



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2010-0017861
(43) 공개일자 2010년02월16일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01) *C07F 15/00* (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01) *H05B 33/14* (2006.01)

(21) 출원번호 10-2009-7026431

(22) 출원일자 2008년06월05일

심사청구일자 없음

(85) 번역문제출일자 2009년12월18일

(86) 국제출원번호 PCT/EP2008/056953

(87) 국제공개번호 WO 2008/148829

국제공개일자 2008년12월11일

(30) 우선권주장

07109875.0 2007년06월08일

유럽특허청(EPO)(EP)

(71) 출원인

솔베이(소시에떼아노님)

벨기에왕국 브뤼셀스 비-1050 뤼 두 프린스 알버트 33

(72) 발명자

나제루딘 모하메드 카자

스위스 체하-1024 에꾸블랑 슈맹 드 몽타네 - 10

에반스 니콜라스

스위스 체하-1005 로잔느 뤼 드 르꼴-주페리외르 3

그래첼 미카엘

스위스 체하-1025 생 줄피세 슈맹 뒤 마르퀴자 7 에이

(74) 대리인

특허법인코리아나

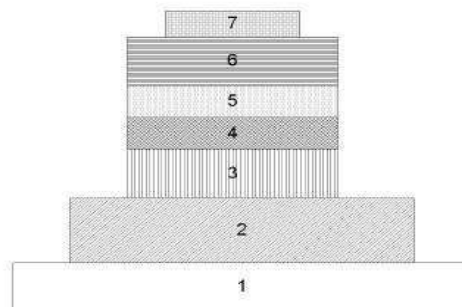
전체 청구항 수 : 총 13 항

(54) 발광 물질

(57) 요약

본 발명은, 2개의 오르토금속화된 킬레이트 C^N 리간드 및 두자리 포스포노카복실레이트 유형의 보조 리간드가 포함된 신규의 오르토-금속화된 전이금속 착물류[C^N]₂M[P^O]를 포함하는 발광 물질류에 관한 것이다. 놀랍게도, 상기 금속이 오르토금속화된 킬레이트 C^N 리간드들 및 두자리 포스포노카복실레이트 유형의 보조 리간드(P^O) 양쪽 모두에 결합하는 경우, 상기 리간드들이 방출 과정에 유리하게 참여함으로써, [C^N]₂M[P^O] 착물류의 청색 방출 효율을 상당히 개선한다는 것을 발견하였다. 본 발명은 또 다른 목적은 상기 발광 물질류의 용도, 및 상기 발광 물질들을 포함하는 유기발광소자에 관한 것이다.

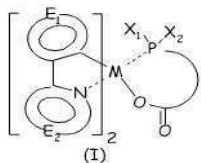
대표도 - 도1



특허청구의 범위

청구항 1

화학식(I)의 중성 착물:

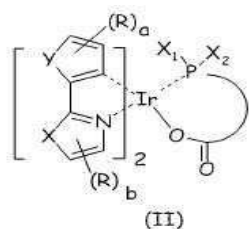


(식 중에서:

- M은 원자번호 40 이상인 전이금속, 바람직하게는 8 내지 12족에 속하는 전이금속, 더욱 바람직하게는 Ir 또는 Pt, 가장 바람직하게는 Ir을 나타내고;
- E₁은 추가의 방향족 잔기들 또는 비방향족 고리들과 임의로 축합되는 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 나타내 되, 상기 고리는 임의로 하나 이상의 치환기를 가지며 E₂를 포함하는 고리와 함께 축합된 구조를 임의로 형성하고, 상기 고리는 sp² 혼성 탄소를 통해 금속 M에 배위결합되며;
- E₂는 추가의 방향족 잔기들 또는 비방향족 고리들과 임의로 축합된 N-함유 방향족 고리를 나타내되, 상기 고리는 임의로 하나 이상의 치환기를 가지며 E₁를 포함하는 고리와 함께 축합된 구조를 임의로 형성하고, 상기 고리는 sp² 혼성 질소를 통해 금속 M에 배위결합되고;
- X₁ 및 X₂는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하며, 알킬, 아릴, 헤테로아릴 및 헤테로알킬 중에서 독립적으로 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있음).

청구항 2

제 1 항에 있어서, 화학식(II)로 표현되는 중성 착물:



(식 중에서:

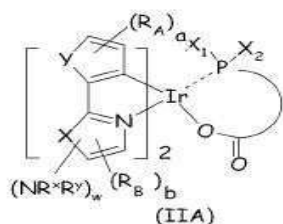
- X₁, 및 X₂는 상기 정의된 것과 동일한 의미를 가지며;
- X는 -CH=CH-, -CR=CH-, -CR=CR-, N-H, N-R¹, O, S 및 Se로 이루어진 군에서 선택되되, 바람직하게 X는 -CH=CH-, -CR=CH- 및 S 중에서 선택되고, 가장 바람직하게 X는 -CH=CH- 이고;
- Y는 -CH=CH-, -CR=CH-, -CR=CR-, N-H, N-R¹, O, S 및 Se로 이루어진 군에서 선택되되, 바람직하게 Y는 -CH=CH-, -CR=CH- 및 S 중에서 선택되고, 가장 바람직하게 Y는 -CH=CH- 이며;
- R은 각 경우에 서로 동일하거나 상이하며, -F, -Cl, -Br, -NO₂, -CN; 1 내지 20 개의 탄소수를 갖는 직쇄 또는 분지형 또는 사이클릭 알킬 또는 알콕시기 또는 디알킬아미노기(이들 각각에서 하나 이상의 비인접한 -CH₂-기는 -O-, -S-, -NR¹-, 또는 -CONR²-로 대체될 수 있으며, 이들 각각에서 하나 이상의 수소 원자는 F로 대체가능); 또는 하나 이상의 비방향족 라디칼로 치환될 수 있는 4 내지 14개의 탄소 원자들을 갖는 아릴기 또는 헤테로아릴기이며, 동일 고리 상 또는 2개의 상이한 고리 상에 위치하는 다수의 치환기들 R은 함께 추가로 임의의

방향족의 모노- 또는 폴리사이클릭 고리계를 결과적으로 형성할 수 있고;

- R^1 및 R^2 는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하고, 각각은 H, 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자들을 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼이며;
- a는 0 내지 4의 정수이고;
- b는 0 내지 4의 정수)

청구항 3

제 2 항에 있어서, 화학식(IIA)으로 표현되는 중성 착물:



(식 중에서:

- X_1 , X_2 , X, Y 및 a는 상기 정의된 것과 동일한 의미를 가지며;
- R_A 및 R_B 는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하며, -F, -Cl, -Br, -NO₂, -CN; 1 내지 20 개의 탄소수를 갖는 직쇄 또는 분지형 또는 사이클릭 알킬 또는 알콕시기(이들 각각에서 하나 이상의 비인접한 -CH₂-기는 -O-, -S-, -NR¹-, 또는 -CONR²-로 대체될 수 있으며, 이들 각각에서 하나 이상의 수소 원자는 F로 대체가능); 하나 이상의 비방향족 라디칼로 치환될 수 있는 4 내지 14개의 탄소 원자들을 갖는 아릴기 또는 헤테로아릴기 중에서 독립적으로 선택되고, 동일 고리 상 또는 2개의 상이한 고리 상에 위치하는 다수의 치환기들 R_A 및/또는 R_B 는 함께 추가로 임의의 방향족의 모노- 또는 폴리사이클릭 고리계를 결과적으로 형성할 수 있되, 바람직하게 R_A 및/또는 R_B 는 불소기들(-F)이고;
- R^x 및 R^y 는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하고, C₁-C₆ 알킬기, 플루오로- 또는 퍼플루오로알킬기들(예컨대, -CH₃, -nC₄H₉, iC₃H₇, -CF₃, -C₂F₅, -C₃F₇ 또는 하나 이상의 에테르기를 갖는 C₁-C₆ 알킬, 플루오로- 또는 퍼플루오로알킬기들 중에서 독립적으로 선택되며; 바람직하게 R^x 및 R^y 는 C₁-C₆ 알킬기들 중에서 독립적으로 선택되고; 더욱 바람직하게 R^x 및 R^y 는 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸기들 중에서 선택되며;
- R^1 및 R^2 는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하고, 각각은 H, 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자들을 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼이며;
- b는 0 내지 3의 정수이고;
- w는 1과 4 사이의 정수).

청구항 4

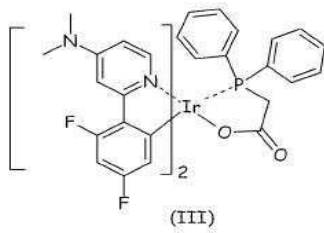
제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 X_1 및 X_2 가 비치환 또는 치환된 아릴기들 중에서 각각 독립적으로 선택되는, 착물.

청구항 5

제 4 항에 있어서, 상기 X_1 및 X_2 모두가 페닐인, 착물.

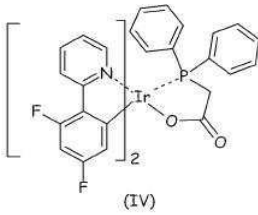
청구항 6

제 3 항에 있어서, 화학식(III)으로 표현되는 착물:



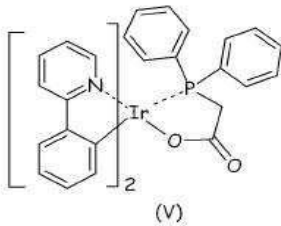
청구항 7

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 화학식(IV)으로 표현되는 착물:



청구항 8

제 1항 또는 제 2 항에 있어서, 화학식(V)으로 표현되는 착물:



청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 상기 착물을 포함하는 발광 물질.

청구항 10

유기발광소자의 발광층 내에서의 제 9 항에 따른 상기 발광 물질의 용도.

청구항 11

유기발광소자에서 발광층으로서 기능하는, 호스트층 내에서의 제 9 항에 따른 상기 발광 물질의 도펀트로서의 용도.

청구항 12

발광층(EML)을 포함하는 유기발광소자(OLED)로서, 상기 발광층이 제 9 항에 따른 상기 발광 물질, 및 임의로 호스트 물질을 포함하는 것을 특징으로 하는, 소자.

청구항 13

제 12 항에 따른 상기 유기발광소자를 포함하는 디스플레이 장치.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 발광 물질 및 상기 물질의 용도에 관한 것이다. 본 발명은 또한 전기 에너지를 빛으로 전환할 수 있는 발광 장치에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 현재, 각종 디스플레이 장치, 특히 유기 물질류로부터의 전계발광(EL)을 바탕으로 하는 장치가 활발히 연구 및 개발되고 있다.

[0003] 광발광(즉, 여기 상태의 방사성 감쇠에 의한 광학 흡수와 완화의 결과로서 활성 물질로부터의 빛의 방출)과는 대조적으로, 전계발광(EL)은 기관에 전기장을 인가함으로써 야기되는 비열성 빛을 발생시키는 것이다. 후자의 경우, 여기현상은 외부 회로의 존재 하에서 유기 반도체에 주입된 반대 부호의 전하 운반체들(전자들 및 정공들)이 재조합됨으로써 이루어진다.

[0004] 유기발광다이오드(OLED)의 단순 원형, 즉, 단일층 OLED는 전형적으로 두 전극 사이에 개재되어 있는 활성 유기 물질의 박막으로 구성된다. 이 중 하나의 전극은 유기층으로부터의 빛 방출을 관찰하기 위해 반투명일 필요가 있다. 보통, 산화인듐주석(ITO)으로 코팅된 유리 기판이 음극으로 사용된다.

[0005] 이러한 두 전극에 외부전압이 인가되면, 음극에서의 전하 운반체들(즉, 정공들) 및 양극에서의 전자들은 적용된 유기 물질에 따라 결정되는 특정 문턱전압을 넘어 유기층에 주입된다. 전기장의 존재하에, 전하 운반체들은 활성층을 통해 이동하다가, 반대 전하로 대전된 전극에 도달하면 비방사성으로 방전된다. 그러나, 정공 및 전자가 유기층을 통해서 이동하는 동안 서로 마주치면, 여기된 단일항(비대칭) 및 삼중항(대칭) 상태들(즉, 소위 여기자들)이 형성된다. 따라서, 분자 여기 상태들(또는 여기자들)의 붕괴로 인해 유기 물질에서 빛이 발생한다. OLED 내 전기적 여기에 의해 형성되는 모든 3개의 삼중항 여기자에 대해, 오직 하나의 대칭 상태(단일항) 여기자가 생성된다.

[0006] 많은 유기 물질류는 단일항 여기자들로부터 형광(즉, 대칭-허용 과정으로부터의 발광)을 나타내는데, 이 과정은 동일한 대칭 상태들 사이에서 발생하기 때문에, 효율적일 수 있다. 반대로, 여기자의 대칭이 바닥상태의 대칭과 상이한 경우에, 여기자의 방사성 완화는 허용되지 않으며, 발광은 느리고 비효율적일 것이다. 바닥 상태가 보통 비대칭이므로, 삼중항으로부터의 붕괴가 대칭을 파괴한다. 따라서, 이 과정은 허용되지 않으며 EL의 효율은 매우 낮다. 그러므로, 삼중항 상태에 포함되어 있던 에너지는 대부분 소진된다.

[0007] 대칭-불허용 과정으로부터의 발광은 인광(phosphorescence)으로 공지되어 있다. 전형적으로, 급속한 붕괴에서 비롯되는 형광과는 달리, 인광은, 낮은 전이 가능성으로 인해 여기 후에도 수 초까지 지속될 수 있다.

[0008] 그러나, 극히 소수의 유기 물질류만이 삼중항으로부터 효율적인 실온 인광을 나타내는 것으로 확인되었다.

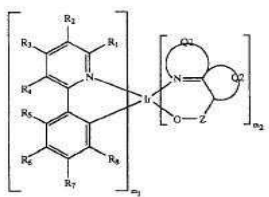
[0009] 인광 물질이 성공적으로 활용된다면, 이는 유기 전계발광 소자에 대해 엄청난 장래성과 장점들을 가진다. 예를 들어, 인광 물질 활용의 한가지 장점은, 인광 소자에서 (부분적으로) 삼중항을 바탕으로 하는 모든 여기자들(EL에서 정공들과 전자들의 조합으로 형성됨)이 에너지 전이와 발광에 참여할 수 있다는 것이다. 이는 인광 방출 자체를 통해 달성할 수 있다. 선택적으로는, 호스트의 삼중항 상태로부터의 인광이 호스트의 삼중항 상태에서 게스트의 단일항 상태로 에너지 전이가 가능하게 함에 따라, 형광과정의 효율을 개선하기 위한 인광 물질을 형광 게스트에서의 인광 호스트 또는 도펀트로 사용함으로써 달성할 수 있다.

[0010] 모든 경우에, 발광 물질이 삼원색(즉, 적색, 녹색 및 청색) 중 하나에 해당하는, 선택된 스펙트럼 영역들 가까이 집중되어 있는 비교적 좁은 밴드에서 전계발광 방출을 제공하는 것이 중요하다. 이렇게 함으로써 발광 물질이 OLED에서 착색층으로서 사용될 수 있다.

[0011] 발광 소자들의 특성을 개선하기 위한 수단으로, 오르토-금속화된 이리듐 착물로부터의 발광을 활용하는 녹색 발광 소자가 보고되었다(Ir(ppy)₃: 2-페닐피리딘(ppy)과 이리듐(III)의 트리스-오르토-금속화된 착물. *Appl. phys. lett.*, 1999, vol.75, p.4.).

[0012] 따라서, US 2005287391(SAMSUNG SDI CO LTD) 29/12/2005에는, 하기의 화학식들 1 및 2:

[0013] [화학식 I]

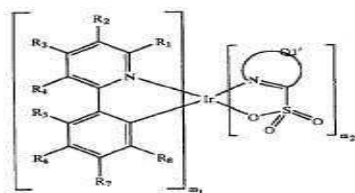


[0014]

[0015] (식 중에서 Q1은 N을 포함하는 방향족 고리이고 Q2는 Q1에 접합된 방향족 고리이고;

[0016] Z는 카보닐 연결기(>C=O), 알킬렌기, 산소원자 연결기(-O-), 질소원자 연결기(-NH-), 티오카보닐 연결기(>C=S), 설폭사이드 연결기(>S=O), 설포닐 연결기(-SO₂-) 및 이들의 조합)

[0017] [화학식 II]



[0018]

[0019] (식 중에서, Q1'은 N을 포함하는 방향족 고리이고;

[0020] m₁은 0 내지 2의 정수이고, m₂는 3-m₁이고;

[0021] R₁, R₂, R₃, R₄, R₅, R₆, R₇ 및 R₈은 각각 수소 또는 치환체)

[0022] 로 표현되는 바와 같이, 삼중항 금속-리간드 전하이동(MLCT) 상태에서 청색 영역에서 적색 영역까지의 범위 내에서 빛을 방출하는 이리듐(III) 착물류가 개시되어 있다.

[0023] **TAQUI KHAN, M.M., et al.**은 디페닐포스피노아세트산의 백금족 금속 착물류의 합성과 특징분석. *Inorganica Chimica Acta*. 1988, vol.143, p.177-184에서, 몰비 2:1로 POH(PHO = 디페닐포스피노아세트산)가 Rh(I) 및 Ir(I) 사각평면착물 MCl(CO)-(PPh₃)₂와 상호반응하는 결과로서 trans-M(PO)(POH)(CO) 유형의 착물류가 형성되는 반면에, 몰비 3:1로 RhCl₃ 및 IrCl₃가 POH와 상호반응하는 결과로는 M(PO)₂(POH)Cl(M=Rh(III) 및 Ir(III))이 형성됨을 개시하고 있다.

[0024] **TAQUI KHAN, M.M., et al.**은 또한 디페닐포스핀아세트산의 Ru(III)과 Ru(II) 착물류의 합성과 특징분석 및 이들과 소분자와의 상호반응. *Inorganica Chimica Acta*. 1988, vol.147, p.33-43에서, 몰비 3:1로 리간드 POH(POH = 디페닐포스피노아세트산)가 RuCl₂-(PPh₃)₃와 상호반응하는 결과로서 PPh₃이 완전히 변위된 Ru(PO)₂(PPh)₃ 조성물의 5-배위 착물을 제공하지만, 몰비 2:1로는 Ru(PO)₂(POH) 착물이 형성됨을 개시하고 있다.

[0025] **KUANG, Shan-Ming, et al.**은 디페닐포스피노아세트산의 반응에서 유도되는 착물류. Part 4. 디페닐(2,6-디메틸페닐)-포스핀 리간드를 수반하는 Rh(I), Ir(I) 및 Ir(III)의 단핵 착물류 및 일부 관련 화학. *Inorganica Chimica Acta*. 2003, vol.343, p.275-280에서, CO의 존재하에 이리듐 착물[IrCl(COD)]₂과 디페닐포스피노아세트산의 반응에 의해 제조되고, 고체 상태에서는 수소가 결합된 이량체로서 존재하는 이리듐(III) 착물 IrHCl(CO)(η^2 -Ph₂PCH₂CO₂)(η^1 -Ph₂PCH₂CO₂H)을 개시하고 있다.

[0026] **JAROLIM, T., et al.**은 디페닐포스피노아세트산의 배위 거동. *J. Inorg. Nucl. Chem* 1976, vol.38, p.125-129에서, 카보닐 단독 결합; 인 및 카보닐 모두를 통해 배위된 킬레이트-형성 리간드; 및 인 단독 결합으로 이루어진 3가지의 배위모드로 존재하는, 다기능성 리간드로서의 디페닐포스핀아세트산을 개시하고 있다.

[0027] 그러나, 이상의 선행기술에 따른 발광 물질류는 순수색들을 표시하지 않기 때문에, 즉 이들의 방출띠들(일반적으로는 녹색에 국한되어 있음)이, 선택된 스펙트럼 영역들(삼원색들인 적색, 녹색 및 청색 중 하나에 해당)가

카이에 집중되어 있지 않기 때문에, OLED 활성 화합물로서 적용될 수 있는 범위는 좁다. 따라서, 특히 청색 영역 내에서, 기타 색들의 빛을 방출할 수 있는 발광 물질류를 개발하는 것이 요구된다.

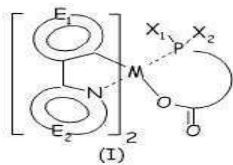
[0028] 양호한 색좌표를 가진, 효율적이고 수명이 긴 청색광원(blue-light emitter)은 현재 유기 전계발광 소자 분야에서 부족한 점으로 인식되어 있다.

발명의 상세한 설명

[0029] 따라서, 본 발명의 목적은 하기에 상술하는 바와 같은 보조 리간드를 가진 중성 오르토-금속화 착물을 포함하는 발광 물질을 제공하는 것이다.

[0030] 본 발명의 다른 목적은 상기 발광 물질의 용도이며, 또한 상기 발광 물질을 포함하는 유기발광소자를 제공하는 것이다.

[0031] 본 발명의 첫째 목적은 하기 화학식(I)의 중성 착물:



[0032]

[0033] (식 중에서:

[0034] - M은 원자번호 40 이상인 전이금속, 바람직하게는 8 내지 12족에 속하는 전이금속, 더욱 바람직하게는 Ir 또는 Pt, 가장 바람직하게는 Ir을 나타내고;

[0035] - E₁은 추가의 방향족 잔기들 또는 비방향족 고리들과 임의로 축합되는 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 나타내 되, 상기 고리는 임의로 하나 이상의 치환기를 가지며 E₂를 포함하는 고리와 함께 축합된 구조를 임의로 형성하고, 상기 고리는 sp² 혼성 탄소를 통해 금속 M에 배위결합되며;

[0036] - E₂는 추가의 방향족 잔기들 또는 비방향족 고리들과 임의로 축합된 N-함유 방향족 고리를 나타내되, 상기 고리는 임의로 하나 이상의 치환기를 가지며 E₁를 포함하는 고리와 함께 축합된 구조를 임의로 형성하고, 상기 고리는 sp² 혼성 질소를 통해 금속 M에 배위결합되고;

[0037] - X₁ 및 X₂는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하며, 알킬, 아릴, 헤테로아릴 및 알킬 중에서 독립적으로 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있음)

[0038] 을 포함하는 발광 물질을 제공하는 것이다.

[0039] E₁ 및 E₂ 잔기들을 포함하는 화학식 (I)에 구체화된 바와 같이, 탄소 원자 및 질소 원자를 통해 금속에 결합된 2 개의 킬레이팅 일가음이온성 리간드는 일반적으로 오르토금속화된 리간드(이하, "C^N 리간드")로서 지칭된다.

[0040] 산소 원자 및 인 원자를 통해 금속에 결합된 킬레이팅 두자리 포스피노카복실레이트 일가음이온성 리간드는 일반적으로 보조 리간드(P^O 리간드)로서 지칭된다.

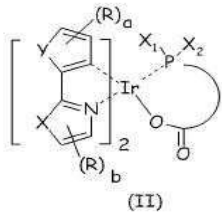
[0041] 놀랍게도, 이러한 금속이 E₁ 및 E₂ 잔기들을 포함하는 오르토금속화 리간드들과 두자리 포스피노카복실레이트 유형의 보조 리간드를 결합하는 경우, 상기 리간드들은 방출 과정에 유리한 쪽으로 참여함으로써, 착물 [C^N]₂M[P^O]의 청색 방출 효율을 상당히 개선시킨다는 것을 발견하였다.

[0042] 또한, 화학식(I)에 따른 중성 착물류는 일반적으로 습기에 덜 민감하고 정제과정을 통해 유리하게 승화될 수 있으므로, 이온성(양이온성 또는 음이온성) 착물보다 바람직하다.

[0043] 킬레이트 두자리 포스피노카복실레이트 일가음이온성 리간드와 중심 전이금속 원자는 일반적으로 5-원, 6-원 또는 7-원 금속함유고리를 생성하는데, 다시 말하면 포스피노기 및 카복실레이트 잔기는 특히 1개, 2개 또는 3개의 탄소 원자들에 의해 단리될 수 있다.

[0044] 포스피노기 및 카복실레이트기가 동일한 탄소 원자에 결합되어 있는 리간드가 바람직한 P⁰ 리간드이며: 유리하게 이들 리간드는, 5-원 금속함유고리를 포함하는, 특히 안정적 착물류를 형성한다.

[0045] 바람직하게, 본 발명의 발광 물질은 하기 화학식(II):



[0046]

[0047] (식 중에서:

[0048] - X₁, 및 X₂는 상기 정의된 것과 동일한 의미를 가지며;

[0049] - X는 -CH=CH-, -CR=CH-, -CR=CR-, N-H, N-R¹, O, S 및 Se로 이루어진 군에서 선택되며, 바람직하게 X는 -CH=CH-, -CR=CH- 및 S 중에서 선택되고, 가장 바람직하게 X는 -CH=CH- 이고;

[0050] - Y는 -CH=CH-, -CR=CH-, -CR=CR-, N-H, N-R¹, O, S 및 Se로 이루어진 군에서 선택되며, 바람직하게 Y는 -CH=CH-, -CR=CH- 및 S 중에서 선택되고, 가장 바람직하게 Y는 -CH=CH- 이며;

[0051] - R은 각 경우에 서로 동일하거나 상이하며, -F, -Cl, -Br, -NO₂, -CN; 1 내지 20 개의 탄소수를 갖는 직쇄 또는 분지형 또는 사이클릭 알킬 또는 알콕시기 또는 디알킬아미노기(이들 각각에서 하나 이상의 비인접한 -CH₂-기는 -O-, -S-, -NR¹-, 또는 -CONR²-로 대체될 수 있으며, 이들 각각에서 하나 이상의 수소 원자는 F로 대체가능); 또는 하나 이상의 비방향족 라디칼로 치환될 수 있는 4 내지 14개의 탄소 원자들을 갖는 아릴기 또는 헤테로아릴기이며, 동일 고리 상 또는 2개의 상이한 고리 상에 위치하는 다수의 치환기들 R은 함께 추가로 임의의 방향족의 모노- 또는 폴리사이클릭 고리계를 결과적으로 형성할 수 있고;

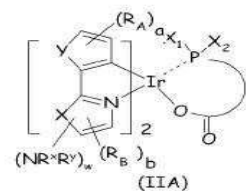
[0052] - R¹ 및 R²는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하고, 각각은 H, 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자들을 갖는 지방족- 또는 방향족 탄화수소 라디칼이며;

[0053] - a는 0 내지 4의 정수이고;

[0054] - b는 0 내지 4의 정수)

[0055] 의 중성 착물을 포함한다.

[0056] 더 바람직하게, 본 발명의 발광 물질은 하기 화학식(IIA):



[0057]

[0058] (식 중에서:

[0059] - X₁, X₂, X, Y 및 a는 상기 정의된 것과 동일한 의미를 가지며;

[0060] - R_A 및 R_B는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하며, -F, -Cl, -Br, -NO₂, -CN; 1 내지 20 개의 탄소수를 갖는 직쇄 또는 분지형 또는 사이클릭 알킬 또는 알콕시기(이들 각각에서 하나 이상의 비인접한 -CH₂-기는 -O-, -S-, -NR¹-, 또는 -CONR²-로 대체될 수 있으며, 이들 각각에서 하나 이상의 수소 원자는 F로 대체가능); 하나 이상의 비방향족 라디칼로 치환될 수 있는 4 내지 14개의 탄소 원자들을 갖는 아릴기 또는 헤테로아릴기 중에서 독립적

으로 선택되고, 동일 고리 상 또는 2개의 상이한 고리 상에 위치하는 다수의 치환기들 R_A 및/또는 R_B 는 함께 추가로 임의의 방향족의 모노- 또는 폴리사이클릭 고리계를 결과적으로 형성할 수 있되, 바람직하게 R_A 및/또는 R_B 는 불소기들(-F)이고;

[0061] - R^x 및 R^y 는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하고, C_1 - C_6 알킬기, 플루오로- 또는 퍼플루오로알킬기들(예컨대, $-CH_3$, $-nC_4H_9$, iC_3H_7 , $-CF_3$, $-C_2F_5$, $-C_3F_7$ 또는 하나 이상의 에테르기를 갖는 C_1 - C_6 알킬, 플루오로- 또는 퍼플루오로알킬기들 중에서 독립적으로 선택되며; 바람직하게 R^x 및 R^y 는 C_1 - C_6 알킬기들 중에서 독립적으로 선택되고; 더욱 바람직하게 R^x 및 R^y 는 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸기들 중에서 선택되며;

[0062] - R^1 및 R^2 는 각 경우에 서로 동일하거나 상이하고, 각각은 H, 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자들을 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼이며;

[0063] - b는 0 내지 3의 정수이고;

[0064] - w는 1과 4 사이의 정수)

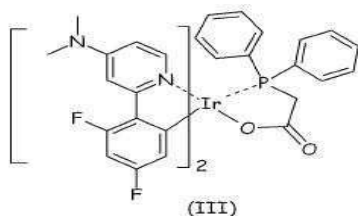
[0065] 의 중성 착물을 포함한다.

[0066] 특히 바람직한 화학식(IIA)의 착물류는 적어도 하나의 디알킬아미노기 $-NR^xR^y$ 가 질소 원자에 대해 para 위치에 있는 착물들이다.

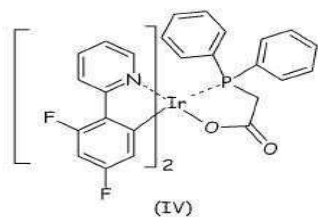
[0067] 본 발명의 착물류 중에서, X_1 및 X_2 이 비치환- 또는 치환된 아릴기들로부터 각각 독립적으로 선택되는 착물들이 바람직하다.

[0068] X_1 및 X_2 이 페닐인 착물들이 더욱 바람직하다.

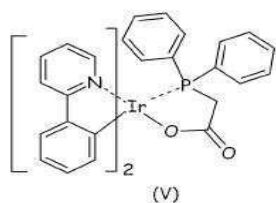
[0069] 우수한 결과는 하기의 화학식(III) 내지 (V):



[0070]



[0071]



[0072]

[0073] 의 중성 착물을 포함하는 발광 물질로 얻어진다.

[0074] 오르토금속화된 리간드들 및 디페닐포스포노 아세테이트 잔기를 보조 리간드로서 포함하는 화학식(III) 내지

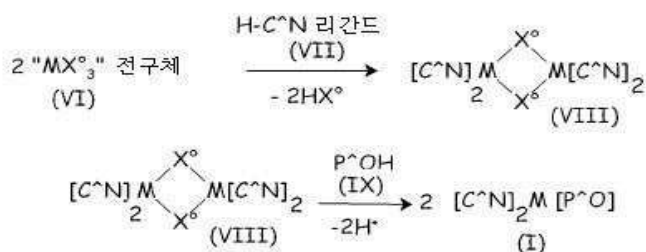
(V)의 중성 착물은 고색순도를 갖는 청색 영역에서의 그의 방출성 때문에 본 발명의 목적을 위해 특히 유리하다.

[0075] 전술한 바와 같이, 가장 우수한 결과는 디메틸아미노 치환기가 페닐-피리딘 리간드의 질소에 대해 파라 위치에 존재하고 있는 착물(III)로 얻었다.

[0076] 두자리 P[^]O 리간드의 디페닐포스포노 부분은 Ir HOMO 오비탈을 안정화시키는 최적의 Π -산으로서 유리하게 작용하는 반면에, P[^]O 리간드의 카복실레이트기는 금속 상의 양전하를 유리하게 중화하여 중성 착물을 만든다. 따라서, P[^]O 리간드는, 백금족 금속들에 대한 배위결합에 있어서 전자밀도가 좋은 균형을 유지하는데 유리한 것으로 밝혀졌다.

[0077] 화학식(I)의 착물(즉, 2개의 오르토금속화된 리간드(C[^]N 리간드) 및 두자리 포스포노아세테이트 리간드(P[^]O))를 포함하는 금속 착물의 합성은 임의의 공지된 방법으로 달성할 수 있다. 화학식(I)의 착물 제조에 적합한 합성 방법들에 대한 세부사항들은 하기의 문헌들: "Inorg. Chem.," No.30, pg.1685(1991); "Inorg. Chem.," No.27, pg.3464(1988); "Inorg. Chem.," No. 33, pg.545(1994); "Inorg. Chem. Acta," No.181, pg.245(1991); "J.Organomet. Chem.," No.35, pg.293(1987); 및 "J.Am. Chem. Soc.," No.107, pg.1431(1985)에 개시되어 있다.

[0078] 일반적으로, 본 발명의 제 1 구현예에 따르면, 화학식(I)에 따른 착물류는 하기의 반응식:



[0079]

[0080] 에 따라 제조할 수 있다.

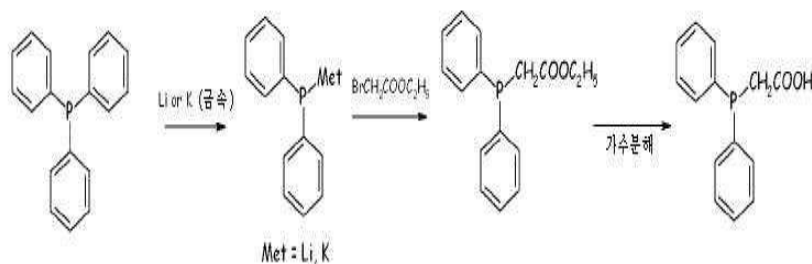
[0081] 오르토금속화된 리간드(H-C[^]N) 및 보조 리간드(P[^]O-H)의 산 형태는 상업적으로 이용가능하거나, 잘 공지된 유기 합성반응 경로를 이용하여 쉽게 합성될 수 있다.

[0082] 특히, LOHSE, Olivier, *et al.*의 2- 및 4-클로로피리딘의 팔라듐 촉매화된 스즈키 커플링. *Syn. Lett.*, 1999, no. 1, p.15-18 및 US 6670645 (DU PONT DE NEMOURS) 30/12/2003에 기재된 바와 같이, 치환된 피리딘 화합물을 상응하는 아릴보론산과 스즈키 커플링을 함으로써 오르토금속화된 리간드(H-C[^]N)를 양호 내지는 우수한 수율로 제조할 수 있다.

[0083] 불소화된 오르토금속화된 리간드(H-C[^]N)의 제조에 특히 적용되는 합성방법들이 JP 2003113164 A(MITSUBISHI MATERIALS CORP) 18/04/2003 및 JP 2003113163 A(MITSUBISHI MATERIALS CORP) 18/04/2003에 개시되어 있다.

[0084] 전이 금속이 이리듐이라면, IrCl₃ · H₂O와 같은 트리할로젠화된 이리듐(III) 화합물류, M[°]₃IrX[°]₆(식 중에서, X[°]는 할로젠(바람직하게는 Cl)이고, M[°]는 알칼리 금속(바람직하게는 K))와 같은 헥사할로젠화 이리듐(III) 화합물, M[°]₂IrX[°]₆(식 중에서, X[°]는 할로젠(바람직하게는 Cl)이고, M[°]는 알칼리 금속(바람직하게는 K))와 같은 헥사할로젠화된 이리듐(IV) 화합물(Ir 할로젠화 전구체)이 상기 화학식(I)의 착물을 합성하기 위한 출발물질로서 사용될 수 있다.

[0085] 게다가, 디페닐포스포노 아세트산 같은 포스포노아세테이트 리간드(P[^]O-H)는 문헌 [K. Issleib and G. Thomas, *Ber.*, 93, 803, 1960; T. Jarolim and J. Podlahova, *J. Inorg. Nucl. Chem.*, 38, 125, 1976]에 기재되어 있고 하기의 식에 보여지듯이 세 단계에 걸쳐 합성될 수 있다:



[0086]

[0087] X° 가 할로젠(바람직하게는 Cl)인 $[C^{\circ}N]_2Ir(\mu-X^{\circ})_2Ir[C^{\circ}N]_2$ 착물류(화학식 VIII, 식 중에서 $M=Ir$)(예컨대, [(2-(2,4-디플루오로페닐)-4-디메틸아미노피리딘) $_2IrCl$] $_2$, [(2-(2,4-디플루오로페닐)피리딘) $_2IrCl$] $_2$, [(2-페닐피리딘) $_2IrCl$] $_2$ 및 [(2-(2,4-디플루오로페닐)-5-디메틸아미노피리딘) $_2IrCl$] $_2$)는 문헌상의 절차를 적용하여 상기 Ir 할로겐화된 전구체와 적절한 오르토금속화된 리간드로부터 제조할 수 있다([King, K.A.; Watts, R.J. *J. Am. Chem. Soc.* **1987**, *109*, 1589-1590]).

[0088] 반응은 오르토금속화된 리간드($H-C^{\circ}N$)의 중성 형태를 초과량 사용하여 유리하게 수행한다. 고비등점 용매류가 바람직하다.

[0089] 본 발명의 목적상, 고비등점 용매란 용어는 비등점이 80 °C 이상, 바람직하게는 85 °C 이상, 더욱 바람직하게는 90 °C 이상인 용매를 가리키고자 한다. 예를 들어, 적합한 용매류로는 메톡시에탄올, 에톡시에탄올, 글리세롤, 디메틸포름아미드(DMF), N-메틸피롤리돈(NMP), 디메틸설폭시드(DMSO) 등이 있다. 상기 용매류는 그대로 또는 물과 혼합하여 사용될 수 있다.

[0090] 임의로, 금속 탄산염(특히, 탄산칼륨(K_2CO_3)), 금속 수소화물(특히, 수소화나트륨(NaH)), 금속 에톡사이드 또는 금속 메톡사이드(특히, $NaOCH_3$, $NaOC_2H_5$), 알킬암모늄 수산화물(특히, 테트라메틸암모늄 하이드록사이드) 또는 이미다졸리움 수산화물 같은 적합한 브린스테드 염기의 존재 하에, 반응이 수행될 수 있다.

[0091] 전술한 바와 같이, 상응하는 $[C^{\circ}N]_2Ir[P^{\circ}O]$ (화학식 I, 식 중에서 $Me = Ir$)를 형성하기 위해, 바람직하게는 적합한 용매 내에서 화학양론적 양의 리간드 $P^{\circ}O-H$ 를 브릿지된 중간체(VIII)와 대강 접촉시킴으로써, 적합한 리간드($P^{\circ}O-H$)로의 친핵성 치환이 금속 원자에서 수행되도록 한다.

[0092] 이러한 반응용으로는 극성의 비양성자성 용매류가 일반적으로 바람직하다. 메틸렌 디클로라이드(CH_2Cl_2)가 특히 양호한 결과를 주는 용매이다.

[0093] 본 발명은 또한 유기발광소자(OLED)의 발광층(emitting layer)에 있어서 전술한 발광 물질의 용도에 관한 것이다.

[0094] 더욱이, 본 발명은 유기발광소자에서 발광층으로 기능하도록 하는 호스트층에서 도펀트로서의 전술한 발광 물질의 용도에 관한 것이다.

[0095] 발광 물질이 호스트층에서 도펀트로서 사용되는 경우, 호스트 및 도펀트 총중량에 대해 일반적으로는 1 중량% 이상, 바람직하게는 3 중량% 이상, 더욱 바람직하게는 5 중량% 이상의 양으로 사용되며, 일반적으로는 25 중량% 이하, 바람직하게는 20 중량% 이하, 더욱 바람직하게는 15 중량% 이하의 양으로 사용된다.

[0096] 본 발명은 또한 발광층(EML)을 포함하는 유기발광소자(OLED)에 관한 것이다. 상기 발광층은 전술된 발광 물질, 임의적으로는 호스트 물질을 포함한다(이 경우 발광 물질은 도펀트로 존재하는 것이 바람직함). 소자 구조에 전압이 인가될 때 상기 호스트 물질은 특히 발광에 응용된다.

[0097] 일반적으로 OLED는:

[0098] 유리 기판;

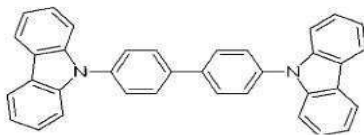
[0099] 음극, 일반적으로 투명한 음극, 예컨대 산화인듐주석(ITO) 음극 ;

[0100] 정공전달층(HTL);

- [0101] 발광층(EML);
- [0102] 전자전달층(ETL); 및
- [0103] 양극, 일반적으로 금속 양극, 예컨대 Al층
- [0104] 을 포함한다.

[0105] 정공 전도성 발광층을 위해, 여기자 차폐층, 그 중에서도 발광층과 전자전달층 사이에 정공 차폐층(HBL)을 가질 수 있다. 전자 전도성 발광층을 위해, 여기자 차폐층, 그 중에서도 발광층과 정공전달층 사이에 전자 차폐층(EBL)을 가질 수 있다. 발광층은 정공전달층(이 경우, 여기자 차폐층은 음극에 인접하여 있거나 음극에 있음) 또는 전자전달층(이 경우, 여기자 차폐층은 양극에 인접하여 있거나 양극에 있음)과 동일할 수 있다.

[0106] 발광층은 전술된 발광 물질이 게스트로서 잔류하고 있는 호스트 물질을 이용하여 형성될 수 있거나, 본질적으로는 발광 물질로 구성될 수 있다. 전자의 경우, 호스트 물질은 치환된 트리-아릴 아민류로 이루어진 군에서 선택된 정공-전달 물질일 수 있다. 바람직하게, 발광층은 발광 물질이 게스트로서 잔류하고 있는 호스트 물질을 이용하여 형성된다. 호스트 물질은 금속 퀴놀레이트(예컨대, 알루미늄 퀴놀레이트(Alq_3), 리튬 퀴놀레이트(Liq), 옥사디아졸류 및 트리아졸류로 이루어진 군에서 선택된 전자-전달 물질일 수 있다. 이러한 호스트 물질의 예는 하기의 화학식을 갖는 4,4'-N,N'-디카르바졸-바이페닐["CBP"]이다:

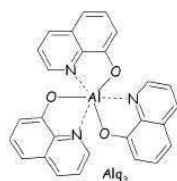


[0107]

[0108] CBP

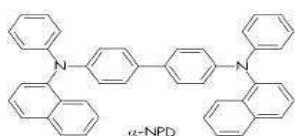
[0109] 임의로, 발광층은 또한 상기 호스트 물질 내에 도펀트로서 존재하며 쌍극자 모멘트를 갖는 극성화 분자를 함유할 수 있으며, 이는 도펀트로서 사용된 상기 발광 물질이 발광할 때, 방출된 빛의 파장에 일반적으로 영향을 미친다.

[0110] 전자전달 물질로 형성된 층은 전자를 발광 물질 및 (임의로) 호스트 물질이 포함된 발광층으로 전달하는데 유리하게 사용된다. 전자전달 물질은 금속 퀴놀레이트(예컨대, Alq_3 , Liq), 옥사디아졸 및 트리아졸로 이루어진 군에서 선택된 전자-전달 물질일 수 있다. 전자전달 물질의 예는 하기 화학식 [" Alq_3 "]의 트리-(8-하이드록시퀴놀린)알루미늄이다:



[0111]

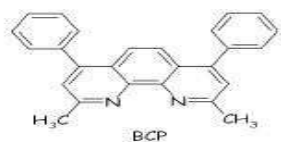
[0112] 정공전달 물질로 형성된 층은 정공들을 전술된 발광 물질 및 (임의의) 호스트 물질이 포함된 발광층으로 전달하는데 유리하게 사용된다. 정공전달 물질의 예로는 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐[" α -NPD"]이다:



[0113]

[0114] 여기자를 발광층("발광 영역") 내로 가두기 위한 여기자 차폐층("차단층")의 사용은 매우 바람직하다. 정공전달 호스트를 위해, 차폐층이 발광층과 전자전달층 사이에 위치할 수 있다. 이러한 차단층용으로 사용되는 물질의 예는 하기의 화학식을 가지는 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트론(바토큐프로인 또는 "BCP"라고도 불림)이

다:



[0115]

[0116]

바람직하게 OLED는, 도 1에 도시된 바와 같이, 다층구조를 가지고 있으며, 도면에서 (1)은 유리기판; (2)는 ITO 층; (3)은 α -NPD를 포함하는 HTL층; (4)는 CBP를 호스트 물질로 포함하고 발광 물질을 도펀트로 포함하되, 도펀트의 양은 호스트 및 도펀트 총 중량에 대해 약 8 중량%로 포함되어 있는 EML; (5)는 BCP를 포함하는 HBL; (6)은 Alq₃을 포함하는 ETL; (7)은 Al층 양극이다.

실시예

[0121]

2-요오도-4-디메틸아미노피리딘의 합성

[0122]

BF₃·Et₂O(8.4 g, 59 mmol)를 0 °C에서 건조한 THF(250 ml) 중 4-디메틸아미노피리딘(6 g, 49 mmol) 용액에 적가하였다. 생성된 혼합물을 0 °C에서 질소하에 1 시간 동안 교반하였다. 온도를 -78 °C로 냉각시키고, BuLi(헥산 중의 1.6 M, 46 ml, 74 mmol)을 적가하였다. 생성된 혼합물을 -78 °C에서 1시간 동안 교반하고, 여기에 건조한 THF(50 ml) 중의 I₂(18.7 g, 74 mmol) 용액을 적가하였다. 이렇게 얻은 혼합물을 -78 °C에서 2시간 동안 교반하고, 실온으로 가온하였다(2시간). THF를 증발시키고, 포화 Na₂S₂O₅ 용액을 첨가하였다. 생성된 슬러리를 EtOAc(5 x 150 ml)로 추출하였다. 전체 유기 분획들을 포화상태의 Na₂S₂O₅ (50 ml), 염수 (50 ml)로 연속적으로 세척하고, MgSO₄ 상에서 건조한 후, 여과하고, 건조한 상태가 될 때까지 증발시켰다. 생성된 잔류물을 컬럼 크로마토그래피(SiO₂, EtOAc/석유 에테르, 1/1)로 정제하여 표제 화합물 7 g(수율: 57%)을 정치시 고형화되는 무색 오일로서 수득하였다.

[0123]

¹H 및 ¹³C NMR은 문헌에 보고된 사항들과 일치하였다(Cuperly, D.; Gros, P.; Fort, Y. *J. Org. Chem.* **2002**, *67*, 238-241).

[0124]

2-(2,4-디플루오로페닐)-4-디메틸아미노피리딘의 합성

[0125]

톨루엔(60 ml) 및 물(10 ml) 중의 2-요오도-4-디메틸아미노피리딘(3 g, 12 mmol), 2,4-디플루오로페닐보론산(2.3 g, 14.5 mmol) 및 K₂CO₃(6 g, 43.5 mmol)의 혼합물을 15분 동안 질소로 탈기시켰다. Pd(PPh₃)₄(800 mg, 0.66 mmol)를 첨가하여 생성된 혼합물을 48시간 동안 질소하에 90 °C로 가열하였다. 이를 실온으로 냉각시킨 후, 수상을 분리하고, EtOAc(3 x 100 ml)로 추출하였다. 전체 유기 분획들을 염수로 세척하고, MgSO₄ 상에서 건조한 다음, 여과하고 증발시켰다. 화합물을 더 정제하기 위해, 이렇게 얻은 오일을 Et₂O 중에 용해시키고, 10% HCl 용액(3 x 50 ml)으로 추출하였다. 전체 수성 분획들을 Et₂O(2 x 100 ml)로 세척하고, 농축 NaOH 수용액으로 중화시켰다. 생성된 혼합물을 EtOAc(4 x 100 ml)로 추출하고, 전체 유기 분획들을 염수 (50 ml)로 세척한 후, MgSO₄ 상에서 건조하고, 여과한 후, 건조상태가 될 때까지 증발시켰다. 조 화합물을 컬럼 크로마토그래피(SiO₂, CHCl₃, 다음으로는 CHCl₃/MeOH, 97/3)로 정제하여 표제 화합물 2.2 g(수율: 78%)을 정치시 고형화되는 옅은 황색의 오일로서 수득하였다.

[0126]

¹H-NMR(CDCl₃, 298K, 200 MHz, δ ppm) 3.05(s, 6H), 6.49(dd, *J* = 2.5 및 6 Hz, 1H), 6.92(m, 3H), 7.94(m, 1H), 8.33(d, *J* = 6 Hz, 1H).

[0127]

[(2-(2,4-디플루오로페닐)4-디메틸아미노피리딘)₂IrCl]₂의 합성

[0128]

2.5 당량의 2-(2,4-디플루오로페닐)4-디메틸아미노피리딘 및 1 당량의 IrCl₃·3H₂O를 2-에톡시에탄올 및 물(3/1, v/v)의 혼합물에 15시간 동안 질소하에 110 °C에서 가열하였다. 실온으로 냉각한 후, 생성된 침전물을 여

과하고, 메탄올, 다음으로는 Et₂O로 연속적으로 세척하고, 건조하여 원하는 이량체를 수득하였다. 이 화합물의 낮은 용해도 때문에, ¹H-NMR은 그의 [C^N]₂Ir(Cl)(DMSO) 유도체로서 DMSO-d⁶에서 기록되었다.

[0129] ¹H-NMR(DMSO-d⁶, 298K, 200 MHz, δ ppm) 3.16(s, 6H), 3.19(s, 6H), 5.35(dd, J = 2 및 8.7 Hz, 1H), 5.83(dd, J = 2 및 8.7 Hz, 1H), 6.70-7.00(m, 4H), 7.37(m, 2H), 8.86(d, J = 7 Hz, 1H), 9.21(d, J = 7 Hz, 1H).

[0130] [(2-(2,4-디플루오로페닐)피리딘)₂IrCl]₂, [(2-페닐피리딘)₂IrCl]₂, 및 [(2-(2,4-디플루오로페닐)-5-디메틸아미노피리딘)₂IrCl]₂은 전술한 바와 같은 유사한 방법으로 제조하였다.

[0131] [(2(2,4-디플루오로페닐)-4-디메틸아미노피리딘)₂Ir(디페닐포스포노아세테이트)]**[착물(III)]**의 합성

[0132] [(2(2,4-디플루오로페닐)-4-디메틸아미노피리딘)₂IrCl]₂(91 mg, 0.065 mmol), 디페닐포스포노아세트산(41 mg, 0.168 mmol) 및 테트라부틸암모늄하이드록사이드 30 하이드레이트(135 mg, 0.168 mmol)를 CH₂Cl₂(100 ml) 중에서 6시간 동안 아르곤 하에 환류시켰다. 일부 용해되지 않은 흑색 침전물을 여과하고, 용매인 CH₂Cl₂를 증발시켰다. 생성된 황색 지성(oily) 물질을 3 mL의 C₂H₅OH에 용해시키고 디에틸에테르의 서방성 확산으로 결정화시켰다. 미황색 침전물을 여과하고, Et₂O로 세척한 후, 대기 중에 건조시켜 표제 착물 45 mg(수율: 50%)을 수득하였다.

[0133] 도 2는 380 nm에서의 여기에 의해 298 K에서 디클로로메탄 중의 착물(III)용액으로부터 등록된 방출 스펙트럼을 도시하고 있다. 가로는 파장(nm)을 나타내고, 세로는 방출 세기(cps)를 나타낸다.

[0134] [(2(2,4-디플루오로페닐)피리딘)₂Ir(디페닐포스포노아세테이트)]**[착물(IV)]**의 합성

[0135] [(2(2,4-디플루오로페닐)-피리딘)₂IrCl]₂(63 mg, 0.051 mmol), 디페닐포스포노아세트산(32 mg, 0.131 mmol) 및 테트라부틸암모늄하이드록사이드 30 하이드레이트(105 mg, 0.131 mmol)를 CH₂Cl₂(100 ml) 중에서 6시간 동안 아르곤 하에 환류시켰다. 용매를 증발시킨 후, 생성된 황색 고체를 3 mL의 C₂H₅OH에 용해시켰다. 이렇게 얻은 용액을 24시간 동안 실온에 방치하여 양호한 결정성 고체를 만들었다. 미황색 결정체를 여과하고, Et₂O로 세척한 후, 대기 중에 건조시켜 표제 착물 40 mg(수율: 82%)을 수득하였다.

[0136] 도 3은 400 nm에서의 여기에 의해 298 K에서 디클로로메탄 중의 착물(IV)용액으로부터 등록된 방출 스펙트럼을 도시하고 있다. 가로는 파장(nm)을 나타내고, 세로는 방출 세기(cps)를 나타낸다.

[0137] [(2-페닐피리딘)₂Ir(디페닐포스포노아세테이트)]**[착물(V)]**의 합성

[0138] [(2(페닐)피리딘)₂IrCl]₂(56 mg, 0.052 mmol), 디페닐포스포노아세트산(30 mg, 0.123 mmol) 및 테트라부틸암모늄하이드록사이드 30 하이드레이트(100 mg, 0.125 mmol)를 CH₂Cl₂(60 ml) 중에서 5시간 동안 아르곤 하에 환류시켰다. 용매를 증발시킨 후, 생성된 황색 고체를 3 mL의 CH₃OH에 용해시켰다. 이렇게 얻은 용액을 24시간 동안 실온에 방치하여 양호한 결정성 고체를 만들었다. 미황색 결정체를 여과하고, Et₂O로 세척한 후, 대기 중에 건조시켜 표제 착물 27 mg(수율: 77%)을 수득하였다.

[0139] 도 4는 380 nm에서의 여기에 의해 298 K에서 디클로로메탄 중의 착물(V)용액으로부터 등록된 방출 스펙트럼을 도시하고 있다. 가로는 파장(nm)을 나타내고, 세로는 방출 세기(cps)를 나타낸다.

[0140] 이리듐 중성 착물들(III), (IV) 및 (V)의 방출 특성들을 표 1에 정리하였다.

[0141] 표 1. 디클로로메탄 중에서 측정된 이리듐 중성 착물들(III), (IV) 및 (V)의 방출 특성들

[0142] 표 1

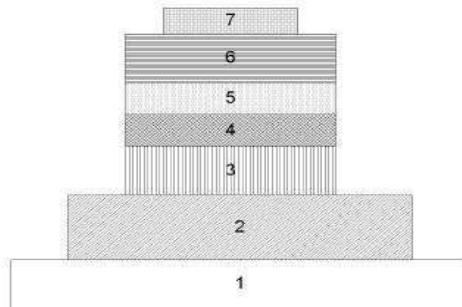
착물	방출(λ _{max})
(III)	451,478
(IV)	461,490
(V)	485,510

도면의 간단한 설명

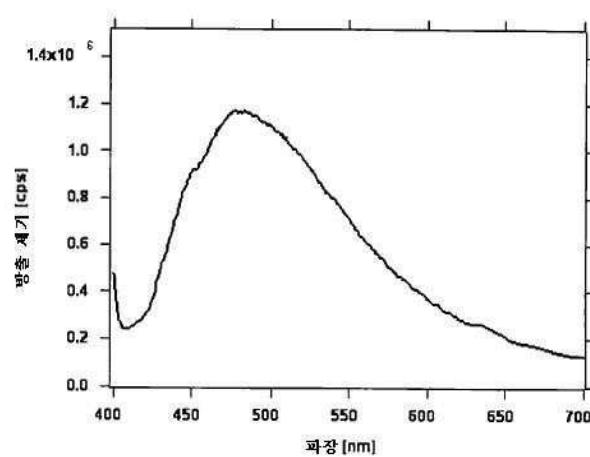
- [0117] 도 1은 OLED의 다층구조를 보여주는 도면.
- [0118] 도 2는 380 nm에서의 여기에 의해 298 K에서 디클로로메탄 중의 착물(III) 용액으로부터 등록된 방출 스펙트럼을 보여주는 도면.
- [0119] 도 3은 400 nm에서의 여기에 의해 298 K에서 디클로로메탄 중의 착물(IV) 용액으로부터 등록된 방출 스펙트럼을 보여주는 도면
- [0120] 도 4는 380 nm에서의 여기에 의해 298 K에서 디클로로메탄 중의 착물(V) 용액으로부터 등록된 방출 스펙트럼을 보여주는 도면.

도면

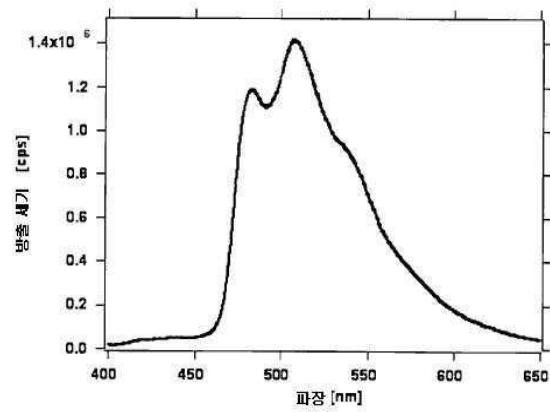
도면1



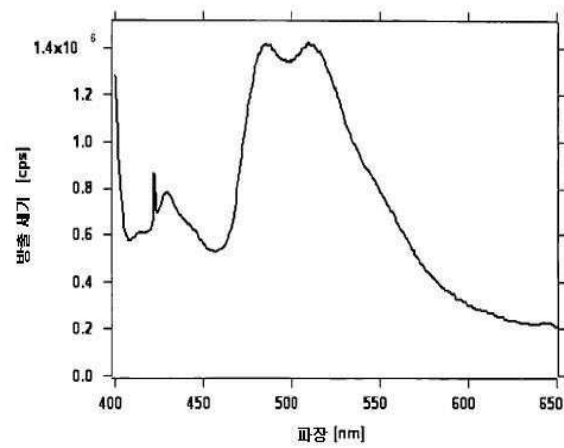
도면2



도면3



도면4



专利名称(译)	发光材料		
公开(公告)号	KR1020100017861A	公开(公告)日	2010-02-16
申请号	KR1020097026431	申请日	2008-06-05
[标]申请(专利权)人(译)	索尔维公司		
申请(专利权)人(译)	苏威 (兴业牛群阿尔诺的)		
[标]发明人	NAZEERUDDIN MOHAMMAD KHAJA 나제루딘모하매드카자 EVANS NICHOLAS 에반스니콜라스 GRAETZEL MICHAEL 그래첼미카엘		
发明人	나제루딘모하매드카자 에반스니콜라스 그래첼미카엘		
IPC分类号	C09K11/06 C07F15/00 H01L51/50 H05B33/14		
CPC分类号	H01L51/0085 C07F15/0033 H01L51/5012 H01L51/0087 C07F15/0006 H01L27/32 C09K2211/185		
优先权	2007109875 2007-06-08 EP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及包含新的邻 - 金属化的过渡金属配合物 $C_1N_2O_2O_2$ 的发光材料，其包含两个邻位金属化的螯合物 C_1N 配体和二齿膦基羧酸酯类的辅助配体。令人惊讶地发现，当金属与其结合的二甲基化螯合物 C^AN 配体和二齿膦基羧酸酯型 (P^AO) 的辅助配体时，所述配体有利地参与发射过程，使蓝色发射效率显著提高。配合物 $C^AN_2MP^AO$ 。本发明的目的仍然是所述发光材料和包含所述发光材料的有机发光器件的用途。

COPYRIGHT KIPO 0026 # WIPO 2010

