은 다음과 같다.



[0309]

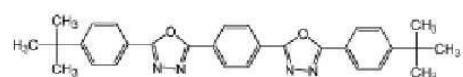
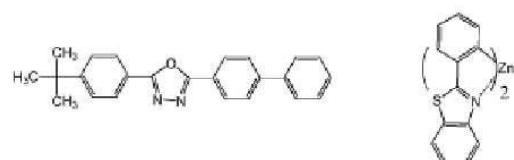
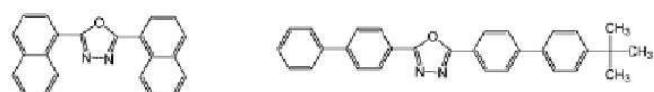


[0310]

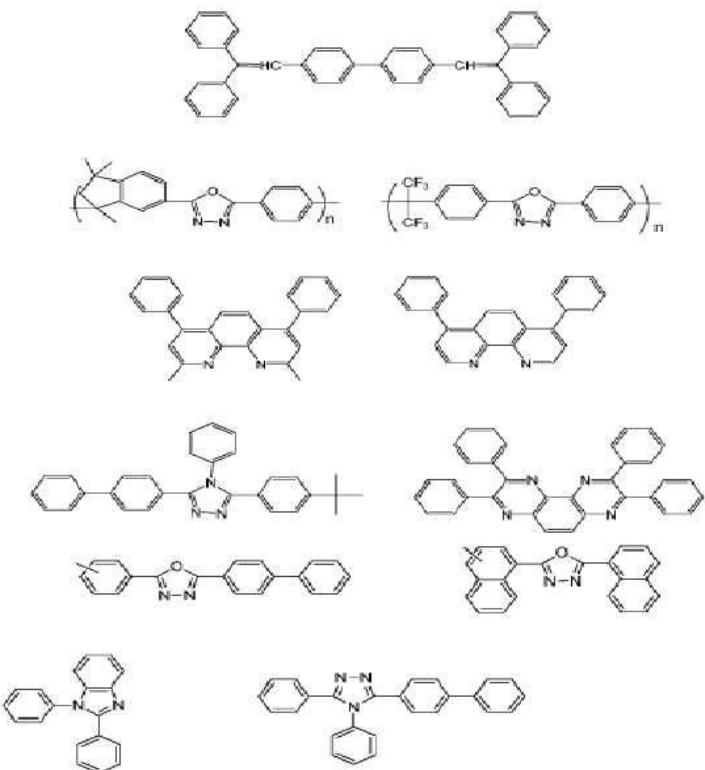


[0311]

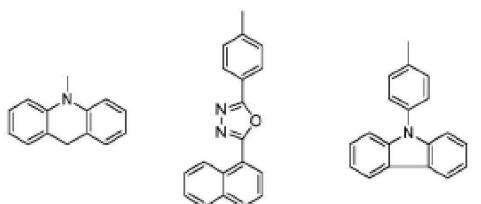
[0312] 예시적인 전자 수송 물질/화합물은 다음과 같다.



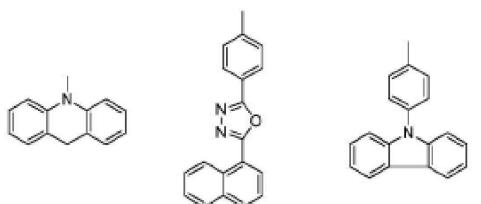
[0313]



[0314]



[0315]



[0316] 애노드(예컨대, 도면에서 "2")에 사용되는 물질로는 높은 일함수(large work function)를 갖는 물질을 사용하는 것이 바람직하며, 이러한 물질의 예로는 금, 백금, 니켈, 팔라듐, 코발트, 셀레늄, 바나듐 및 이들의 합금과 같은 금속; 주석 산화물, 아연 산화물, 인듐 아연 산화물(IZO) 및 인듐 주석 산화물(ITO)과 같은 금속 산화물; 및 PEDOT:PSS, 폴리아닐린, 폴리피롤 및 폴리티오펜 및 그 유도체와 같은 전도성(electroconductive) 고분자 등이 있다. 이러한 화합물은 단독으로 또는 2종 이상의 배합 형태로 사용될 수 있다.

[0317] 캐소드(예컨대, 도면에서 "4")에 사용되는 물질로는 통상적으로 4.0eV 이하의 낮은 일함수를 갖는 물질을 사용하는 것이 바람직하며, 이러한 물질의 예로는 나트륨, 마그네슘, 칼슘, 리튬, 칼륨, 알루미늄, 인듐, 은, 납, 크롬 및 이들의 합금과 같은 금속, 또는 그 산화물 등이 있다.

[0318] 전하 차단층은 상기 구현예 (3) 내지 (8)에 기재된 바와 같이 전류 누설을 방지하기 위해서 전극에 인접해서 증착될 수 있다. 전하 차단물질로는 무기 화합물을 사용하는 것이 바람직하며, 이러한 물질의 예로는 알루미늄 산화물, 리튬 불화물, 리튬 산화물, 세슘 산화물, 마그네슘 산화물, 마그네슘 불화물, 칼슘 산화물, 칼슘 불화물, 알루미늄 질화물, 티타늄 산화물, 규소 산화물, 규소 질화물, 봉소 질화물, 바나듐 산화물 등이 있다.

[0319] 본 발명의 유기 전계발광 장치에 사용되는 기판(예컨대, 도면에서 "1")은 금속이나 세라믹과 같은 적합한 재료로 제조된 불투명 기판, 혹은 유리, 석영, 플라스틱 등과 같은 적합한 투명 재료로 제조된 투명 기판을 포함한다.

[0320] 본 발명의 장치는 적층형 유기 전계발광(EL) 장치의 형태로 제공될 수 있다. 또한 본 발명의 적용영역은 본 발명의 유기 전계발광 장치를 구비하는 전자 장치(디스플레이 및 광원 포함)로 확장될 수 있다.

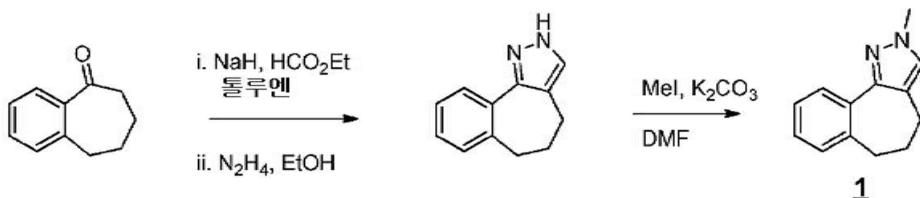
[0321] 실시예

[0322] 본 발명은 제조 방법 실시예 및 장치 실시예를 통해 하기에 상세히 설명될 것이다. 그러나 본 발명은 이러한 실

시례에 한정되는 것은 아니다.

[0323]

실시예 1



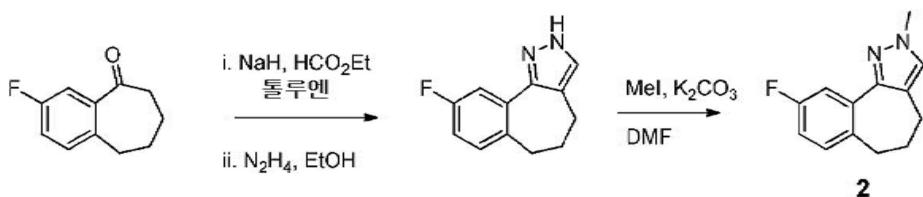
[0324]

[0325]

톨루엔(100mL) 중의 NaH(80%, 1.9g, 62.8mmol)의 혼탁액에 톨루엔(50mL) 중의 6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7]안눌렌-5-온(5g, 31.2mmol)과 에틸 포르메이트(5mL, 61.4mmol)의 용액을 0°C에서 적가하였다. 그 다음, 메탄올(0.01mL)을 가하고, 이 반응 온도를 실온으로 높였다. 2시간 후에, 수성 NH₄Cl(20mL)를 가함으로써 반응을 정지시키고, EtOAc(100mL) 속에 추출한 후에 MgSO₄에 건조시키고 용매를 증발시켰다. 이 조생성물(crude product)을 EtOH(50mL) 속에 용해시킨 후에 하이드라진 하이드레이트(2.3mL, 36.8mmol)을 가하였다. 이 반응 혼합물을 95°C의 오일 배쓰(oil bath) 온도에서 가열하였다. 1.5시간 후에 반응이 완료되었다. 이 용액을 실온으로 냉각시키고 깁압 하에 용매를 증발시켰다. 햅탄으로부터 침전시킴으로써 조생성물 N-H 피라졸을 수득하였으며, 이는 추가적인 정제과정 없이 사용되었다. ¹H NMR (200MHz, CDCl₃) 7.78 – 7.74 (1H, m, ArH), 7.47 (1H, s, pzH), 7.26 – 7.20 (3H, m, ArH), 2.86 – 2.80 (4H, m, CH₂CH₂), 2.12 – 2.00 (2H, m, CH₂). 이 조생성물 피라졸(4g, 21.7mmol) 및 K₂CO₃(3g, 21.7mmol)를 DMF(10mL) 속에 넣었다. 그 다음, 요오드화메탄(1.4mL, 21.7mmol)을 가하고, 이 반응 혼합물을 80°C의 오일 배쓰 온도에서 1시간 교반하였다. 그 다음, 이 반응을 실온으로 냉각시키고 물(100mL)로 희석한 후에 EtOAc(50mL)로 추출하였다. 유기상을 물(2 x 100mL)로 2회 더 세척하였다. 혼합된 유기층을 MgSO₄에 건조시킨 후에 용매를 증발시킴으로써 ¹H NMR에 의해 6:1 비의 N-메틸화 피라졸 혼합물을 수득하였다. 실리카 크로마토그래피 (용리제로서 CH₂Cl₂)에 의한 정제를 행함으로써 2.8g(수율 65%)의 원하는 N-메틸 피라졸 1(제 1 용출 이성질체, NOESY에 의해 확인)을 수득하였다. ¹H NMR (400MHz, CDCl₃) 7.97 – 7.93 (1H, m, ArH), 7.27 – 7.16 (4H, m, 3xArH 및 pzH), 3.92 (3H, s, NCH₃), 2.83 – 2.70 (4H, m, CH₂CH₂), 2.13 – 2.00 (2H, m, CH₂). 생성물은 GC-MS (m/z = 198)에 의해 확인되었다.

[0326]

실시예 2



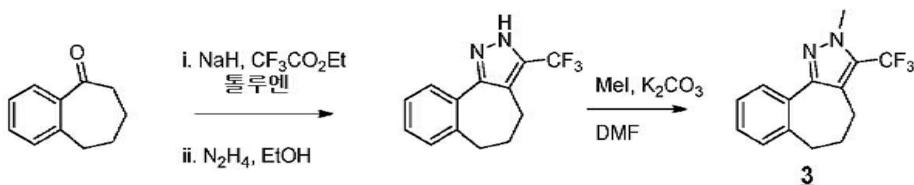
[0327]

[0328]

0°C에서 톨루엔(100mL) 중의 NaH(0.58g, 19.5mmol)의 혼탁액에 톨루엔(50mL) 중의 2-플루오로-6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7]안눌렌-5-온(2mL, 13mmol)과 에틸 포르메이트(1.6mL, 19.5mmol)의 용액을 적가하였다. 그 다음, 메탄올(0.05mL, 1.302mmol)을 가하고, 이 반응을 실온에서 교반하여 이루어지게 하였다. 기체 발생을 관찰하였다. 1.5시간 후에 ¹H NMR에 의해 반응을 모니터링하였으며, 그 결과 약 50% 전환을 보여주었다. 그 다음, 1 당량의 NaH(0.58g) 및 1.5 당량의 EtOCHO(1.5mL)를 더 가하고, 이 반응을 실온에서 밤새 교반하여 이루어지게 하였다. ¹H NMR 분석에 의해 반응이 완료된 것으로 간주되었다. 수성 NH₄Cl(50mL)를 가함으로써 반응을 정지시키고, EtOAc (100mL)로 추출하였다. 유기상을 물(100mL) 및 염수(100mL)로 세척한 후에 MgSO₄에 건조시키고 용매를 증발시켰다. 이 조 반응 생성물을 EtOH(50mL) 속에 용해시킨 후에 하이드라진 하이드레이트(0.98mL, 19.5mmol)를 가하였다. 이 반응을 90°C의 오일 배쓰 온도에서 1시간 동안 가열한 후에, 실온으로 냉각시키고 용매를 농축시켰다. 조생성물을 침전시킨 후에 햅탄으로 세척하고 분리시킴으로써 황색 고체(2.2g, 수율 84%)를

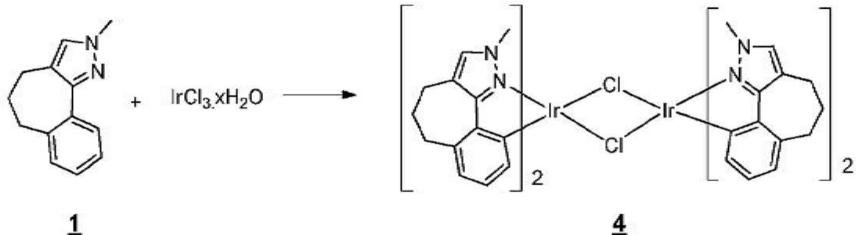
수득하였다. ^1H NMR (200MHz, CDCl_3) 7.50 – 7.44 (2H, m, ArH and pzH), 7.18 – 7.10 (1H, m, ArH), 6.94 – 6.85 (1H, m, ArH), 2.86 – 2.77 (4H, m, CH_2CH_2), 2.10 – 2.97 (2H, m, CH_2). 이 조생성물 피라졸(5g, 24.7mmol)을 DMF(25mL) 속에 넣은 다음, 요오드화메탄(2.3mL, 37.1mmol) 및 K_2CO_3 (5.1g, 37.1mmol)을 가하였다. 이 반응 혼합물을 100°C의 오일 배쓰 온도에서 1시간 가열하였다. 그 다음, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고 물(100mL)로 희석한 후에 EtOAc(50mL)로 추출하였다. 그 다음 유기상을 물로 2회 세척하고(2 x 100mL), MgSO_4 에 건조시킨 후에 용매를 증발시켰다. 조생성물은 6:1의 레지오이성질체(regioisomer) 혼합물로서 수득되었다(^1H NMR에 의해). 실리카 크로마토그래피(용리제로서 CH_2Cl_2 중의 2% MeOH에 대해 CH_2Cl_2)에 의해 정제를 행하였다. 제 1 용출 이성질체로서 원하는 N-메틸 피라졸 **2**(3.2g, 수율 60%)가 분리되었으며 이는 NOESY에 의해 확인되었다. ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) 7.70 – 7.67 (1H, m, ArH), 7.20 (1H, s, pzH), 7.11 – 7.07 (1H, m, ArH), 6.88 – 6.83 (1H, m, ArH), 3.91 (3H, s, NCH_3), 2.79 – 2.73 (4H, m, CH_2CH_2), 2.02 – 1.99 (2H, m, CH_2).

[0329]

실시예 3

[0330]

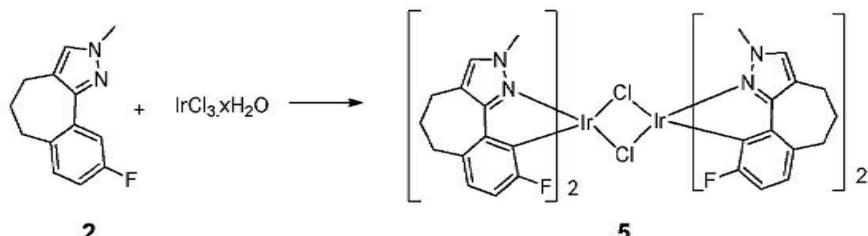
[0331] THF(100mL) 속에 수소화 나트륨(2.00g, 66.8mmol)을 혼탁시키고, 6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7]안눌렌-5-온(5mL, 33.4mmol)을 적가하였다. 반응을 환류하에 2시간 동안 가열하였다. 그 다음, 이 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고 주사기를 통해 에틸 트리플루오로아세테이트(5.9mL, 50mmol)를 가하였다. 실온에서 2시간 동안 교반을 지속하였다. 0.5M KHSO_4 (100mL)로 반응을 정지하여 종료시키고, EtOAc(100mL)로 추출하였다. 유기상을 물(100mL)로 세척한 후에 MgSO_4 에 건조시켰다. 그 다음, 용매를 증발시킴으로써 조생성물 N-H 피라졸을 수득하였으며 이는 추가적인 정제과정없이 사용되었다. N-H-피라졸을 EtOH 속에 넣은 후에 하이드라진 하이드레이트(2.5mL, 50.1mmol)를 가하였다. 이 반응을 80°C의 오일 배쓰 온도에서 1시간 동안 교반한 후에, 실온으로 냉각시키고 용매를 증발시켰다. 조생성물 피라졸이 분리되었으며 이는 추가적인 정제과정없이 사용되었다. ^1H NMR (400MHz, CDCl_3), 7.53 – 7.51 (1H, m, ArH), 7.33 – 7.21 (3H, m, ArH), 2.93 (2H, m, CH_2), 2.82 (2H, m, CH_2), 2.07 – 2.10 (2H, m, H₂). 이 조생성물 피라졸(3.9g, 15.4mmol), K_2CO_3 (4.3g, 30.9mmol) 및 요오드화메탄(1.1mL, 17mmol)을 실온에서 DMF(30mL) 속에 혼합한 다음, 1시간 동안 교반하였다. 그 다음, 이 반응을 물(100mL)로 희석한 후에 EtOAc로 추출함으로써 종료시켰다. 유기상을 물(100mL)로 2회 더 세척하고 MgSO_4 에 건조시킨 후에 감압하에 용매를 증발시켰다. 조생성물은 1:1의 레지오이성질체 혼합물로서 분리되었으며(^1H NMR에 의해), 실리카 크로마토그래피(용리제로서 헥산 중의 10% EtOAc)에 의해 정제되었다. 1.8g(수율 46%)의 원하는 N-메틸 피라졸 **3**(제 1 용출 이성질체, NOESY에 의해 확인)이 분리되었다. ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) 7.90 – 7.92 (1H, m, ArH), 7.30 – 7.17 (3H, m, ArH), 4.03 (3H, br s, NCH_3), 2.84 – 2.76 (4H, m, CH_2CH_2), 2.12 – 2.06 (2H, m, CH_2). ^{19}F (CDCl_3 , 188 MHz) -58.4ppm.

[0332] 실시예 4

[0333]

[0334] 250m1의 1-목 플라스크 속에 1.8g(9.1mmol)의 피라졸 리간드 **1**, 1.3g(3.6 mmol)의 IrCl_3 및 48m1의 2-에톡시에탄올과 물의 3:1 혼합물을 넣었다. 이 혼합물을 20분 동안 N_2 로 탈가스처리 한 후에, 125°C의 오일 배쓰 온도에서 2.5 시간 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 그 다음, NMR 분석에 의해 반응을 완료하였다. 진공하에 용매를 제거하고, 잔류물을 22m1의 아세톤 속에서 환류시킴으로써 부산물을 제거하였다. 여과에 의해 생성물을 수집하고 이를 진공 하에 건조시킴으로써 1.95g(69%)의 원하는 다이머 **4**를 수득하였다. ^1H NMR (200 MHz, CD_2Cl_2), 7.35 (4H, s, pzH), 6.59 – 6.37 (8H, m, ArH), 5.70 – 5.59 (4H, m, ArH), 3.80 (12H, s, NCH_3), 3.10 – 2.86 (16H, m, CH_2), 2.27 – 1.75 (8H, m, CH_2) ppm. ESI-MS: m/z calc. $[\text{C}_{26}\text{H}_{26}\text{N}_4^{191}\text{Ir}^{35}\text{Cl}_2]^-$ 655.1, found 655.2; m/z calc. $[\text{C}_{26}\text{H}_{26}\text{N}_4^{191}\text{Ir}]^+$ 585.2, found 585.2.

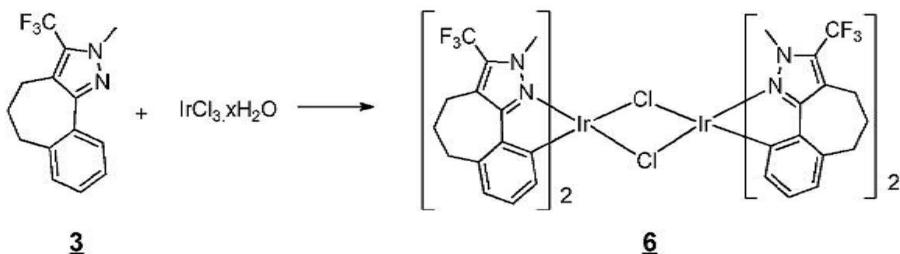
[0335] 리간드 **1**은 대안적으로, Pt, Rh, Pd, Ru 또는 Os로부터 유도되는 다른 금속 작용제와 반응할 수 있다.

[0336] 실시예 5

[0337]

[0338] 50m1의 1-목 플라스크 속에 1.2g(5.55mmol)의 플루오로-피라졸 리간드 **2**, 783mg(2.22 mmol)의 IrCl_3 및 30m1의 2-에톡시에탄올과 물의 3:1 혼합물을 넣었다. 이 혼합물을 20분 동안 N_2 로 탈가스처리 한 후에, 125°C의 오일 배쓰 온도에서 1시간 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 그 다음, NMR 분석에 의해 반응을 완료하였다. 진공하에 용매를 제거하고, 잔류물을 20m1의 아세톤 속에서 환류시킴으로써 부산물을 제거하였다. 여과에 의해 생성물을 수집하고 이를 진공 하에 건조시킴으로써 1.3g(72%)의 원하는 다이머 **5**를 수득하였다. ^1H NMR (200 MHz, CDCl_3), 7.20 (4H, s, pzH), 6.50 – 6.39 (4H, m, ArH), 6.11 – 5.98 (4H, m, ArH), 3.57 (12H, s, NCH_3), 3.05 – 2.82 (16H, m, CH_2), 2.15 – 2.01 (4H, m, CH_2), 1.95 – 1.72 (4H, m, CH_2) ppm. ^{19}F NMR(188 MHz, CDCl_3) -116.10 ppm. ESI-MS: m/z calc. $[\text{C}_{26}\text{H}_{24}\text{N}_4\text{F}_2^{191}\text{Ir}^{35}\text{Cl}_2]^-$ 691.1, found 691.0; m/z calc. $[\text{C}_{26}\text{H}_{24}\text{N}_4\text{F}_2^{191}\text{Ir}]^+$ 621.2, found 621.2.

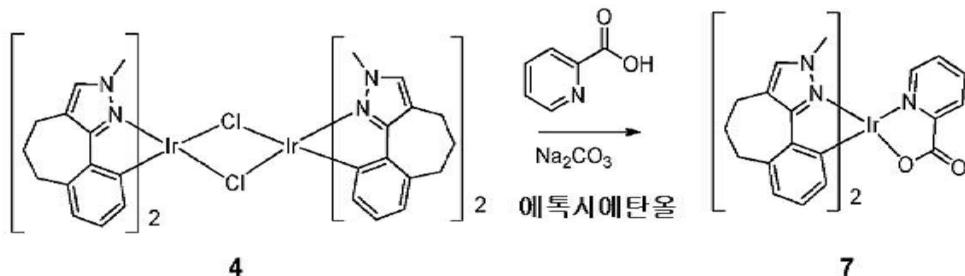
[0339] 리간드 **2**는 대안적으로, Pt, Rh, Pd, Ru 또는 Os로부터 유도되는 다른 금속 작용제와 반응할 수 있다.

[0340] 실시예 6

[0341]

[0342] 피라졸 **3**(1g, 3.76mmol) 및 이리듐(III) 클로라이드(0.571g, 1.71 mmol)를 에톡시에탄올(10 ml)/물(3 ml) 속에서 합하고 탈가스처리하였다. 이 반응 혼합물을 130°C의 오일 배쓰 온도에서 4시간 동안 N₂ 분위기 하에 가열하였다. 그 다음, 반응을 실온으로 냉각시키고 농축하였다. 이 조 반응 잔류물을 CH₂Cl₂ 속에 넣고, 물, 포화 수성 NaHCO₃ 및 염수로 세척하고 MgSO₄에 건조시킨 다음, 용매를 증발시켰다. 이 조생성물을 Et₂O로 처리한 후에 황색 침전물을 여과하였다. 다이머 **6**(1g, 수율 77%)은 추가적인 정제과정없이 사용되었다. ¹H NMR (200 MHz, CDCl₃), 6.53 – 6.43 (8H, m, ArH), 5.55 – 5.50 (4H, m, ArH), 4.06 (12H, br s, NCH₃), 3.17 – 2.94 (16H, m, CH₂CH₂), 2.26 – 2.13 (4H, m, CHH), 1.91 – 1.79 (4H, m, CHH). ¹⁹F (CDCl₃, 188MHz) – 57.5 ppm. ESI-MS: m/z calc. [C₂₈H₂₄N₄F₆¹⁹¹Ir³⁵Cl₂]⁻ 791.1, found 791.1; m/z calc. [C₂₈H₂₄N₄F₆¹⁹¹Ir]⁺ 723.2, found 723.2.

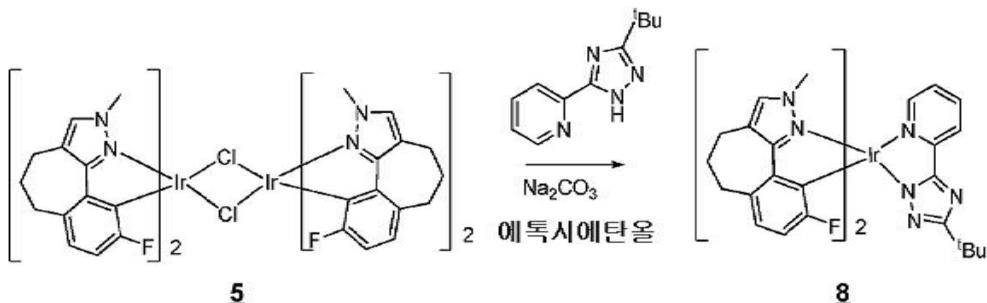
[0343] 리간드 **3**은 대안적으로, Pt, Rh, Pd, Ru 또는 Os로부터 유도되는 다른 금속 작용제와 반응할 수 있다.

[0344] 실시예 7

[0345]

[0346] 다이머 **4**(100mg, 0.08mmol), 피콜린산(25mg, 0.20mmol) 및 탄산 나트륨 (90mg, 0.85mmol)를 4ml의 2-에톡시에탄올 속에 넣었다. 이 혼합물을 N₂로 탈가스처리 한 후에, 60°C의 오일 배쓰 온도에서 1시간 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 그 다음, NMR 분석에 의해 나타나는 바와 같이 반응을 완료하였다. 용매를 감압하에 제거하고, CH₂Cl₂를 가한 다음, 과량의 Na₂CO₃를 여과시켰다. 잔류 용액의 용량을 반으로 감소시키고, 그 생성물을 n-헥산 속에서 침전시킨 후에 여과에 의해 수집함으로써 76mg(67%)의 원하는 헤테로렙틱(heteroleptic) 촉매 **7**을 수득하였다. ¹H NMR (200 MHz, CDCl₃), 8.35 – 8.25 (1H, m, pyH), 7.89 – 7.79 (2H, m, pyH), 7.38 – 7.28 (1H, m, pyH), 7.13 (1H, s, pzH), 7.06 (1H, s, pzH) 6.67 – 6.48 (4H, m, ArH), 6.17 – 6.09 (1H, m, ArH), 5.86 – 5.75 (1H, m, ArH), 3.84 (3H, s, NCH₃), 3.02 (3H, s, NCH₃) 3.12 – 2.73 (8H, m, CH₂), 2.23 – 1.84 (4H, m, CH₂) ppm. EI-MS: m/z calc. C₃₂H₃₀¹⁹¹IrN₅O₂ 707.2, found 707.2.

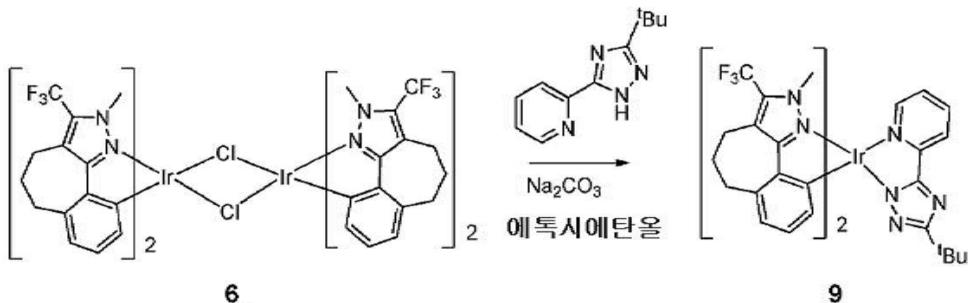
[0347] 실시예 8



[0348]

[0349] 다이머 5(1.19g, 0.9mmol), 2-(3-tert-부틸-1H-1,2,4-트리아졸-5-일) 피리딘(457 mg, 2.26 mmol) 및 탄산 나트륨(958 mg, 9 mmol)을 159m1의 2-에톡시에탄올 속에 용해시켰다. 이 혼합물을 N₂로 틸가스처리 한 후에, 90°C의 오일 배쓰 온도에서 90분 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 그 다음, NMR 분석에 의해 나타나는 바와 같이 반응을 완료시켰다. 용매를 감압하에 제거하고, CH₂Cl₂를 가한 다음, 과량의 Na₂CO₃를 여과시켰다. 용매를 제거하고 잔류물을 실리카 크로마토그래피(용리제로서 EtOAc/헥산 혼합물)에 의해 정제함으로써 1.29g(수율 86%)의 원하는 생성물 8을 수득하였다. ¹H NMR (200 MHz, CDCl₃) 8.21 - 8.10 (1H, m, ArH), 7.84 - 7.66 (2H, m, ArH), 7.06 - 6.96 (1H, m, ArH), 6.93 - 6.87 (2H, m, ArH), 6.75 - 6.58 (2H, m, ArH), 6.40 - 6.22 (2H, m, ArH), 3.12 - 2.99 (4H, m, CH₂), 2.96 (3H, s, NCH₃), 2.94 (3H, s, NCH₃), 2.88-2.62 (4H, m, CH₂), 2.17 - 1.96 (4H, m, CH₂), 1.32 (9H, s, C(CH₃)₃ ppm. ¹⁹F NMR (CDCl₃, 188MHz) - 112.6, - 114.9 ppm EI-MS: m/z calc. C₃₇H₃₇F₂¹⁹¹IrN₈ 822.3, found 822.4.

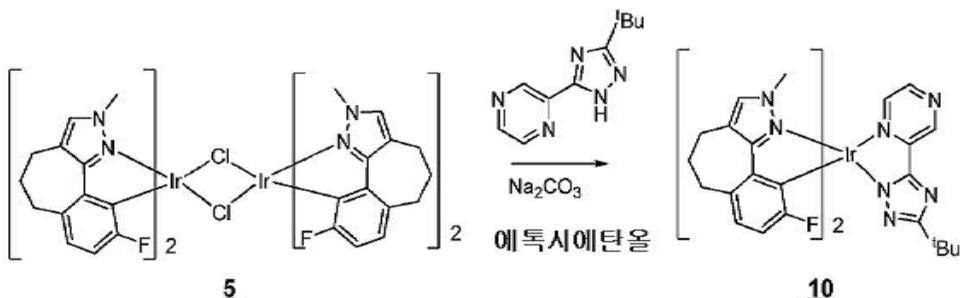
[0350] 실시예 9



[0351]

[0352] 다이머 **6**(50mg, 0.033mmol), 2-(3-tert-부틸-1H-1,2,4-트리아졸-5-일)페리딘(17mg, 0.082mmol) 및 탄산 나트륨(8.74mg, 0.082mmol)을 2-에톡시에탄올(10 mL) 속에 넣고, 80°C의 오일 배쓰 온도에서 90분 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 이 반응 혼합물을 실온으로 냉각시킨 후에, 용매를 증발시켰다. 잔류물을 CH_2Cl_2 로 희석시키고 셀라이트 패드를 통해 여과하였다. 실리카 크로마토그래피(용리제로서 4:1 EtOAc/헥산)에 의해 조생성물을 정제 함으로써 50mg(수율 82%)의 원하는 생성물 **9**를 수득하였다. ^1H NMR (200 MHz, CDCl_3) 8.21 - 8.16 (1H, m, ArH), 7.74 - 7.73 (1H, m, ArH), 7.63 - 7.61 (1H, m, ArH), 7.06 - 6.99 (1H, m, ArH), 6.73 - 6.67 (4H, m, ArH), 6.13 - 6.09 (1H, m, ArH), 5.97 - 5.89 (1H, m, ArH), 3.24 (3H, s, NCH_3), 3.15 (3H, s, NCH_3), 3.08 - 2.98 (8H, m, CH_2), 2.21 - 1.99 (4H, m, CH_2) 1.32 (9H, s, $\text{C}(\text{CH}_3)_3$). EI-MS: m/z calc. $\text{C}_{39}\text{H}_{37}\text{F}_6^{191}\text{IrN}_8$ 922.3, found 922.3. 구조는 X-선 결정화법(crystallography)에 의해 확인되었다.

[0353] 실시예 10

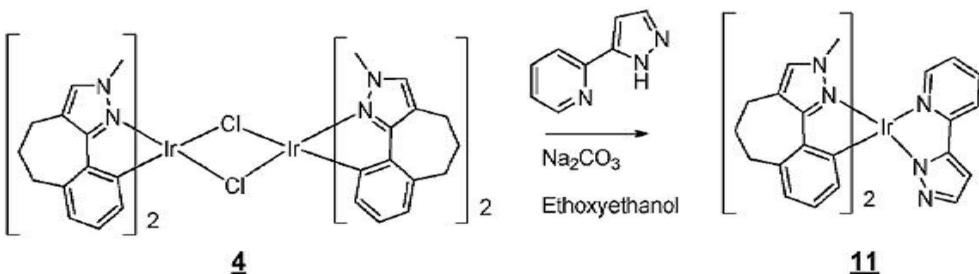


[0354]

[0355] 다이머 5(150mg, 0.11mmol), 2-(3-tert-부틸-1H-1,2,4-트리아졸-5-일)페라진(69mg, 0.34mmol) 및 탄산 나트륨(121mg, 1.14mmol)을 20mL의 2-에톡시에탄올 속에 용해시켰다. 이 혼합물을 N₂로 탈가스처리 한 후에, 80°C의 오일 배쓰 온도에서 90분 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 그 다음, NMR 분석에 의해 나타나는 바와 같이 반응을 완료시켰다. 용매를 감압하에 제거하고, CH₂Cl₂를 가한 다음, 과량의 Na₂CO₃를 여과시켰다. 용매를 제거하고 잔류물을 실리카 크로마토그래피(용리제로서 EtOAc)에 의해 정제함으로써 144mg(수율 77%)의 원하는 생성물 10을 수득하였다. ¹H NMR (200 MHz, CDCl₃) 9.38 (1H, d, J = 1.4 Hz, p_{yz}H), 8.25 (1H, d, J = 3.1 Hz, p_{yz}H), 7.74 (1H, dd, J = 3.1, 1.4 Hz, p_{yz}H), 6.93 (1H, s, p_zH), 6.91 (1H, s, p_zH), 6.77 – 6.57 (2H, m, ArH), 6.45 – 6.21 (2H, m, ArH), 3.11 – 2.98 (4H, m, CH₂) 2.96 (3H, s, NCH₃), 2.92 (3H, s, NCH₃), 2.89 – 2.59 (4H, m, CH₂), 2.18 – 1.91 (4H, m, CH₂), 1.33 (9H, s, C(CH₃)₃ ppm). ¹⁹F NMR (CDCl₃, 188MHz) – 112.4, – 115.3 ppm ESI-MS: m/z calc. [C₃₆H₃₆F₂¹⁹¹IrN₉ + 1]⁺ 824.2, found 824.2. 295.15K에서 빨광 1 (340nm에서의 여기 1, THF) 572 nm, Q.Y. 0.10 (순수, THF).

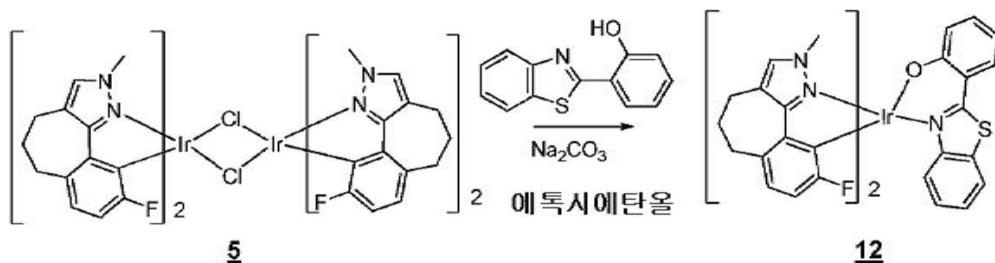
[0356] 이 화합물의 발광 스펙트럼(emission spectrum)은 도 5에서 보여준다.

[0357] 실시예 11



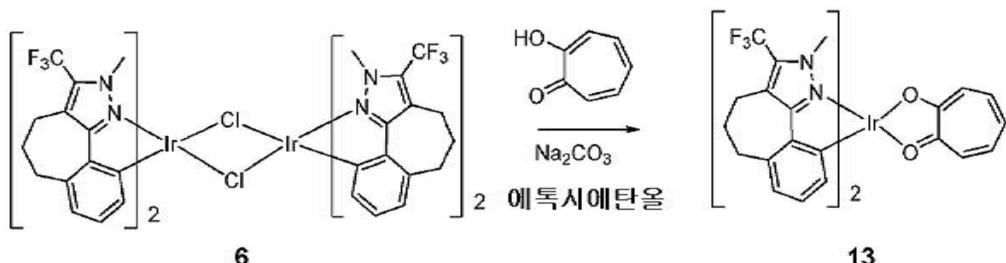
[0358]

[0359] 다이머 4(150mg, 0.12mmol), 2-(1H-파라졸-5-일)페리딘(43mg, 0.3mmol) 및 탄산 나트륨(128mg, 1.2mmol)을 21ml의 2-에톡시에탄올 속에 용해시켰다. 이 혼합물을 N₂로 탈가스처리 한 후에, 80°C의 오일 배쓰 온도에서 90분 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 그 다음, NMR 분석에 의해 나타나는 바와 같이 반응을 완료시켰다. 용매를 감압하에 제거하고, CH₂Cl₂를 가한 다음, 과량의 Na₂CO₃를 여과시켰다. 용매를 제거하고 잔류물을 실리카 크로마토그래피 (용리제로서 99:1 EtOAc:N_{Et}₃)에 의해 정제함으로써 130mg(수율 74%)의 원하는 생성물 **11**을 수득하였다. ¹H NMR (200 MHz, CDCl₃) 7.76 – 7.52 (4H, m, ArH), 7.03 – 6.94 (2H, m, ArH), 6.90 – 6.81 (1H, m, ArH), 6.76 – 6.67 (1H, m, ArH), 6.66 – 6.54 (4H, m, ArH), 6.14 – 6.03 (1H, m, ArH), 6.03 – 5.91 (1H, m, ArH), 3.12 – 2.96 (4H, m, CH₂) 3.03 (6H, s, NCH₃), 2.95 – 2.64 (4H, m, CH₂), 2.26 – 1.84 (4H, m, CH₂) ppm. EI-MS: m/z calc. C₃₄H₃₂¹⁹¹IrN₇ 729.2, found 729.2.

[0360] 실시예 12

[0361]

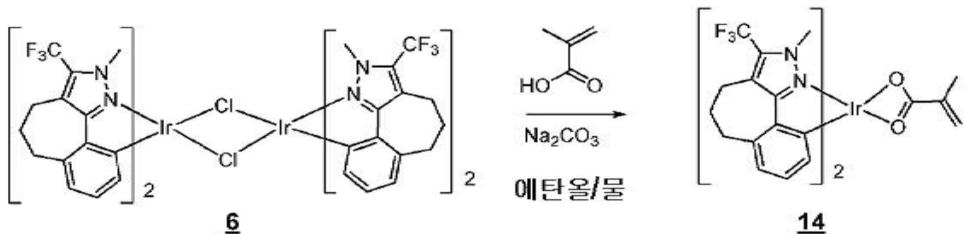
[0362] 다이머 5(150mg, 0.11mmol), 2-(벤조[d]티아졸-2-일)페놀(78mg, 0.34 mmol) 및 탄산 나트륨(121mg, 1.1mmol)을 20mL의 2-에톡시에탄올 속에 용해시켰다. 이 혼합물을 N₂로 텔가스처리 한 후에, 90℃의 오일 배쓰 온도에서 90분 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 그 다음, NMR 분석에 의해 나타나는 바와 같이 반응을 완료시켰다. 용매를 감압하에 제거하고, CH₂Cl₂를 가한 다음, 과량의 Na₂CO₃를 여과시켰다. 용매를 제거하고 잔류물을 실리카 크로마토그래피 (용리제로서 EtOAc/헥산 혼합물 사용)에 의해 정제함으로써 155mg(수율 80%)의 원하는 생성물 11을 수득하였다. ¹H NMR (200 MHz, CDCl₃) 7.73 – 7.59 (1H, m, ArH), 7.57 – 7.37 (1H, m, ArH), 7.22 – 6.99 (3H, m, ArH), 6.98 – 6.80 (3H, m, ArH), 6.64 – 6.36 (4H, m, ArH), 6.31 – 5.99 (2H, m, ArH) 3.81 (3H, s, NCH₃), 3.35 (3H, s, NCH₃) 3.22 – 2.59 (8H, m, CH₂), 2.22 – 1.76 (4H, m, CH₂) ppm. ¹⁹F NMR (CDCl₃, 188MHz) – 112.1, – 115.4 ppm EI-MS: m/z calc. C₃₉H₃₂F₂¹⁹¹IrN₅OS 847.2, found 847.2.

[0363] 실시예 13

[0364]

[0365] 다이머 6(50mg, 0.03mmol), 트로폴론(10mg, 0.08mmol) 및 탄산 나트륨(8.74mg, 0.08mmol)을 2-에톡시에탄올 (10mL) 속에 넣고, 80℃의 오일 배쓰 온도에서 90분 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 이 반응 혼합물을 실온으로 냉각시킨 후에, 용매를 증발시켰다. 잔류물을 CH₂Cl₂로 희석시키고 세라이트 패드를 통해 여과하였다. 조생 성물을 메탄올/물(10mL, 9:1)로 처리한 후에, 갈색 침전물을 여과함으로써 정제된 생성물 13(50mg, 72%)을 수득하였다. ¹H NMR (200 MHz, CDCl₃) 7.34 – 7.24 (3H, m, CH), 7.12 – 7.06 (2H, m, CH), 6.58 – 6.56 (4H, m, ArH), 5.94 – 5.86 (2H, m, ArH), 3.96 (6H, br s, NCH₃), 3.10 – 2.85 (8H, m, CH₂), 2.27 – 2.16 (2H, m, CHH) 2.05 – 1.90 (2H, m, CHH). EI-MS: m/z calc. C₃₅H₂₉F₆¹⁹¹IrN₄O₂ 842.2, found 842.3

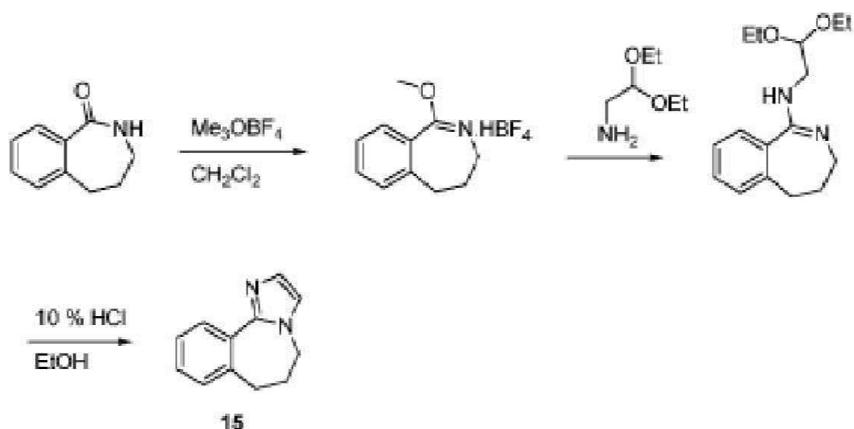
[0366] 실시예 14



[0367]

[0368] 다이머 6(100mg, 0.06mmol), 메타크릴산(14mL, 0.16mmol) 및 탄산 나트륨(17mg, 0.16 mmol)을 에탄올/물(4:1, 5mL) 속에 넣고, 90°C의 오일 배쓰 온도에서 90분 동안 질소 분위기 하에 가열하였다. 이 반응 혼합물을 실온으로 냉각시킨 후에 용매를 증발시켰다. 잔류물을 CH_2Cl_2 (20mL)로 희석시키고, 물(20mL) 및 포화 NaHCO_3 (20mL)로 세척한 후에 무수 MgSO_4 에 건조시켰다. 용매를 증발시킴으로써 원하는 생성물 14(0.1g, 75%)을 황색 고체로서 수득하였다. ^1H NMR (200 MHz, CDCl_3) 6.55 – 6.50 (4H, m, ArH), 6.04 (1H, br s, CHH), 5.79 – 5.77 (2H, m, ArH), 5.43 (1H, br s, CHH), 4.17 (6H, br s, NCH_3), 3.13 – 2.91 (8H, m, CH_2), 2.23 – 2.15 (2H, m, CHH) 2.03 – 1.93 (2H, m, CHH), 1.90 (3H, br s, CH_3). EI-MS: m/z calc. $\text{C}_{32}\text{H}_{29}\text{F}_6$ $^{191}\text{IrN}_4\text{O}_2$ 808.2, found 808.2.

[0369] 실시예 15



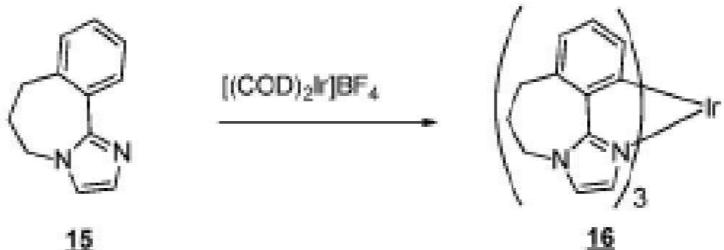
[0370]

[0371] 2,3,4,5-테트라하이드로-1H-벤조[c]아제핀-1-온(1g, 6.2mmol)을 질소 분위기 하에 CH_2Cl_2 (10 mL) 중의 트리메틸옥소늄(0.92g, 6.2mmol)과 혼합하였다. 2 시간 후에 반응이 완료되었다. 용매를 증발시킨 다음, 조생성물을 디에틸 에테르로 처리하고 침전물을 여과하였다. 1.5g(91%)의 1-메톡시-4,5-디하이드로-3H-벤조[c]아제핀 테트라플루오로보레이트를 무색 고체로서 분리하였다. ^1H NMR (200 MHz, CDCl_3) 7.73 – 7.64 (2H, m, ArH), 7.53 – 7.39 (2H, m, ArH) 4.48 (3H, s, OCH_3), 3.60 (2H, t, J = 6.7 Hz, CH_2) 2.91 (2H, t, J = 7.3 Hz, CH_2), 2.54 – 2.30 (2H, m, CH_2). 추가적인 정제과정없이, 1-메톡시-4,5-디하이드로-3H-벤조[c]아제핀 테트라플루오로보레이트(0.15g)를 아미노아세트알데히드 디에틸아세탈(1mL) 속에 넣고, 100°C의 오일 배쓰 온도에서 1시간 동안 가열하였다. 이 반응을 실온으로 냉각시키고 용매를 고진공(high vacuum) 하에 증발시켰다. 조 잔류물을 10% HCl (aq)/ EtOH (1:1, 10mL) 속에 넣고 환류하여 2시간 동안 가열하였다. 그 다음, 이 반응을 실온으로 냉각시키고 용매를 농축하였다. 포화 NaHCO_3 (50mL)를 가함으로써 pH를 조절한 다음, 조생성물을 CH_2Cl_2 (2 x 50 mL)로 추출하고, MgSO_4 에 건조시킨 후에, 용매를 감압 하에 증발시켰다. 실리카 크로마토그래피(1:1 $\text{EtOAc}/\text{헥산}$)에 의한 정제를 행함으로써 70mg(수율 66%)의 순수한 6,7-디하이드로-5H-벤조[c]이미다조[1,2-a]아제핀 **15**를 수득하였다. ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3), 7.78 – 7.75 (1H, m, ArH), 7.35 – 7.28 (2H, m, ArH), 7.22 – 7.24 (1H, m, ArH), 7.11 (1H, d, J = 1.2 Hz, ArH), 6.99 (1H, d, J = 1.2 Hz, ArH), 3.90 (2H, t, J = 6.7 Hz,

CH_2), 2.71 (2H, t, $J = 7.0$ Hz, CH_2), 2.31 (2H, m, CH_2).

[0372] 리간드 **15**는 실시예 4 내지 14에 기술된 방식으로 IrCl_3 와 반응함으로써 트리스 헤테로렙틱 착물을 형성할 수 있다. 대안적으로, 리간드 **15**는 Pt, Rh, Pd, Ru 또는 Os로부터 유도되는 다른 금속 작용제와 반응할 수 있다.

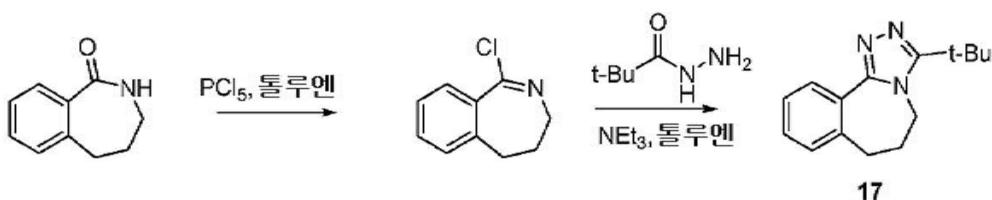
[0373] 실시예 16



[0374]

[0375] 6,7-디하이드로-5H-벤조[c]이미다조[1,2-a]아제핀 **15**(70mg, 0.38mmol)를 1,2-프로판디올(1mL) 중의 [비스(1,5-시클로펜타디엔)이리듐(I)] 트리플루오로보레이트(47mg, 0.09 mmol)와 혼합하고, 동결-水泵-해동 탈가스처리하였다. 이 반응 혼합물을 180°C의 오일 배쓰 온도에서 18시간 동안 가열하였다. 이 반응을 실온으로 냉각시키면 후에, 탈가스처리하고 물을 가하였다. 여과에 의해 황색 침전물을 수집하였다. 과량의 유리 리간드를 메탄올을 사용한 세척에 의해 제거함으로써, 트리스(6,7-디하이드로-5H-벤조[c]이미다조[1,2-a]아제핀-N,C²) 이리듐(III) **16**을 단일 fac 이성질체(NMR 스펙트럼의 싱글세트의 신호에 의해 결정되며, 대칭 이성질체(symmetrical isomer)를 의미함)로서 수득하였다. ¹H NMR (400 MHz, CD_2Cl_2) 6.83 (3H, d, $J = 1.4$ Hz, ArH), 6.76 – 6.74 (3H, m, ArH), 6.60 – 6.52 (6H, m, ArH), 6.38 (3H, d, $J = 1.4$ Hz, ArH), 4.29 – 4.19 (6H, m, CH_2), 3.17 – 3.04 (6H, m, CH_2), 2.28 – 2.16 (6H, m, CH_3).). EI-MS: m/z calc. $\text{C}_{36}\text{H}_{33}$ ¹⁹¹IrN₆ 741.9, found 742.2.

[0376] 실시예 17



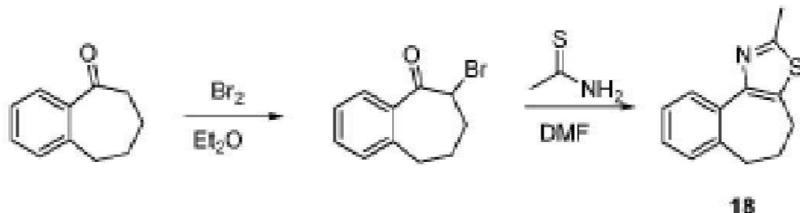
[0377]

[0378] 2,3,4,5-테트라하이드로-1H-벤조[c]아제핀-1-온(0.92g, 5.7mmol)을 톨루엔 (10mL) 속에 용해시키고 PCl_5 (1.188g, 5.7mmol)를 가하였다. 이 반응 혼합물을 120°C의 오일 배쓰 온도에서 1시간 동안 가열하였다. 그 다음, 이 반응을 실온으로 냉각시키고 진공하에 농축시킴으로써 건조되게 하였다. 잔류물을 톨루엔(10mL) 속에 재용해시키고 재증발시킴으로써 모든 POCl_3 부산물이 제거되도록 하였다. 그 다음, 조 잔류물을 톨루엔(20mL) 속에 넣고, 트리에틸아민(0.95mL, 6.85mmol) 및 피발로하이드라지드(0.729g, 6.28mmol)를 가한 후에, 이 반응 혼합물을 3시간 동안 환류하에 가열하였다. Tlc 분석 결과, 원하는 생성물의 존재가 확인되었다. 이 반응을 실온으로 냉각시키고, EtOAc(30mL)로 희석하였다. 유기상을 수성 NaOH(2N, 20mL)로 세척하였다. 그 다음, 10% 수성 HCl(2 x 20 mL)로 세척함으로써 유기상으로부터 생성물을 추출하였다. 수성상(aqueous phase)의 pH는 2N NaOH를 사용하여 pH11로 조절하였으며, 이 생성물을 CHCl_3 (100mL)로 추출하였다. 유기상을 MgSO_4 에 건조시키고, 용매를 감압하에 증발시켰다. 연한 갈색 고체를 수득하였으며 이를 실리카 크로마토그래피(헥산 중 60% EtOAc에서부터 80% EtOAc로 증가)에 의해 정제함으로써 엷은 황백색 고체(0.97g, 수율 70%)로서 생성물 **17**을 수득하였다. ¹H NMR (200 MHz, CDCl_3) 7.84 – 7.76 (1H, m, ArH), 7.42–7.37 (2H, m, ArH), 7.29–7.25 (1H, m, ArH),

4.00 (2H, t, $J_1 = 6.6$ Hz, CH₂), 2.69 (2H, t, $J_2 = 7.1$ Hz, CH₂), 2.28 (2H, tt, $J_1 = 6.6$ Hz, J₋₂ = 7.1 Hz, CH₂), 1.52 (9H, s, tBu).

[0379] 리간드 **17**은 실시예 4 내지 16에 기술된 방식으로 Ir과 반응함으로써 트리스 혼태로펩틱 또는 호모펩틱 촉물을 형성할 수 있다. 대안적으로, 리간드 **17**은 Pt, Rh, Pd, Ru 또는 Os로부터 유도되는 다른 금속 작용제와 반응할 수 있다.

[0380] 실시예 18

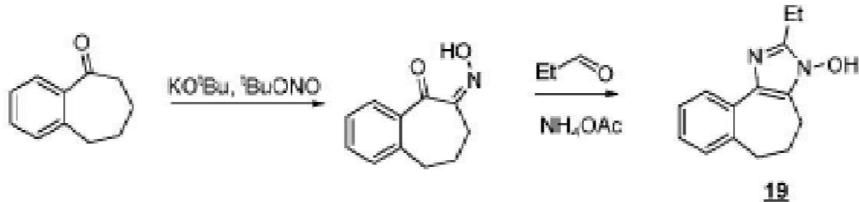


[0381]

[0382] 0°C에서 디에틸에테르(20mL) 중의 6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7] 안눌렌-5-온(1.6g, 10.0mmol) 용액에 브롬(1.59g, 0.5 mL)을 30분 동안 적가하였다. 이 용액을 서서히 실온으로 되도록 밤새 교반시켰다. 그 다음, 이 반응 혼합물을 디에틸 에테트(150mL)로 희석시키고 분액 깔대기(separatory funnel)로 이송하였다. 유기상을 수성 티오설페이트(2 x 100mL) 및 물(2 x 100mL)으로 세척하고 MgSO₄에 건조시킨 후에 용매를 감압하에 증발시킴으로써 2.47g의 조생성물인 연한 황색 액체를 수득하였으며, 이를 실리카 크로마토그래피(100% 석유 스피릿(petroleum spirit)(40-60)에서부터 8:2 석유 스피릿:DCM까지의 기울기 용리)에 의해 정제함으로써, 옅은 황색 액체로서 6-브로도-6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7] 안눌렌-5-온(2.69g, 48%)을 수득하였다. ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) 7.58 (1H, d, $J = 7.6$ Hz, ArH), 7.40 (1H, t, $J = 7.5$ Hz, ArH), 7.28 (1H, t, $J = 7.6$ Hz, ArH), 7.18 (1H, d, $J = 7.6$ Hz, ArH), 4.86 – 4.84 (1H, m, CHH), 3.05 – 2.98 (1H, m, CHH), 2.92 – 2.85 (1H, m, CHH), 2.41 – 2.35 (1H, m, CHH), 2.31 – 2.25 (1H, m, CHH), 2.05 – 1.97 (2H, m, CHH). 6-브로도-6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7]안눌렌-5-온(239mg, 1.0mmol) 및 티오아세트아미드(100mg, 1.3mmol)을 80°C의 오일 배쓰 온도에서 33시간 동안 DMF(10mL) 속에서 가열하였다. 그 다음, 이 용액을 실온으로 냉각시킨 후에 용매를 진공하에 제거하였다. 조잔류물을 CH₂Cl₂(150mL)로 희석시키고, 포화 수성 NaHCO₃(50mL) 및 물(2 x 50mL)로 세척한 후에 MgSO₄에 건조시키고 용매를 증발시킴으로써 조생성물 오렌지색 오일을 수득하였다. 이를 실리카 크로마토그래피(100% CH₂Cl₂에서부터 9:1 CH₂Cl₂:EtOAc까지의 기울기 용리)에 의해 정제함으로써 투명 무색 오일로서 생성물 **18**을 수득하였다. ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.97 – 7.95 (1H, d, ArH), 7.29 – 7.26 (1H, m, ArH), 7.21 – 7.16 (2H, m, ArH), 2.94 – 2.86 (2H, m, CH₂) 2.77 – 2.74 (2H, m, CH₂), 2.68 (3H, s, CH₃), 2.20 – 2.14 (2H, m, CH₂).

[0383] 리간드 **18**은 실시예 4 내지 16에 기술된 방식으로 Ir과 반응함으로써 트리스 혼태로펩틱 또는 호모펩틱 촉물을 형성할 수 있다. 대안적으로, 리간드 **18**은 Pt, Rh, Pd, Ru 또는 Os로부터 유도되는 다른 금속 작용제와 반응할 수 있다.

[0384] 실시예 19



[0385]

[0386] 에탄올(25mL) 속에 포타슘 tert-부톡사이드(2.5g, 22.2mmol)를 넣고 이 혼합물을 실온에서 30분 동안 교반하였다. 그 다음, 6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7]안눌렌-5-온(1.0g, 6.25mmol)을 가하고, 이 혼합물을 실온에서 30분 동안 더 교반하였다. 여기에 tert-부틸 니트라이트(1.35g, 13.1mmol)를 한 방울씩 가한 후에, 이렇게 하여

생성된 용액을 실온에서 밤새 교반하였다. 이 반응 혼합물을 물(25mL)로 희석시킨 후에, 붉은빛 떤 용액을 전한 HCl로 산성화하였다(pH 1~3). 그 다음, 이 산성 혼합물을 디에틸 에테르로 추출한 후에 분리시키고 MgSO₄에 건조한 후에 용매를 증발시킴으로써 조생성을 고체를 수득하였다. 이를 실리카 크로마토그래피(100% 석유 스페릿(40-60)에서부터 100% DCM, DCM: EtOAc 9:1 혼합물까지의 기울기 용리)에 의해 정제함으로써 옅은 황갈색 고체로서 6-(하이드록시이미노)-6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7]안눌렌-5-온(0.56g, 48%)을 수득하였다. 실온에서 아세트산(30mL) 속에 (하이드록시이미노)-6,7,8,9-테트라하이드로-5H-벤조[7]안눌렌-5-온(567mg, 3.0 mmol), 암모늄 아세테이트(900mg, 11.6mmol), 및 프로피온알데히드(0.22mL, 3.0mmol)을 가하면서 TLC 분석에서 케톡сим(ketoxime)이 소비된 것으로 나타날 때까지 교반하였다. 그 다음, 감압하에 증발에 의해 아세트산을 제거하였다. 조잔류물을 300mL DCM으로 희석하였다. 그리고 나서, 유기상을 포화 수성 NaHCO₃(150mL) 및 물(2 x 150mL)로 세척한 후에 무수 MgSO₄에 건조시켰다. 감압하에 용매를 제거함으로써 암갈색을 띤 오일로서 480mg의 조생성을 수득하였다. 이를 실리카 크로마토그래피(100% DCM에서부터 95% DCM, 5% MeOH까지의 기울기 용리)에 의해 정제함으로써 연한 갈색 오일로서 N-하이드록시-이미다졸 **19**_(260mg, 40%)를 수득하였다. ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) 8.96 1H, br s, OH), 7.67 - 7.66 (1H, m, ArH), 7.04 - 6.96 (3H, m, ArH), 2.77 - 2.74 (2H, m, CH₂), 2.69 - 2.67 (2H, m, CH₂), 2.68 - 2.58 (2H, q, J = 7.6 Hz, CH₂), 1.89 - 1.84 (2H, m, CH₂), 1.04 - 1.00 (3H, t, J = 7.6 Hz, CH₃).

[0387] 리간드 **19**는 실시예 4 내지 16에 기술된 방식으로 Ir과 반응함으로써 트리스 헤테로렙티 또는 호모렙티 착물을 형성할 수 있다. 대안적으로, 리간드 **19**는 Pt, Rh, Pd, Ru 또는 Os로부터 유도되는 다른 금속 작용제와 반응할 수 있다.

실시예 20

[0389] 유기 전계발광 장치는 다음과 같은 방식으로 제조되었다. 즉, ITO 패턴 유리 기판을 연속적으로 아세톤 및 이소프로판을 속에서 15분 동안 초음파처리한 후에 건조시켰다. 그 다음, ITO의 상단에 4000 rpm의 스핀 속도로 1분 동안 PEDOT:PSS를 스핀 코팅처리한 후에, 150°C에서 15분 동안 핫 플레이트 상에서 베이킹하였다. PEDOT:PSS 층의 두께는 40nm인 것으로 측정되었다. 그 다음, 이 기판을 글로브 박스로 이송시키고, PEDOT:PSS 층의 상단에 3000 rpm의 스핀 속도로 1분 동안 발광층을 스핀 코팅처리한 후에, 80°C에서 30분 동안 베이킹하였다. 발광층을 형성하기 위해서, PVK, PBD, TPD 및 화합물 **10**으로 이루어진 용액을 클로로벤젠 속에 용해시켜 사용하였다. 상기 4가지 성분의 중량비는 65:25:9:6이었다. 발광층의 두께는 90nm인 것으로 측정되었다. 그 다음 이어서, 1x10⁻⁵ Pa의 진공 하에 TPBi (정공 차단층, 20 nm), LiF (전자 주입층, 1 nm) and Al (캐소드, 120 nm)의 층을 증착하였다.

[0390] 애노드와 캐소드 사이에 전압을 인가하였을 때, 본 장치는 최대파장 565nm를 갖는 광을 방출하였다. CIE 색좌표(colour coordinates)는 (0.49; 0.49)이었다. 최대 전류 효율(current efficiency)은 휘도(brightness) 1800 cd/m², 전압 15V에서 20 cd/A이었다. 최대 휘도는 21V에서 20000 cd/m²이었다.

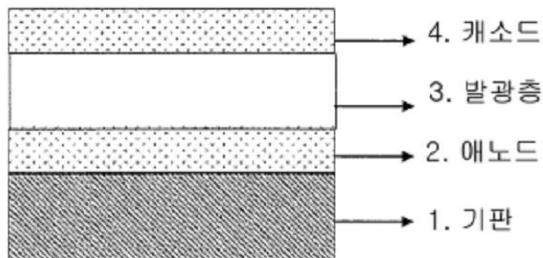
[0391] 본 실시예는 본 명세서에서 기술된 인광물질이 본 명세서에서 기술된 유기 전계발광 장치내에 함유될 때, 이 장치가 광을 방출한다는 것을 분명하게 보여준다(도 5 참조).

[0392] 종래의 해당 기술에 관한 공개문헌에 대한 언급은 호주나 기타 다른 국가에서처럼 공개문헌이 당해 분야의 통상적인 일반 지식의 일부로 인정되는 것으로는 간주되지 않는다는 점을 이해해야 할 것이다.

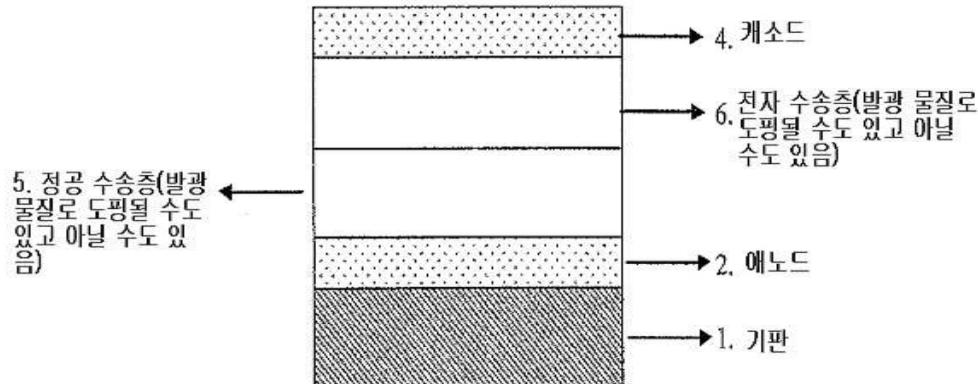
[0393] 본 명세서의 앞서 기술한 내용 및 이후의 청구범위에서, "포함한다" 또는 그 변형어, 예컨대 "포함한"이나 "포함하는"이라는 용어는 표현 언어나 필연적 함축으로 인해 전후 문맥이 요구되는 경우를 제외하고는, 본 발명의 다양한 구현예에서 기술된 요소들의 존재를 명시하지만 추가적 요소의 존재 또는 첨가를 배제하지 않는 포괄적인 의미로 사용된다.

도면

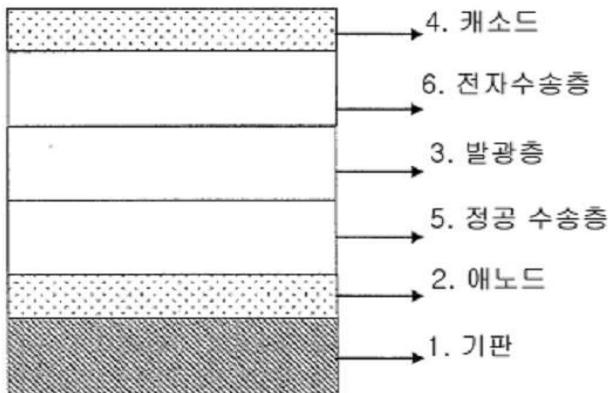
도면1



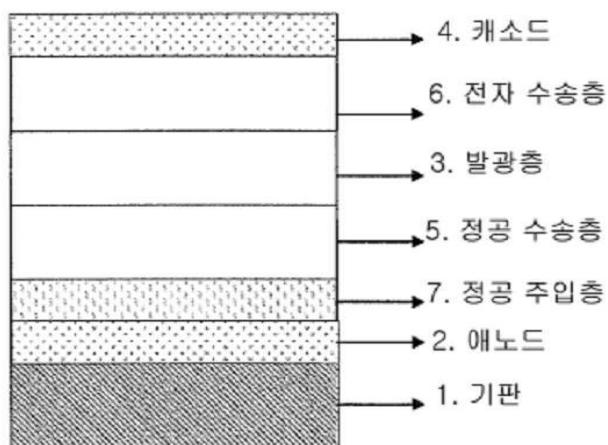
도면2



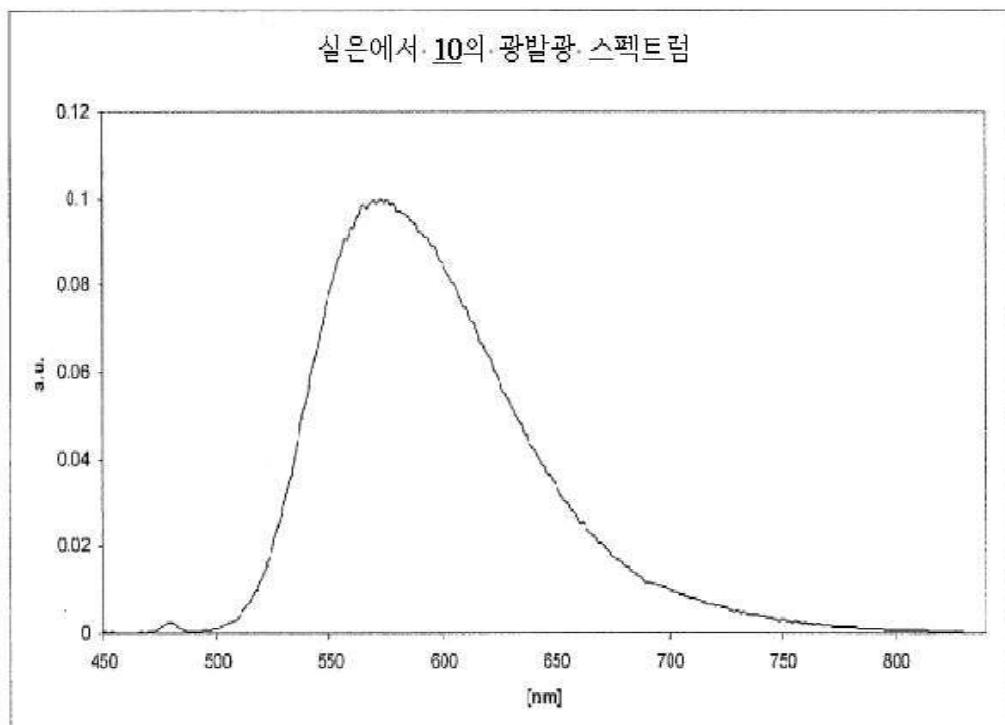
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	一种电致发光器件，包括磷光铱和相关的VIII族金属多环化合物作为基础材料		
公开(公告)号	KR1020130097639A	公开(公告)日	2013-09-03
申请号	KR1020127030351	申请日	2011-04-28
[标]申请(专利权)人(译)	联邦科学和工业研究组织		
申请(专利权)人(译)	联邦科学与工业研究现代化ohgani		
当前申请(专利权)人(译)	联邦科学与工业研究现代化ohgani		
[标]发明人	GROARKE MICHELLE 그로아케미셀 UENO KAZUNORI 우에노가즈노리 BOWN MARK 바운마크 ANDRESEN SVEN 안트레젘스벤		
发明人	그로아케미셀 우에노가즈노리 바운마크 안트레젘스벤		
IPC分类号	H01L51/54 C07F15/00 C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50 H05B33/10		
CPC分类号	H05B33/10 C09K2211/1011 C09K2211/1029 C09K2211/1037 H01L51/5012 C09K2211/185 C07F15/0033 H01L51/0085 C09K2211/1007 C09K11/06 C09K2211/1059 H01L51/5016 C09K2211/1044		
代理人(译)	Gimjinhoe		
优先权	2010901797 2010-04-28 AU		
其他公开文献	KR101837216B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

公开了包含Ir, Pt, Rh, Pd, Ru和至少一种配体L(配体L在化学式1中表示)和选自Os的热搅拌M的络合物的荧光体。此外,公开了用于容纳这种荧光体的有机电致发光器件。

