



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2008년06월05일  
(11) 등록번호 10-0835128  
(24) 등록일자 2008년05월29일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2001-7011613

(22) 출원일자 2001년09월12일

심사청구일자 2005년03월11일

번역문제출일자 2001년09월12일

(65) 공개번호 10-2001-0110661

(43) 공개일자 2001년12월13일

(86) 국제출원번호 PCT/GB2000/000911

국제출원일자 2000년03월13일

(87) 국제공개번호 WO 2000/55927

국제공개일자 2000년09월21일

(30) 우선권주장

PCT/GB99/00741 1999년03월12일 영국(GB)

(56) 선행기술조사문헌

W096/20253A1\*

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

스미또모 가가꾸 가부시키가이샤

일본국 도쿄토 주오꾸 신카와 2쵸메 27반 1고

(72) 발명자

타운스칼로버트

영국에섹스썸248에이치비스텐스테드마운트피컷  
크라운코티지실버스트리트193

오'델리차드

영국하츠에스지51유엘히친비어톤그린53

오'커너스티븐존마틴

영국캠브리지씨비17티에프글리브로드21

(74) 대리인

이범래

전체 청구항 수 : 총 62 항

심사관 : 손창호

(54) 유기 중합체 및 이를 포함하는 광학 장치 및 전기발광 장치

(57) 요약

본 발명은, 중합체 골격의 주쇄를 따라 복수 영역을 갖고,

제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 운송하는 제1 영역, 제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 운송하는 제2 영역 및 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제3 밴드갭을 갖고, 양전하 담체와 음전하 담체를 수용하여 결합시킴으로써 발광시키는 제3 영역 중의 2개 이상의 영역을 포함하며,

각 영역이 하나 이상의 단량체를 포함하고,

유기 중합체 중의 단량체의 배열과 양이, 제1 밴드갭, 제2 밴드갭 및 제3 밴드갭이 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택되는 유기 중합체에 관한 것이다.

(81) 지정국

국내특허 : 알바니아, 아르메니아, 오스트리아, 오스트레일리아, 아제르바이잔, 보스니아 헤르체고비나, 바베이도스, 불가리아, 브라질, 벨라루스, 캐나다, 스위스, 리히텐슈타인, 중국, 쿠바, 체코, 독일, 덴마크, 에스토니아, 스페인, 핀란드, 영국, 그루지야, 헝가리, 이스라엘, 아이슬랜드, 일본, 케냐, 키르기즈스탄, 북한, 대한민국, 카자흐스탄, 세인트루시아, 스리랑카, 리베이라, 레소토, 리투아니아, 룩셈부르크, 라트비아, 몰도바, 마다가스카르, 마케도니아공화국, 몽고, 말라위, 멕시코, 노르웨이, 뉴질랜드, 슬로베니아, 슬로바키아, 타지키스탄, 투르크멘, 터키, 트리니다드토바고, 우크라이나, 우간다, 미국, 우즈베키스탄, 베트남, 폴란드, 포르투갈, 루마니아, 러시아, 수단, 스웨덴, 싱가포르, 아랍에미리트, 안티구와바부다, 코스타리카, 도미니카, 모로코, 남아프리카, 모잠비크, 그라나다, 세르비아 앤 몬테네그로, 가나, 감비아, 크로아티아, 인도네시아, 인도, 시에라리온, 짐바브웨

AP ARIPO특허 : 케냐, 레소토, 말라위, 수단, 스와질랜드, 우간다, 시에라리온, 가나, 감비아, 짐바브웨

EA 유라시아특허 : 아르메니아, 아제르바이잔, 벨라루스, 키르기즈스탄, 카자흐스탄, 몰도바, 러시아, 타지키스탄, 투르크멘

EP 유럽특허 : 오스트리아, 벨기에, 스위스, 리히텐슈타인, 독일, 덴마크, 스페인, 프랑스, 영국, 그리스, 아일랜드, 이탈리아, 룩셈부르크, 모나코, 네덜란드, 포르투갈, 스웨덴, 핀란드, 사이프러스

OA OAPI특허 : 부르키나파소, 베닌, 중앙아프리카, 콩고, 코트디부아르, 카메룬, 가봉, 기니, 말리, 모리타니, 니제르, 세네갈, 차드, 토고, 기니 비사우

## 특허청구의 범위

### 청구항 1

중합체 골격 주쇄를 따라 복수 영역을 갖고,

제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 운송하는 제1 영역(i),

제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 운송하는 제2 영역(ii) 및

제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제3 밴드갭을 갖고, 양전하 담체와 음전하 담체를 수용하여 결합시킴으로써 발광시키는 제3 영역(iii) 중의 2개 이상의 영역을 포함하는 유기 중합체로서,

각 영역이 하나 이상의 단량체를 포함하고,

유기 중합체 중의 단량체의 배열과 양이, 제1 밴드갭, 제2 밴드갭 및 제3 밴드갭이 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택되며,

중합체에 가교 결합성 작용기가 없는 유기 중합체.

### 청구항 2

제1항에 있어서, 제1 영역이 치환되거나 치환되지 않은 방향족기 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제1 단량체를 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 3

제2항에 있어서, 제1 단량체가 치환되거나 치환되지 않은 플루오렌기를 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 4

제3항에 있어서, 제1 단량체가 2,7-결합된 디알킬 플루오렌기를 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 5

제4항에 있어서, 2,7-결합된 디알킬 플루오렌기가 9,9-디옥틸 플루오렌기인 유기 중합체.

### 청구항 6

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서, 제2 영역이 치환되거나 치환되지 않은 방향족기 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제2 단량체를 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 7

제6항에 있어서, 제2 단량체가 화학식  $\text{†}(\text{Ar})_3\text{N} \text{†}$  의 트리아릴아민 단위(여기서, 각각의 Ar은 동일하거나 상이하고, 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함한다)를 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 8

제7항에 있어서, 하나 이상의 Ar이 치환되거나 치환되지 않은 페닐기인 유기 중합체.

### 청구항 9

제7항에 있어서, 하나 이상의 Ar이, 중합체 골격으로부터 분지된, 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족 측쇄를 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 10

제9항에 있어서, 측쇄가 치환되거나 치환되지 않은 아릴기인 유기 중합체.

### 청구항 11

제10항에 있어서, 측쇄가 치환되거나 치환되지 않은 페닐기 또는 일치환되거나 3,5-이치환된 페닐기인 유기 중

합체.

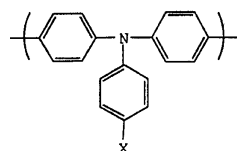
## 청구항 12

제9항에 있어서, 측쇄가 치환되거나 치환되지 않은 알킬, 퍼플루오로알킬, 알킬아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 아릴, 알콕시, 티오알킬 또는 시아노기를 포함하는 치환기를 갖는 유기 중합체.

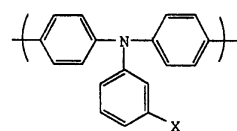
## 청구항 13

제7항에 있어서, 트리아릴아민 단위가 다음 화학식 I 내지 화학식 VI 중의 어느 하나의 기를 포함하는 유기 중합체:

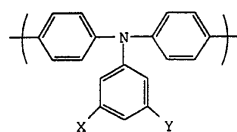
화학식 I



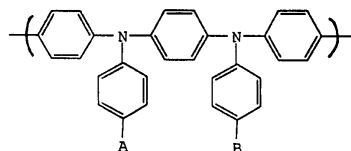
화학식 II



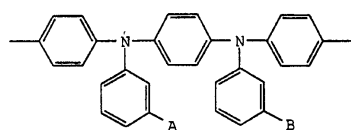
화학식 III



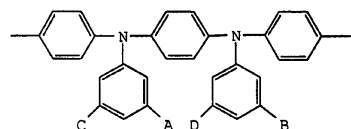
화학식 IV



화학식 V



화학식 VI



위의 화학식 I 내지 화학식 VI에서,

X 및 Y는 동일하거나 상이한 치환기이고,

A, B, C 및 D는 동일하거나 상이한 치환기이다.

## 청구항 14

삭제

#### 청구항 15

제13항에 있어서, X, Y, A, B, C 및 D 중의 하나 이상이 독립적으로 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 및 아릴알킬기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 유기 중합체.

#### 청구항 16

제15항에 있어서, X, Y, A, B, C 및 D 중의 하나 이상이 치환되지 않은 이소부틸기, n-알킬, n-알콕시 및 트리플루오로메틸기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 유기 중합체.

#### 청구항 17

제15항에 있어서, X 및 Y 또는 A, B, C 및 D가 동일한 유기 중합체.

#### 청구항 18

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서, 제3 영역이 치환되거나 치환되지 않은 방향족기 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제3 단량체를 포함하는 유기 중합체.

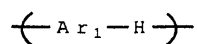
#### 청구항 19

제18항에 있어서, 제3 단량체가 벤젠기 또는 티오펜기에 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 디아진기인 H 기를 포함하는 유기 중합체.

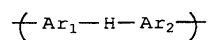
#### 청구항 20

제19항에 있어서, 제3 단량체가 다음 화학식 IX 또는 화학식 X의 기를 포함하는 유기 중합체:

화학식 IX



화학식 X



위의 화학식 IX 및 화학식 X에서,

Ar<sub>1</sub>은 치환되거나 치환되지 않은 방향족기 또는 헤테로방향족기이고,

Ar<sub>2</sub>는 치환되거나 치환되지 않은 방향족기 또는 헤테로방향족기이다.

#### 청구항 21

삭제

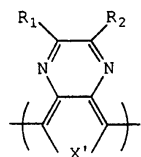
#### 청구항 22

제20항에 있어서, Ar<sub>1</sub> 또는 Ar<sub>2</sub>가 각각 독립적으로, 치환되거나 치환되지 않은, 융합되거나 융합되지 않은 벤젠, 티오펜, 푸란, 퀴놀살린, 바이페닐 또는 플루오렌기를 포함하는 유기 중합체.

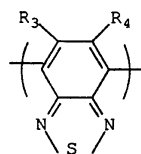
#### 청구항 23

제19항에 있어서, 제3 단량체가 다음 화학식 VIII 또는 화학식 XI의 기를 포함하는 유기 중합체:

화학식 VIII



화학식 XI



위의 화학식 VIII 및 화학식 XI에서,

X'는 RC=CR 또는 S이고,

R은 각각 독립적으로 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 및 아릴알킬로부터 선택되며,

R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 동일하거나 상이한 치환기이고,

R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub>는 동일하거나 상이한 치환기이다.

#### 청구항 24

삭제

#### 청구항 25

제23항에 있어서, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub> 중의 하나 이상이 각각 독립적으로 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴, 아릴알킬, 피리딘 및 푸란기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 유기 중합체.

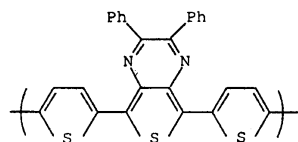
#### 청구항 26

제25항에 있어서, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub> 또는 R<sub>3</sub>과 R<sub>4</sub>가 동일하고 각각 페닐기인 유기 중합체.

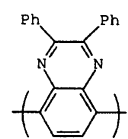
#### 청구항 27

제23항에 있어서, 제3 단량체가 다음 화학식 XIII 내지 화학식 XVII 중의 어느 하나의 기를 포함하는 유기 중합체:

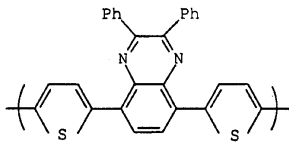
화학식 XIII



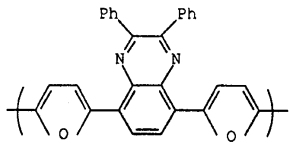
화학식 XIV



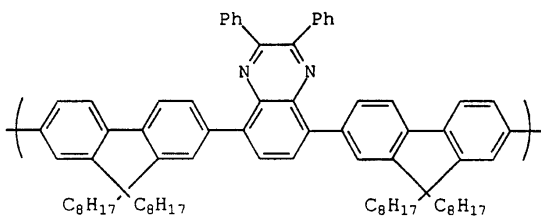
화학식 XV



화학식 XVI



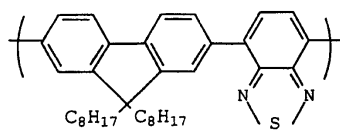
화학식 XVII



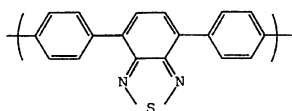
### 청구항 28

제23항에 있어서, 제3 단량체가 다음 화학식 XVIII 내지 화학식 XXVI 중의 어느 하나의 기를 포함하는 유기 중합체:

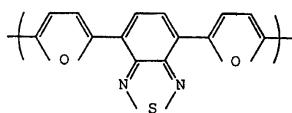
화학식 XVIII



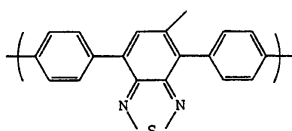
화학식 XIX



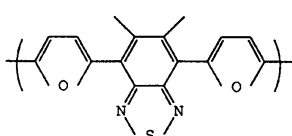
화학식 XX



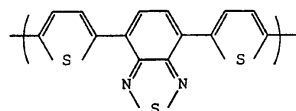
화학식 XXI



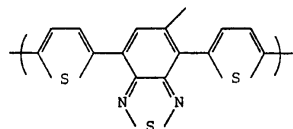
화학식 XXII



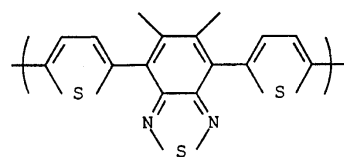
화학식 XXIII



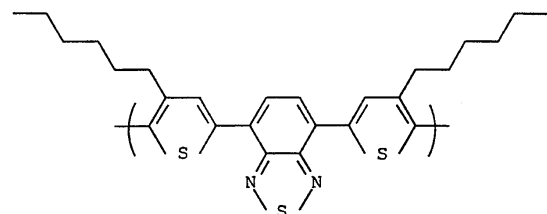
화학식 XXIV



화학식 XXV



화학식 XXVI



#### 청구항 29

제18항에 있어서, 제3 단량체가 트리아릴아민 단위를 포함하는 유기 중합체.

#### 청구항 30

제29항에 있어서, 제3 단량체가 화학식  $\left[(-(\text{Ar})_2\text{N}-)\text{Ar}-(-\text{N}(\text{Ar})_2-)\right]$  의 기(여기서, 각각의 Ar은 동일하거나 상이하고, 치환되거나 치환되지 않은 방향족기 또는 헤테로방향족기를 포함한다)를 포함하는 유기 중합체.

#### 청구항 31

제30항에 있어서, Ar 중의 하나 이상이 치환되거나 치환되지 않은 아릴기인 유기 중합체.

#### 청구항 32

제31항에 있어서, Ar 중의 하나 이상이 치환되지 않은 페닐기인 유기 중합체.

#### 청구항 33

제30항에 있어서, Ar 중의 하나 이상이, 중합체 골격으로부터 분리된, 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족 측쇄를 포함하는 유기 중합체.

#### 청구항 34

제33항에 있어서, 측쇄가 융합되거나 융합되지 않은 벤젠, 티오펜, 푸란, 퀴놀살린, 바이페닐 또는 플루오렌기를 포함하는 유기 중합체.

#### 청구항 35

제34항에 있어서, 측쇄가 일치환된 페닐기를 포함하는 유기 중합체.

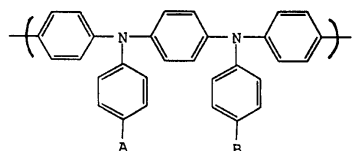
### 청구항 36

제33항에 있어서, 측쇄가 수소, 또는 치환되거나 치환되지 않은 알킬, 퍼플루오로알킬, 알킬아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 아릴, 알콕시, 티오알킬 또는 시아노기를 포함하는 치환기를 갖는 유기 중합체.

### 청구항 37

제35항에 있어서, 트리아릴아민 단위가 다음 화학식 IV의 기를 포함하는 유기 중합체:

화학식 IV



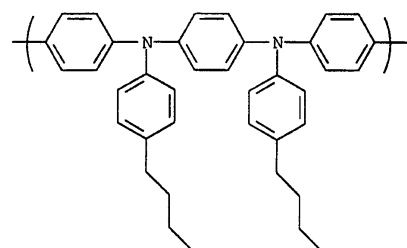
위의 화학식 IV에서,

A 및 B는 동일하거나 상이한 치환기이다.

### 청구항 38

제37항에 있어서, 제3 단량체가 다음 화학식 XXVII의 기를 포함하는 유기 중합체:

화학식 XXVII



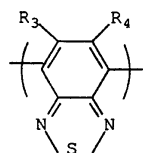
### 청구항 39

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서, 제1 영역이, 치환되거나 치환되지 않은 추가의 방향족기 또는 헤테로방향족기를 함유하는 제4 단량체를 추가로 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 40

제39항에 있어서, 치환되거나 치환되지 않은 방향족기 또는 헤테로방향족기가 화학식 XI의 기(여기서, R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub>는 모두 수소이다)를 포함하는 유기 중합체.

화학식 XI



### 청구항 41

제6항에 있어서, 제2 영역이 제2 단량체와는 상이한 추가의 제2 단량체를 포함하는 제5 단량체를 추가로 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 42

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서,

제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 운송하는 제1 영역(i), 제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 운송하는 제2 영역(ii) 및 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제3 밴드갭을 갖고, 양전하 담체와 음전하 담체를 수용하여 결합시킴으로써 발광시키는 제3 영역(iii)을 포함하고,

각 영역이 하나 이상의 단량체를 포함하고,

유기 중합체 중의 단량체의 배열과 양이, 제1 밴드갭, 제2 밴드갭 및 제3 밴드갭이 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택되는 유기 중합체.

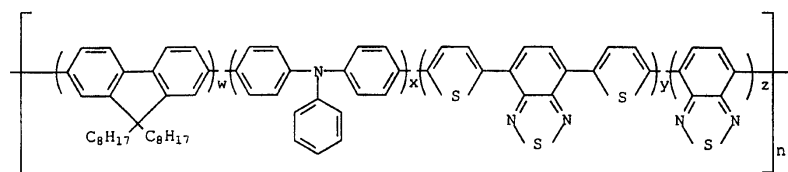
#### 청구항 43

제42항에 있어서, 제3 영역이 600nm 내지 700nm의 파장 범위로 발광시킬 수 있는 유기 중합체.

#### 청구항 44

제42항에 있어서, 다음 화학식 XXVIII로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXVIII



위의 화학식 XXVIII에서,

$w + x + y + z = 1$ 이고,

$w \geq 0.5$ 이고,

$0 \leq x + y + z \leq 0.5$ 이고,

$n \geq z$ 이다.

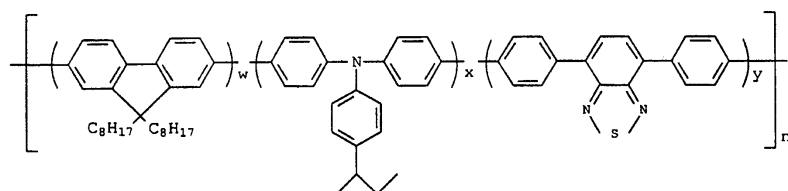
#### 청구항 45

제42항에 있어서, 제3 영역이 500nm 내지 600nm의 파장 범위로 발광시킬 수 있는 유기 중합체.

#### 청구항 46

제42항에 있어서, 다음 화학식 XXIX로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXIX



위의 화학식 XXIX에서,

$w + x + y = 1$ 이고,

$w \geq 0.5$ 이고,

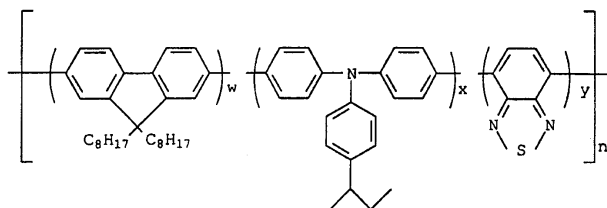
$0 \leq x + y \leq 0.5$ 이고,

$n \geq 2$ 이다.

**청구항 47**

제42항에 있어서, 다음 화학식 XXX로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXX



위의 화학식 XXX에서,

$w + x + y = 1$ 이고,

$w \geq 0.5$ 이고,

$0 \leq x + y \leq 0.5$ 이고,

$n \geq 2$ 이다.

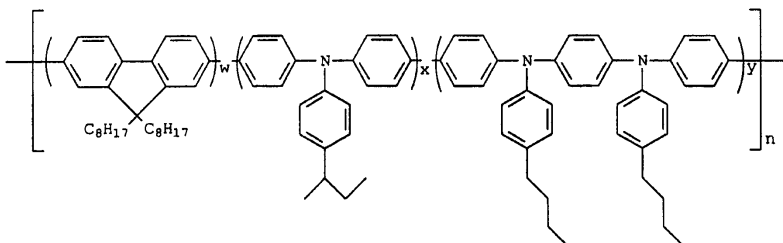
**청구항 48**

제42항에 있어서, 제3 영역이 400nm 내지 500nm의 파장 범위로 발광시킬 수 있는 유기 중합체.

**청구항 49**

제42항에 있어서, 다음 화학식 XXXI로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXXI



위의 화학식 XXXI에서,

$w + x + y = 1$ 이고,

$w \geq 0.5$ 이고,

$0 \leq x + y \leq 0.5$ 이고,

$n \geq 2$ 이다.

**청구항 50**

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서,

제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 운송하는 제1 영역(i) 및

제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 운송하는 제2 영역(ii)을 포함하고,

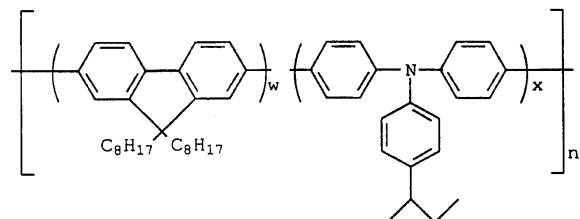
각 영역이 하나 이상의 단량체를 포함하고,

유기 중합체 중의 단량체의 배열과 양이, 제1 밴드갭과 제2 밴드갭이 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택되는 유기 중합체.

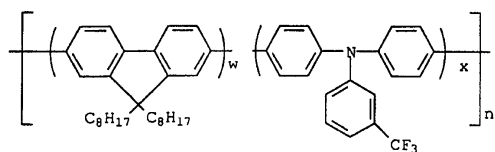
**청구항 51**

제50항에 있어서, 다음 화학식 XXXII 또는 화학식 XXXIII로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXXII



화학식 XXXIII



위의 화학식 XXXII 및 XXXIII에서,

$w + x = 1$ 이고,

$w \geq 0.5$ 이고,

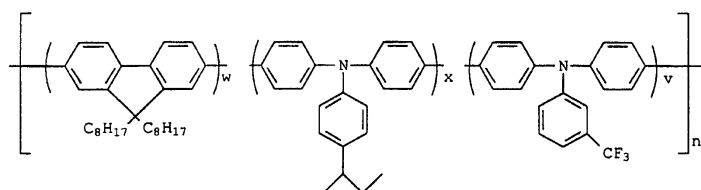
$x \leq 0.5$ 이고,

$n \geq 2$ 이다.

**청구항 52**

제50항에 있어서, 다음 화학식 XXXIV로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXXIV



위의 화학식 XXXIV에서,

$w + x + v = 1$ 이고,

$w \geq 0.5$ 이고,

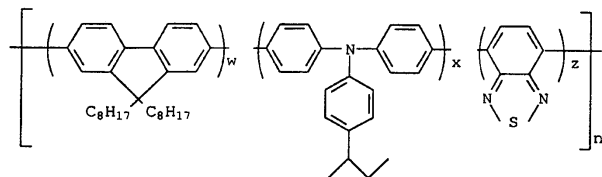
$0 \leq x + v \leq 0.5$ 이고,

$n \geq 2$ 이다.

**청구항 53**

제50항에 있어서, 다음 화학식 XXXV로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXXV



위의 화학식 XXXV에서,

$w + x + z = 1$ 이고,

$w \geq 0.5$ 이고,

$0 \leq x + z \leq 0.5$ 이고,

$n \geq 2$ 이다.

#### 청구항 54

제50항에 있어서, 발광 재료와 배합되어 있는 유기 중합체.

#### 청구항 55

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서,

제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 운송하는 제1 영역(i) 및

제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제3 밴드갭을 갖고, 양전하 담체와 음전하 담체를 수용하여 결합시킴으로써 발광시키는 제3 영역(ii)을 포함하고,

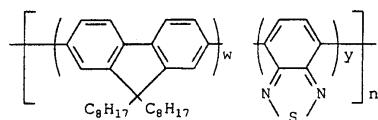
각 영역이 하나 이상의 단량체를 포함하고,

유기 중합체 중의 단량체의 배열과 양이, 제1 밴드갭과 제3 밴드갭이 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택되는 유기 중합체.

#### 청구항 56

제55항에 있어서, 다음 화학식 XXXVI으로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXXVI



위의 화학식 XXXVI에서,

$w + y = 1$ 이고,

$w \geq 0.5$ 이고,

$y \leq 0.5$ 이고,

$n \geq 2$ 이다.

#### 청구항 57

제55항에 있어서, 홀 운송 재료와 배합되어 있는 유기 중합체.

#### 청구항 58

제57항에 있어서, 홀 운송 재료가 폴리트리아릴아민을 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 59

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 있어서,

제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 운송하는 제2 영역(i) 및

제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제3 밴드갭을 갖고, 양전하 담체와 음전하 담체를 수용하여 결합시킴으로써 발광시키는 제3 영역(ii)을 포함하고,

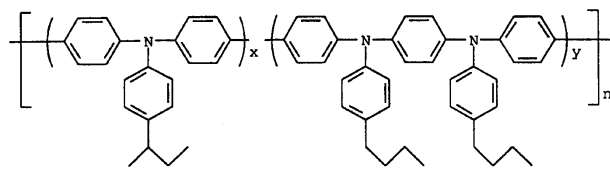
각 영역이 하나 이상의 단량체를 포함하고,

유기 중합체 중의 단량체의 배열과 양이, 제2 밴드갭과 제3 밴드갭이 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택되는 유기 중합체.

### 청구항 60

제59항에 있어서, 다음 화학식 XXXVII로 나타내어지는 유기 중합체:

화학식 XXXVII



위의 화학식 XXXVII에서,

$x + y = 1$ 이고,

$x \geq 0.5$ 이고,

$y \leq 0.5$ 이고,

$n \geq 2$ 이다.

### 청구항 61

제59항에 있어서, 전자 운송 재료와 배합되어 있는 유기 중합체.

### 청구항 62

제61항에 있어서, 전자 운송 재료가 폴리플루오렌을 포함하는 유기 중합체.

### 청구항 63

제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 따르는 유기 중합체를 포함하는 광학 장치.

### 청구항 64

제63항에 있어서, 전기발광 장치를 포함하는 광학 장치.

### 청구항 65

음극층, 양극층, 및 음극층과 양극층 사이에 배치된 제1항 내지 제5항 중의 어느 한 항에 따르는 중합체층을 포함하는 전기발광 장치.

## 명세서

## 기술분야

<1> 본 발명은 유기 중합체 및 광학 장치에서와 같은 이의 용도, 이러한 중합체의 제조방법에 관한 것이다.

## 배경기술

- <2> 발광성 유기 재료를 이용하는 유기 전기발광(electroluminescent) 장치는 잘 알려져 있다. 예를 들면, 국제 공개공보 제W090/13148호는 전극 사이에 위치한 적어도 하나의 공액 중합체를 포함하는 중합체 필름을 함유하는 반도체 층을 포함하는 장치를 개시하고 있다. 이 경우, 중합체 필름은 전자와 홀(holes)이 그 안으로 주입될 때에 발광할 수 있는 폴리(파라-페닐렌 비닐렌) (PPV) 필름을 포함한다. 홀 또는 전자를 발광층에 전달할 수 있는 다른 중합체층들도 이러한 장치내로 도입될 수 있다.
- <3> 유기 반도체에 있어서, 중요한 특성은 전자 에너지 준위의 진공 준위, 특히 "최고 점유 분자 오비탈 (HOMO: highest occupied molecular orbital)"과 "최저 비점유 분자 오비탈 (LUMO: lowest unoccupied molecular orbital)" 준위와 관련하여 측정되는 결합 에너지이다. 이들은 광전자 방출의 측정 및 특히 산화환원에 대한 전기화학 전위의 측정으로부터 평가될 수 있다. 이러한 에너지는 여러가지 변수, 예를 들면, 계면 부근의 국지적인 환경, 측정치가 결정되는 곡선(피크)상의 지점과 같은 것들에 의해 영향을 받는다는 것은 당해 기술분야에 잘 알려져 있다. 따라서, 이러한 값들의 이용은 정량적이라기 보다는 지표가 되는 정도이다.
- <4> 도 1은 빛을 방출시키는 전형적인 장치의 단면도이다. 도 2는 상기 장치에 있어서의 에너지 준위를 나타낸다. 양극(1)은 4.8 전자 볼트의 일 함수를 갖는 투명한 인듐-주석 산화물(ITO: indium-tin oxide) 층이다. 음극(2)은 2.4 전자 볼트의 일 함수를 갖는 LiAl 층이다. 이들 전극 사이에는, 약 2.7 전자 볼트에서 LUMO 에너지 준위(5)를 갖고, 약 5.2 전자 볼트에서 HOMO 에너지 준위(6)을 갖는 PPV의 발광층(3)이 있다. 장치 내로 유입된 홀과 전자는 PPV 층 중에서 방사하는 방식으로 재결합한다. 이 장치의 중요한 특성은 폴리에틸렌 디옥시티오펜(PEDOT)의 홀 운송층(4)이다. 이 중합체는 EP 0686662호에 설명되어 있다. 이것은 약 5.2 전자 볼트 정도의 에너지 준위를 제공하는데, 이것은 ITO로부터 주입된 홀이 PPV에서 HOMO 준위에 도달하는 것을 도와준다.
- <5> 여기서, 에너지 준위, 일 함수 등에 관련된 값들은 절대적이라기 보다는 일반적으로 설명을 위한 것임을 이해하여야 한다. 예를 들면, ITO의 일 함수는 크게 변할 수 있다. 이러한 값이 ITO 분해 공정과 이력에 의존할 수 있음은 잘 알려져 있다.
- <6> 공지의 장치 구조도 역시 음극(2)과 발광층(3) 사이에 위치한 전자 운송층을 가질 수 있다. 이것은 음극으로부터 주입된 전자가 발광층을 구성하는 재료의 LUMO 준위에 도달하는 것을 돕는 에너지 준위를 제공한다. 전자 운송층의 LUMO 에너지 준위는 음극의 LUMO 에너지 준위와 발광층의 에너지 준위 사이에 있거나, 발광층의 LUMO 에너지 준위에 합치하는 것이 적절하다.
- <7> 다층 장치와 연관된 한가지 단점은, 층들을 용액으로부터 증착하는 경우, 한 층이 다음 층의 증착시에 파괴되는 것을 피하기 어렵고, 또한 공극이 발생하거나 증가된 층간 경계에서 재료가 매립되는 문제를 야기할 수 있다는 것이다.
- <8> 문헌[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913-915(1987)]은 유기 박막 전기발광에 관한 것이다. 이 문헌에 개시된 장치는 방향족 디아민의 홀 운송층과 8-하이드록시퀴놀린 알루미늄의 발광층으로 구성되어 있다. ITO가 홀 주입 전극으로 사용되고 있고 마그네슘-은 합금이 전자 주입 전극으로 사용되고 있다.
- <9> 문헌[참조: Nature, 397, 121-128(1999)]에 개시되어 있는 바와 같이, TPD는 홀 운송층으로 사용된다. 그러나, 이 분자 소재는 장치 중 작은 분자층을 이용한다는 문제점을 갖는다. 마찬가지로, 이 문헌은 PBD를 공지의 전자 운송층으로서 기재하고 있다. 이것 역시, 전기발광 장치 중의 중합체층과 비교되는 작은 분자층을 사용하는 것과 관련한 불리한 장치적 특징을 갖는다.
- <10> 일반적으로, 발광 장치에서, 특히 전하 운송 재료로 중합체를 사용하는 것은 매우 흥미로운 일이다. 중합체들은 탁월한 장치 특성을 보여준다. 이러한 장치 특성으로는 효율, 가공성 및 장치의 수명이 우수하다는 점들을 들 수 있다.
- <11> 폴리(아릴아민)은 발광 다이오드에 있어서 유용한 전하 운송층으로서 미국 특허 제5,728,801호에서 기재되어 있다. 이 문헌에는 또한 전하 운송 재료, 특히 양전하 운송 재료로서 트리아릴아민을 사용하는 것이 기재되어 있다. 이는 트리아릴아민이 대응하는 라디칼 양이온으로 쉽게 산화되기 때문이다. 필름 형태에 이러한 중합체들을 사용하는 것의 유용성이 이 문헌에 논의되어 있다.
- <12> 상기 내용에 비추어 볼 때, 발광 장치의 구조를 단순화시키고, 이에 의해 제조공정을 단순화시켜 제조 경비를 절감할 필요성도 여전히 있다.

## 발명의 상세한 설명

- <13> 본 발명은, 양전하 담체를 주입하기 위한 제1 전하 담체 주입층, 음전하 담체를 주입하기 위한 제2 전하 담체 주입층 및, 전하 담체와 주입층 사이에 배치되는, 제1 전하 담체 주입 층으로부터 양전하 담체를 수용하기 위한 제1 성분, 제2 전하 담체 주입층으로부터 음전하 담체를 수용하기 위한 제2 성분, 및 제1 성분과 제2 성분으로부터의 전하 담체들을 수용하여 결합시킴으로써 빛을 방출시키는 제3 유기 발광 성분의 혼합물을 포함하는 발광층을 포함하는 전기발광 장치를 제공한다.
- <14> 발광층의 2개 이상의 성분이 단일 분자의 작용기성 화학 단위(units) 또는 부분(moieties)들로서 제공될 수 있다. 층의 추가 성분이 상기 단일 분자와 물리적으로 혼합된 하나 이상의 추가의 분자에 의해 제공될 수 있다. 단일 분자가 2개 이상의 성분을 제공하면, 이 성분들은 공중합체로서 결합될 수 있다(예를 들면, 주쇄, 측쇄, 블록 또는 랜덤 형태로). 단일 분자가 2개 이상의 성분을 제공하면, 당해 분자에 의해 제공된 성분들은 제3 성분을 포함하는 것이 바람직하다. 적합한 제3 성분과 적어도 하나의 제1 및 제2 성분들이 공중합체로서 제공된다.
- <15> 본 발명의 첫번째 측면에 따라, 중합체 골격 주쇄를 따라 복수 영역을 갖고,
- <16> 제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 가지며, 음전하 담체를 운송하기 위한 제1 영역(i),
- <17> 제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 가지며, 양전하 담체를 운송하기 위한 제2 영역(ii) 및
- <18> 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제3 밴드갭을 가지며, 양전하와 음전하를 수용하여 결합시킴으로써 발광시키는 제3 영역(iii) 중의 2개 이상의 영역을 포함하는 유기 중합체로서,  
각각의 영역이 하나 이상의 단량체를 포함하며, 유기 중합체 중의 단량체의 양과 배열이, 제1, 제2 및 제3 밴드갭이 중합체속에서 서로 구별되도록 선택되는 유기 중합체가 제공된다.
- <19> 본 발명에 의해 제공되는 유기 중합체는 발광 장치에 요구되는 층 및 중합체 성분들의 총수를 감소시킴으로써 종래 기술의 문제점을 해소한다. 음전하 운송 재료로서 작용하는 중합체, 양전하 운송 재료로서 작용하는 중합체, 및 발광 재료로서 작용하는 중합체를 별도로 요구하지 않으면서, 본 발명의 중합체는 이들의 2개 이상의 역할을 동시에 할 수 있는 것이다. 각각의 상이하게 기능하는 성분들이 장치 중에서 별도의 층을 형성하는 경우에는 층수가 감소된다. 한편, 상이한 기능을 하는 성분들이 단일층에 혼합될 경우, 혼합에 필요한 성분들의 수가 감소된다.
- <20> 본 발명의 목적상, "영역(region)"이라는 용어는 중합체 쉘의 절편(segment) 또는 부분(portion)을 의미하는 것으로 해석될 수 있다. "영역"은 하나 이상의 단량체를 함유할 수 있다. 바람직하게는, 각각의 "영역"이 2개 이상의 단량체를 포함하는 것이 좋다. "영역"이 2개 이상의 단량체를 포함할 경우, 영역은 2개 이하의 상이한 단량체 종류로 구성되는 것, 특히 단일 종류의 단량체 또는 2개의 상이한 종류의 단량체로 구성되는 것이 바람직하다.
- <21> 제1 LUMO 준위는 제3 영역일 수도 있고 아닐 수도 있는 발광 재료에 제1 영역이 음전하 담체를 운송할 수 있도록 하는 수준이어야 한다. 제2 HOMO 준위는 제3 영역일 수도 있고 아닐 수도 있는 발광 재료에 제2 영역이 양전하 담체를 운송할 수 있도록 하는 수준이어야 한다. 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위는 양전하 담체와 음전하 담체가 제3 영역에서 수용되어 결합함으로써 발광시킬 때 목적하는 파장의 빛이 발광하도록 하는 수준이어야 한다.
- <22> 제3 영역에 대해 언급하자면, 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위 사이의 에너지 차이가 제3 밴드갭을 정의한다.
- <23> 본 발명에 따르는 중합체의 요구되는 기능성은 여러가지 방식으로 특징지어질 수 있다.
- <24> 첫번째, 단순한 수준에서, 중합체가 장치내의 적정 위치에 도입될 때 전기발광 장치가 발광할 수 있다면, 이 중합체는 요구되는 기능을 발휘할 것이다. 예를 들면, 후술될 제1 서브-그룹에 속하는 중합체가 전기발광 장치 중의 양극과 음극 사이의 층으로서 도입될 때 전기발광 장치가 발광한다. 후술될 제2 서브-그룹에 따르는 중합체가 적절한 발광 재료와 혼합되어 당해 혼합물이 전기발광 장치 중의 양극과 음극 사이의 층으로서 도입될 경우, 전기발광 장치가 발광할 수 있을 것이다. 후술될 제3 서브-그룹에 속하는 중합체가 적절한 홀 운송 재료와 혼합되어 전기발광 장치 속에서 양극과 음극 사이에 층으로서 도입될 경우, 전기발광 장치가 발광할 것이다. 전기발광 장치는 후술될 제4 서브-그룹에 속하는 중합체가 적절한 전자 운송 재료와 혼합되어 전기발광 장치 속에서

양극과 음극 사이에 층으로서 도입될 때 발광할 수 있을 것이다.

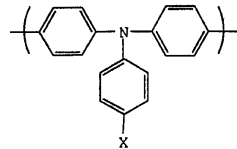
- <25> 어떠한 특정 이론에 구애됨이 없이, 본 발명에 따르는 중합체의 요구되는 기능성을 특징짓는 또다른 방법은 당해 중합체의 순환전압전류도(cyclic voltamogram)를 분석함으로 수행하는 것이다. 순환전압전류도(C-V 그래프)는 당업자에게 어느 정도까지는 단일 중합체가 2개 이상의 상이한 산화 전위를 갖음을 가리켜준다. 대개, 이러한 상이한 산화 전위는 C-V 곡선에서 그 자체로 피크 또는 곡부로 표시되게 될 것이다. 피크 또는 곡부는 날카롭게 뾰족한 것으로부터 깊이가 얕은 것까지 다양하다. 단일 중합체 중에 상이한 산화 전위의 존재여부는 당업자에게 당해 중합체가 전기발광 장치 중에서 전하 운송 및 전하 결합과 관련한 여러가지 기능을 가질 수 있는가를 알려준다. 따라서, 중합체의 순환전압전류도는 중합체가 전기발광 장치에 적절하게 도입될 경우, 당해 중합체가 전기적으로 어떻게 기능할지를 예측할 수 있는 방법이 된다. 전기발광 장치 속에서 중합체의 실질적인 전기적 기능은, 중합체의 층이 당해 장치의 어느 부분에 도입되었는지 등의 변수에 따라 달라질 수 있다.
- <26> 본 발명의 두번째 측면에 따라, 본 발명에 따르는 중합체의 적어도 한 층을 포함하는 전기발광 장치가 제공된다.
- <27> 본 발명에 따르는 중합체가 전기발광 장치에 사용될 경우, 제1 영역은 제1 영역의 제1 LUMO 준위 또는 일 함수가 발광 재료의 LUMO 준위와 가능한 근접하게 합치되도록 선택되어야 한다. 발광 재료는 별도의 중합체이거나, 또는 제1 영역을 포함하는 중합체 중의 제3 영역일 수 있다. 본 발명에 따르는 중합체가 전기발광 장치에 사용될 경우, 제2 영역의 제2 HOMO 준위 또는 일 함수가 발광 재료의 HOMO 준위와 가능한 근접하게 합치되도록 선택되어야 한다. 제3 영역은, 제3 영역을 포함하는 중합체를 전기발광 장치에 사용할 때, 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 밴드갭을 양전하 담체와 음전하 담체가 제3 영역 속에서 결합되어 발광하는 경우에 목적하는 파장의 빛이 발생되도록 선택되어야 한다.
- <28> 첨부된 도면을 참조로 본 발명을 더욱 상세히 설명할 수 있으며, 도 1은 일반적인 장치의 구조도이고, 도 2는 도 1의 장치의 에너지 준위를 나타낸 것이다.
- <29> 본 발명에서, 제1, 제2 및 제3 영역의 조성물은 장치 속에서 서로 독립적인 기능을 하기 때문에 개별적으로 고려할 수 있다.
- <30> 본 발명의 첫번째 측면에서, 제1 영역은 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제1 단량체를 포함한다. 제1 영역의 성분들은 적절한 제1 LUMO 준위를 선택할 수 있도록 선택된다. 이 선택은 중합체가 전기발광 장치에 사용될 때 특이적인 시스템이다. 이 선택은, 제3 LUMO 준위일 수 있거나 그렇지 않은, 발광 재료의 LUMO 준위와 음극의 일 함수에 따라 달라진다. 바람직하게는, 제1 LUMO 준위는 발광 재료의 LUMO 준위와 음극의 일 함수 사이에 존재하는 에너지 준위이거나, 또는 발광 재료의 LUMO 준위에 합치되는 것이 바람직하다. 이 목적을 위해, 바람직하게는 제1 단량체는 치환되거나 치환되지 않은 플루오렌기를 포함하는 것이 바람직하다. 이러한 기는 제1 영역에 포함되는 경우에 특히 유리하다. 플루오렌의 구조는, 플루오렌 단량체의 특정 쇄 길이, 특히 쇄 길이가 단량체 5개를 초과할 경우, 적절한 음극 및 발광 재료(제3 영역이거나 아닐 수 있음)와 함께 사용될 경우, 탁월한 전자 운송 특성을 갖기 때문이다.
- <31> 특히, 제1 단량체는 2,7-결합된 디알킬 플루오렌기를 포함한다. 2,7-결합된 플루오렌기가 바람직하다. 더욱 바람직하게는, 2,7-결합된 디알킬 플루오렌기가 9,9-디옥틸 플루오렌인 것이 바람직하다. 9,9-이치환된, 바람직하게는, 디알킬 또는 디아릴 플루오렌기는 합성이 간편하므로 특히 바람직하다. 옥틸 치환기는 중합체의 용해도를 증진시켜 주므로 바람직하다.
- <32> 본 발명의 두 번째 측면에서, 제2 영역은 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제2 단량체를 포함한다. 바람직하게는, 제2 단량체는 다음 화학식  $\text{Ar}_3\text{N}^+$ 의 트리아릴아민 단위(여기서, 각각의 Ar은 동일하거나 상이하고, 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족기이다)를 포함하는 것이 바람직하다. 제2 단량체에서 트리아릴아민 단위가 존재하는 것이 바람직한데, 이는 트리아릴아민의 낮은 산화 전위가 이들을 양전하 운송 재료로서 특히 적합하게 만들어주기 때문이다.
- <33> 제2 영역의 성분들은 적절한 제2 HOMO 준위를 선택하도록 선택된다. 이러한 선택은 전기발광 장치에서 중합체가 사용될 때 특이적인 시스템이다. 이 선택은, 제3 HOMO 준위일 수 있거나 그렇지 않은, 발광 재료의 HOMO 준위와 양극의 일 함수에 따라 달라진다. 바람직하게는, 제2 HOMO 준위가 발광 재료의 HOMO 준위와 양극의 일 함수 사이에 있거나 또는 발광 재료의 HOMO 준위에 배치되는 에너지 준위인 것이 바람직하다.
- <34> 적어도 하나의 Ar이 치환되거나 치환되지 않은 페닐기인 것이 바람직하다. 이것은, 제3 영역이거나 아닐 수 있

는, 적절한 발광 재료와 중합체를 함께 사용할 경우, 제2 영역에서 우수한 홀 운송 성능을 나타내기 때문이다.

<35> 적어도 하나의 Ar은, 중합체 골격으로부터 분지된, 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족 측쇄 (side group)인 것도 바람직하다. 바람직한 측쇄는 치환되지 않은 페닐 또는 일치환되거나 또는 3,5-이치환된 페닐기를 포함하는 것이다. 측쇄가 치환기인 경우에는, 바람직한 치환기는 치환되거나 치환되지 않은 알킬, 퍼플루오로알킬, 알킬아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 아릴, 알콕시, 티오알킬 또는 시아노기이다. 이는, 이들이 제2 HOMO 준위의 선택에 도움을 주고/주거나 중합체의 용해도를 증진시키는 것을 돕는 데 적합하기 때문이다.

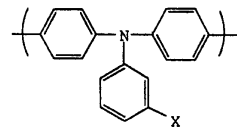
<36> 트리아릴아민 단위 중에 포함된 적절한 기를 다음 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III, 화학식 IV, 화학식 V 및 화학식 VI에 예시하였다:

**화학식 I**



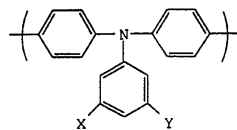
<37>

**화학식 II**



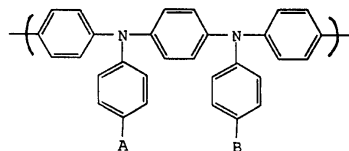
<38>

**화학식 III**



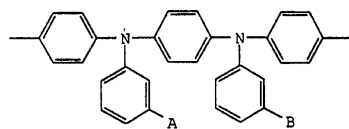
<39>

**화학식 IV**



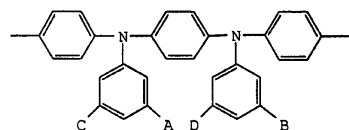
<40>

**화학식 V**



<41>

**화학식 VI**

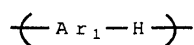


<42>

<43> 화학식 I, 화학식 II 및 화학식 III에서, X와 Y는 동일하거나 상이한 치환기이다. 화학식 IV, 화학식 V 및 화학식 VI에서, A, B, C 및 D는 동일하거나 상이한 치환기이다. 상이한 바와 같이, X, Y, A, B, C, 및 D 중의 하나 이상이 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 및 아릴알킬기로부터 독립적으로 선택되는 것이 바람직하다. X, Y, A, B, C 및 D 중의 하나 이상은 수소일 수도 있다.

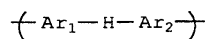
- <44> X, Y, A, B, C 및 D 중의 하나 이상이 독립적으로 치환되지 않은 이소부틸기, n-알킬, n-알콕시 또는 트리플루오로메틸기인 것이 바람직한데, 이는, 이들이 제2 HOMO 준위의 선택에 도움을 주고/주거나 중합체의 용해도를 증진시키는 것을 돕는 데 적합하기 때문이다.
- <45> 실제상의 관점에서 볼 때, X와 Y 또는 A, B, C 및 D는 서로 동일한 것이 바람직하다.
- <46> 본 발명의 세번째 측면에서, 제3 영역은 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제3 단량체를 포함한다.
- <47> 후술되는 본 발명의 제3 영역의 제3 구체에는, 결과적으로, 장치 구조내에 사용될 때, 중합체로부터 발광하는 빛의 파장이 서로 상이할 것이다. 주로, 구체에 1은 "적색" 발광에 관한 것이나, 이에 한정되지 않는다. 본 발명의 목적상, "적색"광선은 600nm 내지 700nm의 파장 범위를 갖는 빛으로 정의될 수 있다. 주로, 구체에 2는 "녹색" 발광에 관한 것이나, 이에 한정되지 않는다. 본 발명의 목적상, "녹색" 광선은 500nm 내지 600nm의 파장 범위를 갖는 빛으로 정의될 수 있다. 주로, 구체에 3은 "청색" 발광에 관한 것이나, 이에 한정되지 않는다. 본 발명의 목적상, "청색" 광선은 400nm 내지 500nm의 파장 범위를 갖는 빛으로 정의될 수 있다.
- <48> 본 발명의 세번째 측면에 따르는 제1 구체에에서, 제3 단량체는 벤젠 또는 티오펜기에 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 디아진기인 H 기를 포함한다.
- <49> 특히, 제1 구체에 따르는 제3 단량체는 다음 화학식 IX의 기를 포함한다:

### 화학식 IX



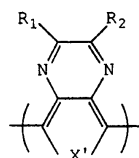
- <50> 위의 화학식 IX에서, Ar<sub>1</sub>은 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족기이다.
- <51> 더욱 바람직하게는, 제1 구체에 따르는 제3 단량체는 다음 화학식 X의 기를 포함한다:

### 화학식 X



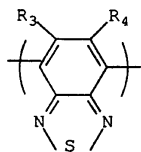
- <53> 위의 화학식 X에서, Ar<sub>2</sub>는 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족기이고, Ar<sub>1</sub>은 상기 화학식 IX에서 정의한 바와 같다.
- <55> 화학식 X에 있어서, Ar<sub>1</sub> 또는 Ar<sub>2</sub>는 치환되거나 치환되지 않은, 융합되거나 융합되지 않은 벤젠, 티오펜, 푸란, 퀴놀살린, 바이페닐 또는 플루오렌기를 포함하는 것이 바람직하다. 이는, 이러한 기가 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위를 선택하기에 적합하기 때문이다. 상기한 바와 같이, 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위는 제3 영역의 밴드갭을 정의하므로, 전자와 홀이 제3 영역에서 결합할 때에 발생하는 빛의 파장을 정의한다.
- <56> 제1 구체에의 또 다른 특정예에서, 제3 단량체는 다음 화학식 VIII의 기를 포함한다:

### 화학식 VIII



- <57> 위의 화학식 VIII에서, X'은 RC=CR 또는 S이고, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 동일하거나 상이한 치환기이다. 바람직하게는, 각각의 R은 독립적으로 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 및 아릴알킬로부터 선택된다.
- <59> 제1 구체에의 또다른 특정예에서, 제3 단량체는 다음 화학식 XI의 기를 포함한다:

### 화학식 XI



<60>

<61> 위의 화학식 XI에서, R<sub>3</sub>과 R<sub>4</sub>는 동일하거나 상이한 치환기이다.

<62> 화학식 VIII와 XI가 바람직한데, 이는 이들 작용기들이 목적하는 제3 LUMO 및 제3 HOMO 준위를 갖는 제3 영역을 생성시키기 때문이다.

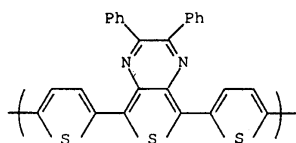
<63> 바람직하게는, 하나 이상의 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub>는 각각 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 및 아릴알킬로부터 선택된다. 이들 기들은 상기 X, A, B, C 및 D와 관련해서 논의된 것과 동일한 이유로 바람직하다.

<64> 바람직하게는, 실제상의 이유에서, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub> 및 R<sub>3</sub>과 R<sub>4</sub>가 동일한 것이 바람직하다. 더욱 바람직하게는, 이들은 모두 동일하고 각각 페닐기이다. 더욱 바람직하게는, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 서로 동일하고 각각 피리딘 또는 푸란기이며, R<sub>3</sub>과 R<sub>4</sub>는 서로 동일하고 각각 수소이다.

<65> R<sub>3</sub>과 R<sub>4</sub>가 상이한 경우, R<sub>3</sub>은 수소이고 R<sub>4</sub>는 알킬기인 것이 바람직하다.

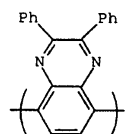
<66> 세번째 측면의 제1 구체예의 제3 단량체의 특징으로서 다음 화학식 XIII 내지 XXVI의 기로 나타내어지는 것들을 들 수 있다:

### 화학식 XIII



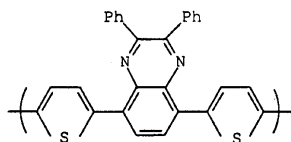
<67>

### 화학식 XIV



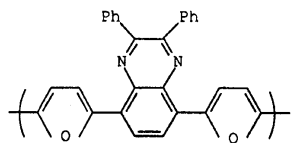
<68>

### 화학식 XV



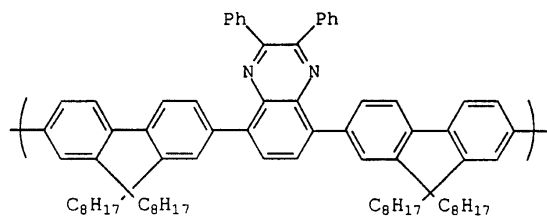
<69>

### 화학식 XVI



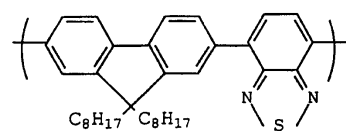
<70>

화학식 XVII



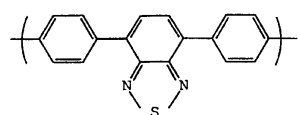
<71>

화학식 XVIII



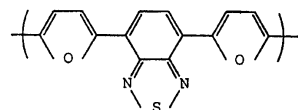
<72>

화학식 XIX



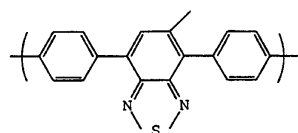
<73>

화학식 XX



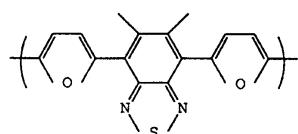
<74>

화학식 XXI



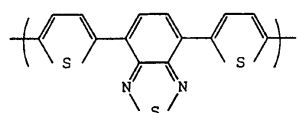
<75>

화학식 XXII



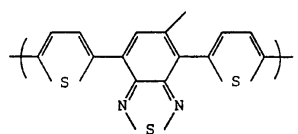
<76>

화학식 XXIII



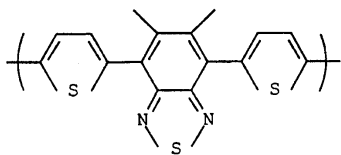
<77>

화학식 XXIV



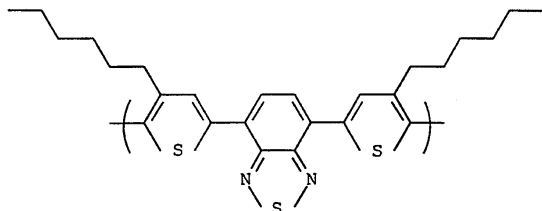
<78>

화학식 XXV



<79>

화학식 XXVI



<80>

<81> 상기 제3 단량체의 하나 이상을 선택하면, 상이한 제3 LUMO 및 제3 HOMO 준위가 야기될 것이고, 그에 따라 제3 영역에서 밴드갭이 상이할 것임을 이해하여야 한다. 이것은 전자와 홀이 발광시키기 위해 제3 영역에서 결합할 경우에 상이한 빛의 파장을 발생시킬 것이다.

<82> 본 발명의 세번째 측면 중 제2 구체예에서, 제3 단량체는 트리아릴아민 단위를 포함한다.

<83> 바람직하게는, 제2 구체예에 따라, 제3 단량체가 다음 화학식  $\{(-(\text{Ar})_2\text{N})-\text{Ar}-(-\text{N}(\text{Ar})_2-)\}$  의 기(여기서, 각각의 Ar은 동일하거나 상이하고, 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함한다)를 포함한다. 적어도 하나의 Ar이 치환되거나 치환되지 않은 아릴기, 특히 치환되지 않은 페닐기를 포함하는 것이 바람직하다.

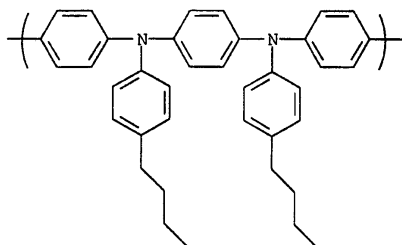
<84> 한 가지 측면에서, 적어도 하나의 Ar은 중합체 골격으로부터 분지된, 치환되거나 치환되지 않은 방향족 또는 헤테로방향족 측쇄를 포함한다. 바람직한 측쇄로는 융합되거나 융합되지 않은 벤젠, 티오펜, 푸란, 퀴놀살린, 비페닐 또는 플루오렌기를 들 수 있다.

<85> 측쇄는 추가적으로 치환되지 않거나 일치환된 페닐기를 포함하는 것이 바람직하다. 적당한 측쇄는 앞에서 논의된 것과 같은 이유에서 치환되거나 치환되지 않은 알킬, 퍼플루오로알킬, 알킬아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 아릴, 알콕시, 티오알킬 또는 시아노기를 포함한다.

<86> 세 번째 측면에서 두 번째 구체예에 따르면, 일반적으로 트리아릴아민 단위는 화학식 IV에서 보여준 것과 같은 화학식을 갖는 기를 포함할 수 있는데, 여기서 A와 B는 서로 동일하거나 상이하고, 앞에서 정의된 것과 같다.

<87> 화학식 IV의 구체적인 예는 다음 화학식 XXVII에 나타낸 바와 같다:

화학식 XXVII



<88>

<89> 이러한 기를 포함하는 제3 단량체는 제3 LUMO와 제3 HOMO 준위를 발생시키고, 이에 따라 전자와 홀이 제3 영역에서 결합하여 발광시킬 때, 목적하는 파장의 빛이 방출되게 하는 제3 영역의 밴드갭을 제공하므로 바람직하다.

<90> 본 발명의 추가적인 측면에서, 제1 영역은 치환되거나 치환되지 않은 추가적인 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제4 단량체를 포함할 수 있다. 제4 단량체는 음전하 담체의 운송을 향상시키는 기능을 갖는다. 바람직하게는, 치환되거나 치환되지 않은 추가적인 방향족 또는 헤테로방향족기는 R<sub>3</sub>과 R<sub>4</sub>가 모두 수소인 화학식 XI의

기를 포함한다.

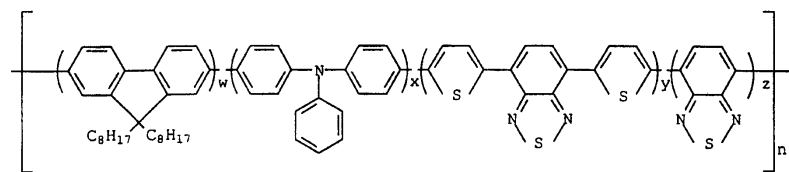
<91> 본 발명의 또다른 추가적인 측면에 있어서, 제2 영역은 추가적으로 제5 단량체를 포함할 수 있다. 제5 단량체는, 제2 단량체와는 다른, 앞에서 정의된 것과 같은 추가적인 제2 단량체를 포함할 수 있는데, 제5 단량체의 기능은 제2 영역의 양전하 담체 운송 특성을 향상시키는 것이다.

<92> 본 발명의 첫 번째, 두 번째 및 세 번째 측면과 관련하여 앞에서 논의된 광범위한 그룹의 중합체에 있어서, 4가지 서브-그룹의 중합체가 정의될 수 있다.

<93> 제1 서브-그룹은 제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 갖고 음전하 담체를 운송하는 제1 영역, 제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 갖고 양전하 담체를 운송하는 제2 영역, 및 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제3 밴드갭을 갖고 양전하와 음전하 담체를 수용하여 결합시킴으로써 빛을 생성시키는 제3 영역을 포함하는 유기 중합체로서, 상기 각 영역은 하나 이상의 단량체를 포함하며, 유기 중합체 중의 단량체의 양과 배열은 제1, 제2 및 제3 밴드갭이 상기 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택된다.

<94> 상기 서브-그룹의 구체적인 예는 다음 화학식 XXVIII에 나타낸 바와 같다:

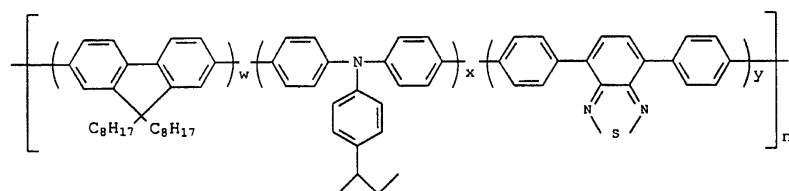
### 화학식 XXVIII



<95> 위의 화학식 XXVIII에서,  $w + x + y + z = 1$ 이고,  $w \geq 0.5$ 이고,  $0 \leq x + y + z \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다. 바람직하게는,  $w$ 는 약 0.5이고,  $x$ 는 약 0.125이고,  $y$ 는 약 0.034이고,  $z$ 는 약 0.341이다.  $n$ 은  $\geq 5$ 인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 중합체가 전기발광 장치에 사용될 때 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다. 상기 중합체는 전기발광 장치에 사용될 때 앞에서 정의된 것과 같은 적색광을 방출한다.

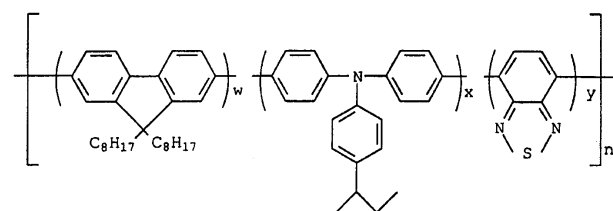
<97> 상기 서브-그룹의 추가적인 구체에는 다음 화학식 XXIX 및 화학식 XXX에 나타낸 바와 같다:

### 화학식 XXIX



<98> 위의 화학식 XXIX에서,  $w + x + y = 1$ 이고,  $w \geq 0.5$ 이고,  $0 \leq x + y \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다. 바람직하게는,  $w$ 는 약 0.800이고,  $x$ 는 약 0.171이고,  $y$ 는 약 0.029이다.  $n$ 은  $\geq 5$ 인 것이 바람직하다.

### 화학식 XXX

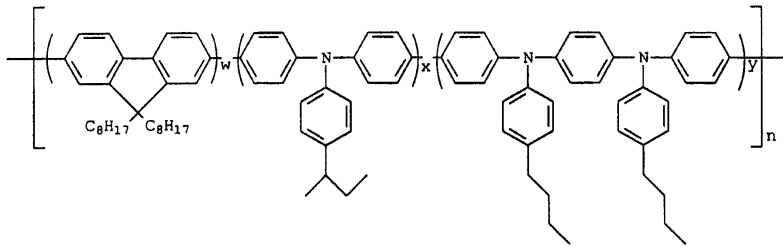


<99> 위의 화학식 XXIX 및 화학식 XXX에서,  $w + x + y = 1$ 이고,  $w \geq 0.5$ 이고,  $0 \leq x + y \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다. 상기 화학식 XXIX의 경우, 바람직하게는  $w$ 는 약 0.800이고,  $x$ 는 약 0.171이고,  $y$ 는 약 0.029이다.  $n$ 은  $\geq 5$ 인 것이 바람직하다.

<101> 화학식 XXX의 경우, 바람직하게는  $w$ 는 약 0.864이고,  $x$ 는 약 0.108이고,  $y$ 는 약 0.028이다. 이 값들은 상기 중합체가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다. 상기의 중합체들은 전기발광 장치에 사용될 때 앞에서 정의된 것과 같은 녹색광을 방출한다.

<102> 상기 서브-그룹의 또다른 추가적인 구체예는 다음 화학식 XXXI에 나타낸 바와 같다:

**화학식 XXXI**



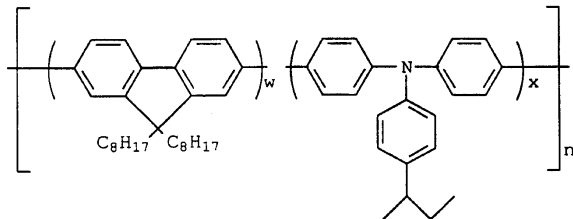
<103>

<104> 위의 화학식 XXXI에서,  $w + x + y = 1$ 이고,  $w \geq 0.5$ 이고,  $0 \leq x + y \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다. 바람직하게는,  $w$ 는 약 0.80이고,  $x$ 는 약 0.10이고,  $y$ 가 약 0.10이다.  $n$ 은  $\geq 5$  인 것이 바람직하다. 또한,  $w$ 가 약 0.85이고,  $x$ 가 약 0.10이고,  $y$ 가 약 0.05인 것도 바람직하다. 이 값들은 상기 중합체가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다. 상기의 중합체는 전기발광 장치에 사용될 때 청색광을 방출한다.

<105> 본 발명에 따르는 중합체의 제2 서브-그룹은 음전하 담체를 운송하며 제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 갖는 제1 영역 및 양전하 담체를 운송하며 제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 갖는 제2 영역을 포함하는 유기 중합체로서, 상기 각 영역은 하나 이상의 단량체를 포함하며, 유기 중합체 중의 단량체의 양과 배열은 제1 및 제2 밴드갭이 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택된다.

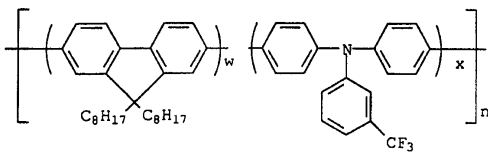
<106> 제2 서브-그룹에 속하는 중합체의 구체예는 다음 화학식 XXXII 또는 화학식 XXXIII에 나타낸 바와 같다:

**화학식 XXXII**



<107>

**화학식 XXXIII**

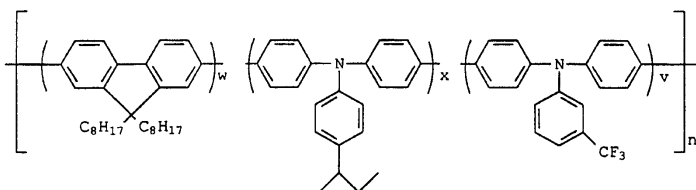


<108>

<109> 위의 화학식 XXXII 및 화학식 XXXIII에서,  $w + x = 1$ 이고,  $w \geq 0.5$ 이고,  $x \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다. 바람직하게는,  $w$ 는 약 0.90이고,  $x$ 는 약 0.10이다.  $n$ 은  $\geq 5$  인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 중합체가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다.

<110> 제2 서브-그룹에 속하는 중합체의 추가적인 예는 다음 화학식 XXXIV에 나타낸 바와 같다:

**화학식 XXXIV**



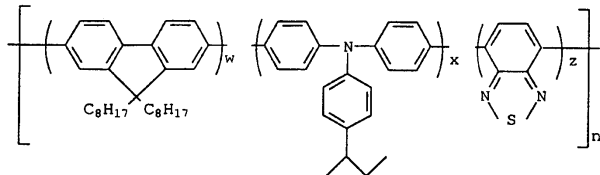
<111>

<112> 위의 화학식 XXXIV에서,  $w + x + v = 1$ 이고,  $w \geq 0.5$ 이고,  $0 \leq x + v \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다.

바람직하게는,  $w$ 가 약 0.50이고,  $x$ 가 약 0.25이고,  $v$ 가 약 0.25이거나, 또는  $w$ 가 약 0.90,  $x$ 가 약 0.05이고,  $v$ 가 약 0.05이다.  $n$ 은  $\geq 5$  인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 중합체가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다.

<113> 제2 서브-그룹에 속하는 중합체의 다른 추가적인 예는 다음 화학식 XXXV에서 나타낸 바와 같다:

### 화학식 XXXV



<114>

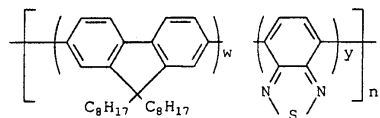
<115> 위의 화학식 XXXV에서,  $w + x + z = 1$ ,  $w \geq 0.5$ ,  $0 \leq x + z \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다. 바람직하게는,  $w$ 는 약 0.50,  $x$ 는 약 0.377이고,  $z$ 는 약 0.123이다.  $n$ 은  $\geq 5$  인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 중합체가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다.

<116> 제2 서브-그룹에 속하는 중합체는 발광 재료와 편리하게 혼합될 수 있다. 혼합된 중합체는 발광 장치에서 단일 층(single layer)을 형성할 수 있다. 발광 재료의 적합한 예는 적합한 HOMO와 LUMO 준위 및, 따라서, 적합한 밴드갭을 갖는 발광 재료이면 어떠한 것도 가능하다.

<117> 본 발명에 따르는 제3 서브-그룹에 속하는 중합체는 음전하 담체를 운송하며 제1 LUMO 준위와 제1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제1 밴드갭을 갖는 제1 영역, 및 양전하와 음전하 담체를 수용하여 결합시킴으로써 발광시키며 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제3 밴드갭을 갖는 제3 영역을 포함하는 유기 중합체로 정의될 수 있으며, 여기서 각 영역은 하나 이상의 단량체를 포함하며, 상기 유기 중합체 중의 단량체의 양과 배열은 제1 및 제3 밴드갭이 상기 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택된다.

<118> 제3 서브-그룹에 속하는 중합체의 예는 다음 화학식 XXXVI에 나타낸 바와 같다:

### 화학식 XXXVI



<119>

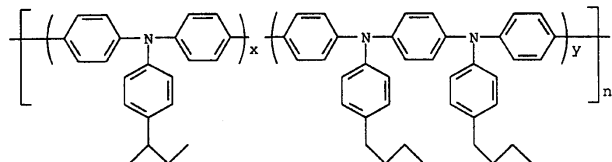
<120> 위의 화학식 XXXVI에서,  $w + y = 1$ 이고,  $w \geq 0.5$ 이고,  $y \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다. 바람직하게는,  $w$ 는 약 0.964이고,  $y$ 는 약 0.036이다.  $n$ 은  $\geq 5$  인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 중합체가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다.

<121> 제3 서브-그룹에 속하는 중합체는 발광 장치에 사용될 때 홀 운송 재료와 편리하게 혼합될 수 있다. 적합한 홀 운송 재료의 예는 폴리트리아릴아민이다.

<122> 본 발명에 따르는 제4 서브-그룹에 속하는 중합체는 양전하 담체를 운송하며 제2 LUMO 준위와 제2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제2 밴드갭을 갖는 제2 영역, 및 양전하와 음전하 담체를 수용하여 결합시킴으로써 발광시키며 제3 LUMO 준위와 제3 HOMO 준위로 정의되는 제3 밴드갭을 갖는 제3 영역을 포함하는 유기 중합체로 정의될 수 있으며, 여기서 각 영역은 하나 이상의 단량체를 포함하며, 상기 유기 중합체 중의 단량체의 양과 배열은 제2 및 제3 밴드갭이 상기 중합체 속에서 서로 구별되도록 선택된다.

<123> 제4 서브-그룹에 속하는 중합체의 예는 다음 화학식 XXXVII에 나타낸 바와 같다.

### 화학식 XXXVII



<124>

- <125> 위의 화학식 XXXVII에서,  $x + y = 1$ 이고,  $x \geq 0.5$ ,  $y \leq 0.5$ 이고,  $n \geq 2$ 이다. 바람직하게는,  $x$ 는 약 0.5이고,  $y$ 는 약 0.5이다.  $n$ 은  $\geq 5$  인 것이 바람직하다.
- <126> 제4 서브-그룹에 속하는 중합체는 발광 장치에서 사용될 때 전자 운송 재료와 편리하게 혼합될 수 있다. 적합한 전자 운송 재료의 예는 폴리[2,7-(9,9-디알킬 플루오렌)], 바람직하게는 폴리[2,7-(9,9-디옥틸플루오렌)]과 같은 폴리플루오렌이다.
- <127> 본 발명에 따르는 제1, 제2, 제3 및 제4 서브-그룹 중합체에 관하여 앞에서 언급된 것과 같은 제1, 제2 및 제3 영역은 상기한 본 발명의 측면 또는 구체에 중의 어느 하나에서 정의된 것과 같은 영역이라는 것에 유념하여야 한다.
- <128> 공지되어 있는 다양한 중합 방법이 본 발명에 따르는 중합체를 제조하는 데 이용될 수 있다.
- <129> 특히 적합한 한 가지 방법으로는 영국 특허출원 제9925653.9호에 개시되어 있으며, 이는 본문의 참고문헌으로 인용된다. 상기 출원은 (a) 붕소산 그룹(boronic acid group), 붕소산 에스테르 그룹(boronic ester group) 및 보레인 그룹(borane group)으로부터 선택된 2개 이상의 반응성 붕소 유도체 그룹을 갖는 방향족 단량체, 및 2개 이상의 반응성 할라이드 관능기를 갖는 방향족 단량체의 반응 혼합물; 또는 (b) 하나의 반응성 할라이드 관능기와 붕소산 그룹, 붕소산 에스테르 그룹 및 보레인 그룹으로부터 선택된 하나의 반응성 붕소 유도체 그룹을 갖는 방향족 반응 혼합물을 중합하는 것을 포함하는 공액 중합체를 제조하는 방법으로서, 상기 반응 혼합물은 촉매량의 팔라듐 촉매, 및 반응성 붕소 유도체 그룹을  $-B(OH)_3$  음이온으로 전환시키기에 충분한 양의 유기 염기를 포함하는 방법을 개시하고 있다.
- <130> 본 발명에 따르는 중합체는 상기 방법에 의하여 제조되는 것이 특히 유리하다. 이것은 반응시간이 짧고, 잔류하는 팔라듐의 양이 낮기 때문이다.
- <131> 다른 중합 방법은 미국 특허 제5,777,070호에 개시되어 있다. 이 방법은 붕소산, C1-C6 붕소산 에스테르, C1-C6 보레인 및 이들의 혼합물로부터 선택된 2개 이상의 반응성 그룹을 갖는 단량체를 방향족 디할라이드(dihalide) 작용 단량체와 접촉시키거나, 또는 하나의 반응성 붕소산, 붕소산 에스테르 또는 보레인 그룹과 하나의 반응성 할라이드 관능기를 서로 접촉시키는 것을 포함한다.
- <132> 추가적인 중합 방법은 문헌[참조: "Macromolecules", 31, 1099-1103(1998)]으로부터 알려진 것이다. 이 중합 방법은 니켈의 매개에 의한 디보라미드(diboramide) 단량체의 커플링을 포함한다. 이 방법은 보통 "야마모토 중합(Yamamoto Polymerization)"으로 알려져 있다.
- <133> 앞에서 언급된 중합 방법들에 있어서, "단량체"는, 하나의 구체예에서, 제1, 제2 또는 제3 영역 중의 하나를 포함하는 것이 선택될 수 있다. 다시 말하면, 각각 제1, 제2 또는 제3 영역을 포함하며 2개 이상의 반응성 그룹을 갖는 여러 종류의 단량체들을 하나 이상의 제1 반응 단계를 통하여 제조할 수 있다. 그 다음, 미리 제조된 단량체들을 중합 단계에서 다른 단량체들과 접촉시킬 수 있다. 실제로 있어서, 하나 이상의 제1 반응 단계 및 중합 단계는 각각 다른 반응 용기에서 수행될 것이다.
- <134> 본 발명에 따르는 중합체는 통상적으로 2보다 큰 중합도, 바람직하게는 3보다 큰 중합도를 갖는다.
- <135> 통상적으로, 본 발명에 따르는 중합체는 전기발광 장치에 하나의 층으로 도입될 것이다. 상기의 층은 음극과 양극 사이에 배치될 것이다.
- <136> 앞에서 정의된 것과 같은 제1 서브-그룹에 속하는 중합체의 경우, 제1 서브-그룹에 속하는 고분자의 층 이외에, 음극과 양극 사이에 추가적인 층이 필요하지는 않다. 그러나, 홀 운송 또는 전자 운송 층과 같은 추가적인 층들을 포함하는 것이 유리할 수도 있다.
- <137> 앞에서 정의된 제2 서브-그룹에 속하는 중합체는 발광 재료, 바람직하게는 발광 중합체와 편리하게 혼합할 수 있다. 혼합물 층은 전기발광 장치 내의 음극과 양극 사이에 배치할 수 있다.
- <138> 앞에서 정의된 제3 서브-그룹에 속하는 중합체는 홀 운송 재료, 바람직하게는 홀 운송 중합체와 편리하게 혼합할 수 있다. 혼합물의 층은 전기발광 장치 내의 음극과 양극의 사이에 배치할 수 있다.
- <139> 앞에서 정의된 제4 서브-그룹에 속하는 중합체는 전기발광 장치에서 사용될 때 전자 운송 재료, 바람직하게는 전자 운송 중합체와 편리하게 혼합할 수 있다. 혼합물 층은 전기발광 장치의 음극과 양극 사이에 배치할 수 있다.

<140> 제2, 제3 및 제4 서브-그룹의 경우, 장치 내에서의 전자 운송 및/또는 홀 운송, 및/또는 장치로부터의 발광을 최적화하기 위하여, 필요한 경우, 추가적인 중합체 층이 또한 음극과 양극 사이에 배치될 수 있다.

## 실시예

<143> 실시예 1

<144> 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플루오렌의 합성

<145> 플루오렌(166.2g, 1.0mol), 요오드(0.4g) 및 디클로로메탄(1L)을 자석 교반기, 적하 깔때기 및 알콜 온도계 (spirit thermometer)가 장치된 5L 용량의 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣었다. 여기에 탄산나트륨 용액(물 2L 중의 280g)을 가하고 반응 혼합물을 얼음/염 욕(ice/salt bath)를 이용하여 5℃ 이하로 냉각시켰다. 브롬 용액(120mL, 디클로로메탄 250mL 중의 2.34mol)을 온도를 5℃ 이하로 유지하면서 반응 혼합물에 적가하였다. 첨가가 끝난 다음, 빙욕을 치우고, 반응 혼합물을 교반하면서 실온까지 온도를 상승시켰다. 18시간 동안 교반한 후에, 생성물이 미세한 백색 분말로 침전되었다. 생성물을 여과하고, 20% 나트륨 디오셀페이트 수용액 120mL로 1회 세척하고, 그 다음 증류한 탈이온수 350mL로 3회 세척하였다. 생성물을 회전 증발기로 건조하여 순수한 백색 분말 디브로모플루오렌 321g(99%)을 수득하였다.

<146> 앞에서 제조한 디브로모플루오렌(320g)을, 85℃에서 자석 교반기, 환류 콘덴서 및 적하 깔때기가 장치된 3L 용량의 3구 둥근 바닥 플라스크 속에서 KOH 용액(1 L, 50중량%) 및 Aliquat-336(3mL)에 주입하였다. 상기 현탁액을 85℃로 가열하면서 n-옥틸브로마이드(500mL)를 적가하여 2상계(two phase system) 반응물을 생성시켰다. 첨가가 완료된 후에 반응물을 85℃에서 밤새도록 교반한 후, 실온으로 냉각시켰다. 그 다음, 디클로로메탄(500mL)을 반응 혼합물에 첨가하였다.

<147> 반응 혼합물을 2L 용량의 분별 깔때기로 옮겨서 유기층을 분리하고, 수층을 디클로로메탄 200mL로 3회 세척하고, 합한 유기층을 물 200mL로 3회 세척하였다. 이 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조하고, 여과하고, 용매를 회전 증발기로 제거하여 암색의 오일을 수득한 후, 이를 냉각시키고 굽어모아 황색/오렌지색 고체를 수득하였다. 반응 혼합물을 냉장고에 1시간 이상 방치한 다음, 고체를 여과하고 진공 펌프로 건조하였다.

<148> 생성물을 헥산(~1.5 L)에 용해시키고, 모래(1cm), 70-230메쉬의 실리카겔(60 cm), 모래 1cm로 충전된 유리 컬럼 (컬럼 직경 약 60mm)을 질소압으로 통과시켰다. 이때, 생성물의 용출 전후에 컬럼을 헥산 1.5L로 세정해야 한다는 것에 주의하여야 한다. 용출물을 증발시키고, 냉각하여 백색 고체를 생성시키고, 이를 헥산으로 재결정하였다.

<149> 재결정은 필요한 최소량의 헥산으로 수행하였다. 생성물 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플루오렌(i)은 무색 결정성(백색) 고체로 수득되었다. 상기 결정성 생성물을 일정한 질량이 유지될 때까지 실온에서 진공 건조하고, HPLC로 순도를 검사하였다. 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플루오렌의 최종 수득량은 347g(64%)이었다.

<150> 실시예 2

<151> 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플루오렌의 합성

<152> 자석 교반기, 질소 주입구, 고무 격막(septum) 및 저온 온도계가 장치된 2L 용량의 3구 플라스크 속에서 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플루오렌(200g, 0.365mol)을 건조 THF 1L에 용해시킨다. 드라이아이스/아세톤 욕을 사용하여 -78℃로 상기 용액을 냉각시키고, 이러한 동안에 디브로마이드가 침전되었다. 부틸리튬(2.5M 헥산 용액 320mL, 1.1당량/브로마이드)을 약 -50℃ 이하로 온도를 유지하면서 상당히 신속하게 적가하였다. 1/2이 첨가된 시점에서 브로마이드가 모두 용해되고, 약 3/4가 첨가되었을 때 2,7-디리튬-9,9-디옥틸플루오렌이 침전되기 시작하였다. 첨가가 끝난 다음, 당해 디리튬플루오렌 슬러리를 추가로 30분 동안 더 교반하였다. 정제된 트리메틸실릴 클로라이드(TMSCl, 120mL)를 -30℃ 이하로 온도를 유지하면서 신속하게 첨가하였다. 냉각 욕을 제거하고, 상기 용액을 실온까지 가온시켰다(통상 밤새도록). TLC 분석(헥산으로 용출시킴)은 용매 전면 근처에서 하나의 점(single spot)을 보여주었다. 상기 용액을 1구 플라스크로 여과하고, 용매를 회전 증발기로 제거하였다. 헥산을 여액에 가하고, 수득된 용액을 여과하여 LiCl을 제거하고, 헥산으로 충분히 세척하였다. 헥산을 제거하고, 잔류하는 오일을 고진공하에 방치하여 THF 및 헥산을 모두 제거하였다. 2,7-디(트리메틸실릴)-9,9-디옥틸플루오렌의 수득량은 정량적이었다.

<153> 상기 디-TMS(트리메틸실릴) 유도체를 건조된 디클로로메탄 500mL와 함께 깨끗한 2L 3구 플라스크(질소 주입구, 고무 격막 및 온도계가 장치됨)에 옮기고, 이 용액을 질소하에서 약 -78℃로 냉각시켜 이 동안에 결정화시켰다.

붕소 트리브로마이드(120mL, 약 1.5당량/TMS기)를 5분 동안 첨가하였다. 처음 1 또는 2mL가 첨가됨에 따라 외관이 녹색으로 되었다(강도가 변함). 첨가가 완료된 다음, 상기 혼합물을 실온까지 상승시키고, 통상적으로 밤새도록 교반하였다. 그러나, 대개 반응은 2시간 이내에 종결된다.

<154> 그 후에, 상기 용액을 실온에서 KOH 수용액(물 1.5L 중의 600g)에 적가하고, 이칼륨 디보로네이트 염의 농후한 백색 침전이 생성되었다. 모든 산이 확실하게 반응하도록 10분 동안 계속 교반한다. 2상의 혼합물을 커다란 소결 유리 깔때기(glass sinter funnel)로 여과하고, 부분적으로 건조되도록 흡입 처리한 후, 충분한 양의 물로 세척하였다. 이어서, 고체를 5L 원뿔 모양의 플라스크에 들어 있는 5M HCl(1.2L)과 에테르(1.2L)의 혼합물에 천천히 첨가하여 신속하게 교반하였다. 30분 경과 후에, 재생성된 이산(diacid)은 에테르층에 있게 되고, 이를 분리하여 500mL의 탈이온수로 세척하였다.

<155> 상기 과정을 반복하였다. 즉, 상기 에테르 용액을 KOH 수용액(물 1.5L 중의 600g)에 적가하였다. 이칼륨 디보로네이트 염의 농후한 백색 침전이 생성되었다. 모든 산이 확실하게 반응하도록 10분 동안 계속 교반하였다.

<156> 2상 혼합물을 커다란 소결 유리 깔때기로 여과하고, 부분적으로 건조되도록 흡입 처리(sucked)한 후, 충분한 양의 물로 세척하였다. 이어서, 고체를 5L 원뿔 모양의 플라스크에 들어 있는 5M HCl(1.2L)과 에테르(1.2L)의 혼합물에 천천히 첨가하여 신속하게 교반하였다. 30분 경과 후에, 재생성된 이산(diacid)은 에테르 층에 있게 되며, 이를 분리하여 500mL의 탈이온수로 세척하였다.

<157> 에테르를 제거한 후, 생성물을 약 1 - 1.5L 톨루엔에 용해시킨 다음, 에틸렌 글리콜(40g, 0.645mol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 밤새도록 가열하고, 생성된 물을 딥-스타크(Dean-Stark) 트랩으로 제거하였다(17mL가 수집됨). 톨루엔을 제거하고, 오일상의 생성물을 수득하였다. 여기에 아세토니트릴(약 1L)을 가하고, 이 혼합물을 가열 환류하여 오일을 용해시킨 후, 실온까지 냉각되도록 방지하였다. 냉각고에서 추가적으로 냉각시켰다. 결정을 여과하고, 충분한 양의 아세토니트릴로 세척하여 건조하였다. 그 다음, 건조된 결정을 헥산(약 1L)에 용해시킨 다음, 실온까지 냉각시키고, 냉각고에 밤새도록 방지하였다. 목적 화합물 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플루오렌이 무색 고체로 수득되었다(110g, 57%).

<158> 실시예 3

<159> **비스(4-브로모페닐)-4-sec-부틸페닐아민의 합성**

<160> 기계적 교반기, 유리 교반 막대, 테프론(Teflon) 교반 날개, 콘텐서가 장치된 2L 둥근 바닥 플라스크에 4-sec-부틸아닐린(200g, 1.34mol, 사용 전에 진공하에 새롭게 수회 증류시킴)을 넣었다. 그 다음, 이 화합물을 진한 염산(350mL)과 물 350mL의 혼합물에 용해시켰다. 온도계를 상기 용액 중에 배치하고, 반응 플라스크를 아세톤/드라이아이스 욕에 담갔다. 상기 반응 혼합물을 교반하면서 5℃ 이하로 냉각시켰다. 냉각시킨 아질산나트륨 용액(물 250mL 중의 100g, 1.440mol)을 상기 반응 혼합물에 천천히 첨가(주사기를 사용하여 1회에 3-5mL씩)하였다. 온도를 10℃ 이상으로 올라가지 않도록 하였다.

<161> 요오드화칼륨 용액(물 250mL 중의 228g, 1.73mol)을 서서히 첨가하였다(5-10mL 분액으로). 상기 반응 혼합물을 실온에서 2 - 3시간 동안 교반하였다. 그 다음, 반응 용기에 공기 콘덴서를 장착하고, 반응 혼합물을 기체(질소) 발생이 중단될 때까지 조심스럽게 가열(오일 욕의 최대 온도 약 100℃)하였다. 그 다음, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 유기층을 수층으로부터 분리하고, 수층을 디클로로메탄으로 세척하였다(500mL × 4회). 유기층과 디클로로메탄 추출액을 합하여 과량의 나트륨 메타바이설파이트(sodium metabisulphite) 용액으로 세척하였다. 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고 여과한 다음, 감압 회전 증발기를 사용하여 용매를 제거하였다. 그 다음, 조질의 오일상 생성물을 진공하 증류하여 무색 액체 4-sec-부틸-1-요오드벤젠(245g, 70%)을 수득하였다.

<162> 기계적 교반기, 콘텐서, 질소 주입구 및 방출구가 장치된 3L 용량의 반응 용기에 4-sec-부틸-1-요오드벤젠(240g, 0.916mol), 디페닐아민(153.2g, 1.58mol), 나트륨 t-부톡사이드(273.2g, 2.84mol), 팔라듐 아세테이트(3.81g, 0.0170mol), 트리-o-톨릴포스핀(10.32g, 0.034mol) 및 톨루엔 2L를 넣었다. 이 반응 혼합물을 실온에서 교반하면서 용기에 20분 동안 질소를 불어넣었다. 이 반응 혼합물을 가열하고, 오일 욕 온도를 140℃로 유지하면서 질소압하에서 24시간 동안 교반과 함께 환류시켰다.

<163> 그 다음, 반응 혼합물을 냉각시키고, 2M 염산 1 L를 부어 반응을 급냉시켰다. 유기층을 수층으로부터 분리하고, 셀라이트를 통과시켰다. 그 다음, 용액을 농축하고, 질소압하에서 70-230메쉬의 실리카겔로 충전된 유리 컬럼(직경 6cm, 길이 약 70cm)에 헥산을 용출 용매로 사용하여 통과시켰다. 용출액에서 용매를 제거하여 오일상의 생성물을 수득하고, 여기에 소량의 메탄올을 가하여 백색 고체로 결정화하였다. 그 다음, 고체를 이소프로판올

로부터 재결정하여 백색 결정의 N,N-디페닐-4-*sec*-부틸페닐아민(101g, 37%)을 수득하였다.

<164> 자석 교반기, 등압 적하 깔때기 및 질소 주입구/방출구가 장치된 1L 용량의 3구 플라스크에 N,N-디페닐-4-*sec*-부틸페닐아민(29g, 0.096mol, HPLC 분석에 의해 100% 순수한 것으로 확인됨) 및 무수 DMF 350mL를 넣었다. 냉각된 무수 DMF(100mL)에 용해된 N-브로모석신이미드(34.18g, 0.182mol)를 -10℃ 내지 0℃에서 신속하게 교반하면서 상기 반응 혼합물에 약 20분 동안에 첨가하였다.

<165> 상기 혼합물을 실온까지 가온한 다음, 신속하게 교반하면서 에탄올/물 3:1 혼합 용매 2L에 적가하였다. 침전된 백색 고체를 여과하고, 이소프로판올로 재결정하여 백색 고체 상태의 비스(4-브로모페닐)-4-*sec*-부틸페닐아민(23.5g, 53%)을 수득하였다.

<166> **실시예 4**

<167> **4,7-디브로모-2,1,3-벤조티아디아졸의 합성**

<168> 브롬산(48% 수용액, 500mL) 중의 2,1,3-벤조티아디아졸(100g, 0.74mol)의 현탁액을 100℃까지 가열하였다. 30분 후에, 브롬(120mL, 4.68mol)을 적가하고, 상기 현탁액을 100℃에서 24시간 동안 추가로 교반하였다. 조질의 혼합물을 격렬하게 교반된 빙수에 부어 반응을 중단시켰다. 30분 동안 더 교반하고, 여액을 나트륨 티오설페이트로 세척하고(20% 용액, 400mL × 2회), 톨루엔(1.5L)에 용해시켰다. 상기 용액을 목탄(charcoal, 1g)으로 2회 처리하고, 100℃에서 2시간 동안 가열하였다. 활성탄을 제거한 다음, 고체가 나타날 때까지 용액을 농축하였다. 상기 혼합물에 메탄올을 가하고, 방치하여 재결정화하여, 105g, 49%의 생성물을 수득하였다.

<169> **실시예 5**

<170> **화학식 XXXII에 따르는 중합체(중합도 약 10)의 합성**

<171> 전기 기계적 교반기에 부착된 유리 교반 막대, 테프론 교반 날개, 환류 콘텐서(질소 라인에 연결됨)가 장치된 2L 용량의 반응 용기에 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플루오렌(50.5610g, 95.33mmol), 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플루오렌(41.7812g, 76.18mmol), 비스(4-브로모페닐)-4-*sec*-부틸페닐아민(8.7560g, 19.08mmol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 300mg 및 톨루엔 950mL를 넣었다. 이 혼합물을 실온에서 10분 동안 교반하였다.

<172> 테트라에틸렌암모늄 하이드록사이드(320, 20% 중량/부피)를 상기 혼합물에 첨가하고, 실온에서 질소 기류하에 20분 동안 교반하였다.

<173> 상기 반응 혼합물을 가열하여 질소압하에서 교반하면서(교반 속도 2 내지 3) 18시간 이상(보통 밤새도록) 환류하였다.

<174> 브로모벤젠(10mL)을 첨가한 다음, 상기 반응 혼합물을 2시간 더 환류하면서 교반한 후에, 페닐붕소산(11g)을 첨가하고, 추가로 2시간 더 교반하였다.

<175> 상기 혼합물을 실온까지 냉각시킨 다음, 메탄올 4L에 부어 중합체를 침전시켰다. 중합체/메탄올 혼합물을 여과하고, 분리된 중합체를 톨루엔 용액으로부터 메탄올 용액에 부어 다시 침전시키고, 진공 건조하여 약 55g를 수득하였다.

<176> 상기 방법으로 수득한 중합체의 분자량의 최고값은 180,000이었다. 분자량은 LC1120 이소크래틱(isocratic) 펌프 및 ERC-7515A 굴절률 검출기가 결합되어 있는 폴리머 랩스 GPC 시스템(Polymer Labs GPC system)으로 측정하였다. 사용한 용매는 THF, 유동 속도는 1mL/min, 온도는 35℃로 조절하였다. 컬럼의 타입은 PL 600-500,000 폴리스티렌 표준물질을 사용하여 보정된 PL 혼합물(2, 30cm) 타입이었다.

<177> **실시예 6**

<178> **화학식 XXXII를 갖는 중합체와 발광 재료의 혼합물의 합성**

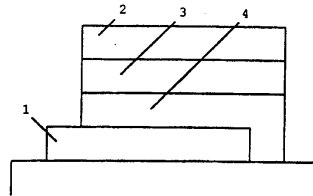
<179> 화학식 XXXII의 중합체(60g)와 화학식 XXXVI(w = y)의 중합체(2.37g)를 자석 교반기, 질소 기체에 연결된 환류 콘텐서가 장치된 5L 용량의 둥근 바닥 플라스크에 넣었다. 그 다음, 상기 중합체 혼합물을 약 3.5L의 톨루엔에 65℃, 질소압하에서 교반하여 용해시켰다. 완전히 용해되었을 때, 상기 중합체 용액을 실온으로 냉각시켰다. 그 후에, 점성의 용액을 신속하게 교반되는 과량의 메탄올(4 X 4 L)에 적가하였다. 그 다음, 침전된 중합체를 여과하고, 진공하에서 중량이 일정해질 때까지 건조하였다. 최종 수득량은 정량적, 즉 62.37g이었다.

### 도면의 간단한 설명

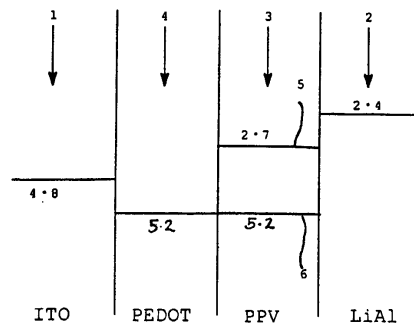
- <141> 도 1은 일반적인 장치의 구조도를 나타낸 것이다.  
 <142> 도 2는 도 1에 따르는 장치의 에너지 준위를 나타낸 것이다.

### 도면

도면1



도면2



|                |                                                                                                                                                                                                                                                               |         |            |
|----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 专利名称(译)        | 有机聚合物和光学器件以及含有它们的电致发光器件                                                                                                                                                                                                                                       |         |            |
| 公开(公告)号        | <a href="#">KR100835128B1</a>                                                                                                                                                                                                                                 | 公开(公告)日 | 2008-06-05 |
| 申请号            | KR1020017011613                                                                                                                                                                                                                                               | 申请日     | 2000-03-13 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 住友化学有限公司<br>另一位家长住友化学有限公司是分租                                                                                                                                                                                                                                  |         |            |
| 申请(专利权)人(译)    | 住友化学 (株) 制                                                                                                                                                                                                                                                    |         |            |
| 当前申请(专利权)人(译)  | 住友化学 (株) 制                                                                                                                                                                                                                                                    |         |            |
| [标]发明人         | TOWNS CARLROBERT<br>타운스칼로버트<br>ODELL RICHARD<br>오델리차드<br>OCONNOR STEPHENJOHNMARTIN<br>오커너스티븐존마틴                                                                                                                                                               |         |            |
| 发明人            | 타운스칼로버트<br>오'델리차드<br>오'커너스티븐존마틴                                                                                                                                                                                                                               |         |            |
| IPC分类号         | C09K11/06 H01L51/50 H05B33/10 H05B33/14                                                                                                                                                                                                                       |         |            |
| CPC分类号         | C09K11/06 H01L51/0035 H01L51/0043 H01L51/5004 H01L51/5012 H05B33/14 C08G73/0266<br>C09K2211/1433 C09K2211/1425 Y10S428/917 C08G2261/3142 C08G2261/3162 C08G2261/3246<br>H01L51/0003 H01L51/0039 H01L51/5024 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L2251/5384 H01L51/5088 |         |            |
| 优先权            | PCT/GB1999/000741 1999-03-12 WO                                                                                                                                                                                                                               |         |            |
| 其他公开文献         | KR1020010110661A                                                                                                                                                                                                                                              |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a>                                                                                                                                                                                                                                     |         |            |

#### 摘要(译)

一种有机聚合物，沿聚合物主链的长度具有多个区域，并且包括以下中的两个或更多个第一区域，用于传输负电荷载流子并具有由第一LUMO能级和第一HOMO能级限定的第一带隙；第二区域，用于传输正电荷载流子，并具有由第二LUMO能级和第二HOMO能级限定的第二带隙；第三区域，用于接收和组合正负载流子以产生光并具有由第三LUMO能级和第三HOMO能级限定的第三带隙，其中每个区域包含一种或多种单体以及所述单体的数量和排列。选择有机聚合物，使第一，第二和第三带隙在聚合物中彼此不同。©KIPO & WIPO 2007

