(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(51) 。Int. Cl. [7]
C09K 11/06

(11) 공개번호 특2001-0110661
(43) 공개일자 2001년12월13일

(21) 출원번호 10-2001-7011613
(22) 출원일자 2001년09월12일
번역문 제출일자 2001년09월12일
(86) 국제출원번호 PCT/GB2000/00911
(86) 국제출원출원일자 2000년03월13일
(87) 국제공개번호 WO 2000/55927
(87) 국제공개일자 2000년09월21일

(81) 지정국 국내특허 : 알바니아, 아르메니아, 오스트리아, 오스트레일리아, 아제르바이잔, 보스니아-헤르체고비나, 바베이도스, 불가리아, 브라질, 벨라루스, 캐나다, 스위스, 리히텐슈타인, 중국, 쿠바, 체코, 독일, 덴마크, 에스토니아, 스페인, 핀랜드, 영국, 그루지야, 헝가리, 이스라엘, 아이슬란드, 일본, 케냐, 키르기즈, 북한, 대한민국, 카자흐스탄, 세인트루시아, 스리랑카, 라이베리아, 레소토, 리투아니아, 룩셈부르크, 라트비아, 몰도바, 마다가스카르, 마케도니아, 몽고, 말라위, 멕시코, 노르웨이, 뉴질랜드, 슬로베니아, 슬로바키아, 타지키스탄, 투르크메니스탄, 터어키, 트리니다드토바고, 우크라이나, 우간다, 미국, 우즈베키스탄, 베트남, 폴란드, 포르투칼, 루마니아, 러시아, 수단, 스웨덴, 싱가포르, 아랍에미리트, 안티구아바부다, 코스타리카, 도미니카연방, 모로코, 남아프리카, 모잠비크, 그레나다, 유고슬라비아, 가나, 감비아, 크로아티아, 인도네시아, 인도, 시에라리온, 짐바브웨,
AP ARIPO특허: 케냐, 레소토, 말라위, 수단, 스와질랜드, 우간다, 시에라리온, 가나, 감비아, 짐바브웨,
EA 유라시아특허: 아르메니아, 아제르바이잔, 벨라루스, 키르기즈, 카자흐스탄, 몰도바, 러시아, 타지키스탄, 투르크메니스탄,
EP 유럽특허: 오스트리아, 벨기에, 스위스, 리히텐슈타인, 독일, 덴마크, 스페인, 프랑스, 영국, 그리스, 아일랜드, 이탈리아, 룩셈부르크, 모나코, 네덜란드, 포르투칼, 스웨덴, 핀랜드, 사이프러스,
OA OAPI특허: 부르키나파소, 베넹, 중앙아프리카, 콩고, 코트디브와르, 카메룬, 가봉, 기네, 말리, 모리타니, 니제르, 세네갈, 차드, 토고, 기네비쏘,

(30) 우선권주장 PCT/GB99/00741 1999년03월12일 영국(GB)

(71) 출원인 캠브리지 디스플레이 테크놀로지 리미티드
고스티치 엠.
영국 캠브리지 씨비3 0에이치제이 메딩레이 로드 메딩레이 라이즈 그리니치 하우스

(72) 발명자 타운스칼로버트
영국에섹스씨엠248에이치비스탠스테드마운트피칫크라운코티지실버스트리트193
오'델리차드
영국하츠에스지51유엘히친비어톤그린53
오'커너스티븐존마틴
영국캠브리지씨비17티에프글리브로드21

(74) 대리인 박장원

심사청구 : 없음

(54) 폴리머, 그의 제조 방법 및 용도

요약

다음 중에서, 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 전달하는 제 2 대역; 및 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 전달하는 제 1 대역; 및 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 3 밴드갭을 갖고, 양전하 및 음전하 담체를 수용하고 혼합하여 빛을 발생시키는 제 3 대역 중에서 두 가지 이상을 포함하며, 여기서, 각 대역은 하나 이상의 모노머를 포함하고, 상기 유기 폴리머내에서 모노머의 배열 및 양은 제 1, 제 2 및 제 3의 밴드갭이 폴리머내에서 서로 각각 구별될 수 있도록 선택된 것이며, 폴리머 백본 길이를 따라 다수의 대역을 갖는 유기 폴리머.

색인어
폴리머, 그의 제조 방법 및 용도

명세서

기술분야

본 발명은 유기 폴리머 및 광학 장치에서와 같은 그의 용도, 그러한 폴리머의 제조 방법에 관한 것이다.

배경기술

광 방출을 위한 유기물질을 이용하는 유기 전기발광(electroluminescent) 장치는 잘 알려져 있다. 예컨대, WO90/13148은 전극 사이에 위치한 적어도 하나의 컨쥬게이트 폴리머를 포함하는 폴리머 필름을 함유하는 반도체 층을 포함하는 장치를 개시하고 있다. 이 건의 경우 폴리머 필름은 필름 전자와 정공(holes)이 그 안으로 주입될 경우 빛을 방출할 수 있는 폴리(파라-페닐렌 비닐렌) (PPV) 필름을 포함한다. 정공 또는 전자를 방출층에 전달할 수 있는 다른 폴리머 층들도 이러한 장치내로 도입될 수 있다.

유기 반도체에 있어서, 중요한 특성은 전자 에너지 준위의 진공 수준, 특히 " 최고준위 점유 분자 오비탈 (HOMO: highest occupied molecular orbital)" 과 " 최저준위 비점유 분자 오비탈 (LUMO: lowest unoccupied molecular orbital)" 준위와관련하여 측정되는 결합 에너지이다. 이들은 광방출 측정 및 특히 산화환원을 위한 전기화학 포텐셜의 측정으로부터 평가될 수 있다. 이러한 에너지는 여러가지 변수, 예컨대 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.

도 1은 빛을 방출시키기 위한 전형적인 장치의 단면도이다. 도 2는 상기 장치에 있어서의 에너지 준위를 나타낸다. 양극 1은 4.8 전자 볼트의 일기능을 갖는 투명한 인듐-주석 옥사이드 (ITO: indium-tin oxide) 층이다. 음극 2는 2.4

전자 볼트의 일기능을 갖는 LiAl 층이다. 이들 전극 사이에는 약 2.7 전자 볼트에서 LUMO 에너지 준위 5를 갖고, 약 5.2 전자 볼트에서 HOMO 에너지 준위 6을 갖는 PPV로 된 광 방출층 3이 있다. 장치 내로 유입된 정공과 전자는 PPV 층 중에서 방사하는 방식으로 재결합한다. 이 장치의 중요한 특성은 폴리에틸렌 디옥시티오펜 (PEDOT)의 정공전달층 4이다. 이 폴리머는 EP 0686662호에 설명되어 있다. 이것은 약 5.2 전자 볼트 정도의 에너지 준위를 제공하는데, 이것은 ITO로부터 주입된 정공이 PPV에서 HOMO 준위에 도달하는 것을 도와준다.

여기서, 에너지 준위, 일 기능 등에 관련된 값들은 일반적으로 절대적이라기 보다는 설명을 위한 것임을 이해하여야 한다. 예컨대, ITO의 일기능은 크게 변할 수 있다. 이러한 값이 ITO 분해 공정과 이력에 의존할 수 있음은 잘 알려져 있다.

공지의 장치 구조 역시 음극 2와 광 방출층 3 사이에 위치한 전자전달층을 가질 수 있다. 이것은 음극으로부터 주입된 전자가 광 방출층을 구성하는 물질의 LUMO 준위에 도달하는 것을 돕는 에너지 준위를 제공한다. 적절하게는, 전자 전달층은 음극의 LUMO 에너지 준위와 광 방출층의 에너지 준위 사이의 LUMO 에너지 준위를 갖거나, 광 방출층의 LUMO 에너지 준위에 맞추는 것이 좋다.

다층 장치와 연관된 한가지 단점은 층들이 용액으로부터 증착될 경우 다음 층이 증착될 때 한 층이 파괴되는 것을 피하기 어렵고, 이러한 문제는, 층간 경계의 수가 증가함에 따라 그 사이에 낀 물질이나 공극이 증가할수록 더 커질 수 있다.

Appl. Phys. Lett. 51, 913-915(1987)은 유기 박막 전기발광에 관한 것이다. 이 문헌에 개시된 장치는 방향족 디아민의 정공-전달층과 8-히드록시퀴놀린 알루미늄의 방출층으로 구성되어 있다. ITO가 정공-주입 전극으로 사용되고 있고 마그네슘-은 합금은 전자-주입 전극으로 사용되고 있다.

Nature, 397, 121-128(1999)에 개시되어 있는 바와 같이, TPD는 정공 전달층으로 사용된다. 그러나, 이 분자 소재는 장치 중 작은 분자층을 이용한다는 문제점을 갖는다. 마찬가지로, 이 문헌은 BPD를 공지의 전자전달층으로서 기재하고 있다. 이것 역시, 전기발광 장치 중 폴리머층과 비교되는 작은 분자층을 사용하는 것과 관련한 불리한 장치적 특징을 갖는다.

광방출 장치에서 범용 폴리머를 사용하는 것, 특히 전하전달 소재로 사용하는 것은 매우 흥미로운 일이다. 폴리머들은 탁월한 장치적 특성을 보여준다. 이러한 장치적 특성으로 효율, 가공성 및 장치의 수명이 우수하다는 점들을 들 수 있다.

폴리(아릴아민)은 미국특허 5,728,801호에서 광방출 다이오드에 있어서 유용한 전하 전달층으로서 기재되어 있다. 이 문헌은 또한 전하전달 소재, 특히, 양전하 전달 소재로서 트리아릴아민을 들고 있는데, 이는, 이들이 대응하는 래디칼 양이온으로 쉽게 산화되기 때문이다. 필름 형태에 이러한 폴리머들의 이용가능성의 유용성이 이 문헌에 논의되어 있다.

상기 내용에 비추어 볼 때, 광방출 장치의 구조를 단순화시킬 필요성은 여전히 남아있는 셈이어서, 그에 따라 제조공정의 단순화와 제조경비의 절감 필요성도 여전히 있다.

발명의 상세한 설명

본 발명은 양전하 담체를 주입하기 위한 제 1 전하 담체 주입층, 음전하 담체를 주입하기 위한 제 2 전하 담체 주입층 및, 전하 담체와 주입층 사이에 위치하면서 제 1 전하 담체 주입 층으로부터 양전하 담체를 수용하기 위한 제 1 성분, 제 2 전하 담체 주입 층으로부터 음전하 담체를 수용하기 위한 제 2 성분, 및 제 1 성분과 제 2 성분으로부터의 전하 담체들을 수용 및 결합시키는 제 3의 유기 광방출 성분의 혼합물을 포함하여 빛을 방출시키는 광 방출층을 포함하여 이루어지는 전기발광 장치를 제공한다.

방출층의 2 가지 이상의 성분이 단일 분자의 작용기성 화학 단위(units) 또는 부분(moieties)들로서 제공될 수 있다.

그 이상의 층 성분이 상기 단일 분자와 물리적으로 혼합된 하나 이상의 추가의 분자에 의해 제공될 수 있다. 단일 분자가 두 개 이상의 성분을 제공하면 이 성분들은 코폴리머로서 결합될 수 있다 (예컨대, 주쇄, 측쇄에서 블록 또는 랜덤 형태로). 단일 분자가 두개 이상의 성분을 제공하면, 그 분자에 의해 제공된 성분들은 제 3 성분을 포함하는 것이 바람직하다. 적합한 제 3 성분과 적어도 하나의 제 1 및 제 2 성분들이 코폴리머로서 제공된다.

본 발명의 첫번째 측면에 따라, 폴리머 백본의 길이를 따라 복수 대역을 가지면서, 다음 중 두 가지 이상을 함유하는 유기 폴리머가 제공되며:

(i) 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 가지며, 음전하 담체를 전달하기 위한 제 1 대역; 및

(ii) 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 가지며, 양전하 담체를 전달하기 위한 제 2 대역; 및

(iii) 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 3 밴드갭을 가지며, 양전하와 음전하를 수용 및 결합시켜 빛을 발생시키는 제 3 대역: 이때, 각각의 대역은 하나 이상의 모노머를 포함하며, 유기 폴리머 중의 모노머의 양과 배열은 제 1, 제 2 및 제 3 밴드갭이 폴리머내에서 서로 구별될 수 있도록 하는 방식으로 선택된다.

본 발명에 의해 제공되는 유기 폴리머는 총 층수와, 발광 장치에 요구되는 폴리머 성분들의 총수를 줄임으로써 종래기술의 문제점을 해소한다. 본 발명의 폴리머는 음전하 전달 물질로서 작용하는 폴리머, 양전하 전달 물질로서 작용하는 폴리머, 및 발광 물질로서 작용하는 폴리머를 별도로 요구하지 않으면서, 이들의 두 가지 이상의 역할을 동시에 할 수 있는 것이다. 각각의 상이하게 기능하는 성분들이 장치 중에서 별도의 층을 형성하는 경우에는 층수가 감소된다. 상이한 기능을 하는 성분들이 단일층에 혼합될 경우, 혼합에 필요한 성분들의 수가 감소된다.

본 발명의 목적상, " 대역(region)" 이라는 용어는 폴리머 사슬의 분절 (segment) 또는 일부 (portion)을 의미하는 것으로 해석될 수 있다. " 대역" 은 하나 이상의 모노머를 함유할 수 있다. 바람직하게는 각각의 " 대역" 이 2 개 이상의 모노머를 포함하는 것이 좋다. " 대역" 이 두 가지 이상의 상이한 모노머 종류를 포함할 경우, 대역은 두 가지 이하의 상이한 모노머로 구성되는 것이, 특히, 단일 종류의 모노머 또는 2 가지 상이한 모노머 종류로 구성되는 것이 바람직하다.

제 1 LUMO 준위는 제 3 대역일 수도 있고 아닐 수도 있는 방출 물질에 제 1 대역이 음전하 담체를 전달할 수 있도록 하는 수준이어야 한다. 제 2 HOMO 준위는 제 3 대역일 수도 있고 아닐 수도 있는 방출 물질에 제 2 대역이 양전하 담체를 전달할 수 있도록 하는 수준이어야 한다. 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위는 빛 생성을 위해 양전하 담체와 음전하 담체가 제 3 대역에서 수용 및 결합될 때 소망되는 파장의 빛이 방출이 되도록 하는 수준이어야 한다.

제 3 대역에 대해 언급하자면, 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위 사이의 에너지 차이가 제 3 밴드갭을 정의한다.

본 발명에 따른 폴리머의 요구되는 기능성은 여러가지 방식으로 특징지어질 수 있다.

첫번째, 단순한 수준에서, 폴리머가 장치내의 적정 위치에 도입될 때 전기발광 장치가 발광할 수 있다면, 이 폴리머는 요구되는 기능을 발휘할 것이다. 예컨대, 후술될 제 1 서브-그룹에 속하는 폴리머는 전기발광 장치 중의 양극과 음극 사이의 층으로서 도입될 때 발광한다. 후술될 제 2 서브-그룹에 따른 폴리머가 적절한 발광 소재와 혼합되어 이 혼합물이 전기발광 장치 중의 양극과 음극 사이의 층으로서 도입될 경우, 전기발광 장치가 발광될 수 있을 것이다. 후술될 제 3 서브-그룹에 속하는 폴리머가 적절한 정공 전달 소재와 혼합되어 전기발광 장치중 양극과 음극 사이의 층으로서 도입될 경우, 전기발광 장치가 발광할 것이다. 전기발광 장치는 후술될 제 4 서브-그룹에 속하는 폴리머가 적절한 전자 전달 물질과 혼합되어 전기발광 장치 중의 양극과 음극 사이에 층으로서 도입될 때 발광될 수 있을 것이다.

어떠한 특정 이론에 구애됨이 없이, 본 발명에 따른 폴리머의 요구되는 기능성을 특징짓는 또다른 방법은 그 폴리머의 순환전압전류도(cyclic voltamagram)를 분석함으로 수행하는 것이다. 순환전압전류도(C-V 그래프)는 당업자에게 어느 정도까지는 단일 폴리머가 2 개 이상의 상이한 산화 포텐셜을 갖음을 가리켜준다. 대개, 이러한 상이한 산화 포텐셜은 C-V 곡선에서 그 자체로 피크 또는 골(trough)로 표시되게 될 것이다. 피크 또는 골은 날카롭게 뾰족한 것으로부터 깊이가 얕은 것까지 다양하다. 단일 폴리머 중 상이한 산화 포텐셜의 존재여부는 당업자에게 그 폴리머가 전기발광 장치 중에서 전하 전달 및 전하 결합과 관련한 여러가지 기능을 가질 수 있는가를 알려준다. 따라서, 어떤 폴리머의 순환전압전류도는 어떤 폴리머가 전기발광 장치에 적절하게 도입될 경우, 그 폴리머가 전기적으로 어떻게 기능할지를 예측할 수 있는 방법이 된다. 전기발광 장치 중에서 폴리머의 실질적인 전기적 기능은, 폴리머의 층이 장치의 어느 부분에 도입되었는지 등의 변수에 따라 달라질 수 있다.

본 발명의 두번째 측면에 따라, 본 발명에 따른 폴리머의 적어도 한 층을 포함하는 전기발광 장치가 제공된다.

본 발명에 따른 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 경우, 제 1 대역은 제 1 대역의 제 1 LUMO 준위 또는 일 기능이 발광 소재의 LUMO 준위와 가능한 근접하게 매치시키도록 선택되어야 한다. 발광 소재는 별도의 폴리머이거나, 또는 제 1 대역을 포함하는 폴리머 중에 제 3 대역일 수 있다. 본 발명에 따른 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 경우, 제 2 대역의 제 2 LUMO 준위 또는 일 기능이 발광 소재의 LUMO 준위와 가능한 근접하게 매치시키도록 선택되어야 한다. 제 3 대역은, 제 3 대역을 포함하는 폴리머를 전기발광 장치에 사용할 때, 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위에 의해 정의되는 밴드갭은 양전하 담체와 음전하 담체가 제 3 대역 중에서 결합되어 빛을 방출할 경우에 목적하는 파장의 빛이 방출되도록 하는 방식으로 선택되어야 한다.

첨부된 도면을 참조로 본 발명을 더욱 상세히 설명할 수 있으며, 도 1은 일반적인 장치의 구조도이고, 도 2는 도 1의 장치의 에너지 준위를 나타낸 것이다.

본 발명에서, 제 1, 제 2 및 제 3 대역의 조성물은 장치 내에서 서로 독립적인 기능을 하기 때문에 개별적으로 고려할 수 있다.

본 발명의 첫번째 측면에서, 제 1 대역은 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제 1 모노머를 포함한다. 제 1 대역의 성분들은 적절한 제 1 LUMO 준위를 선택할 수 있도록 선택된다. 이 선택은 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 때 특이적인 시스템이다. 이 선택은 제 3 LUMO 준위일 수 있거나 그렇지 않은, 방출 소재의 LUMO 준위와 음극의 일 기능에 따라 달라진다. 바람직하게는, 제 1 LUMO 준위는 방출 소재의 LUMO 준위와 음극의 일 기능 사이에 존재하는 에너지 준위이거나, 또는 방출 소재의 LUMO 준위에 매치되는 것이 좋다. 이 목적을 위해, 바람직하게는 제 1 모노머는 치환 또는 비치환된 플루오렌기를 포함하는 것이 바람직하다. 플루오렌의 구조는, 플루오렌 모노머의 특정 사슬 길이, 특히, 사실 길이가 모노머 5개를 초과할 경우, 적절한 음극 및 방출 소재(제 3 대역이거나 아닐 수 있음)와 함께 사용될 경우, 탁월한 전자 전달 특성을 갖기 때문에, 제 1 대역에 포함될 경우 플루오렌기는 특히 유리하다.

특히, 제 1 모노머는 2,7-링크된 디알킬 플루오렌기를 포함한다. 2,7-링크된 플루오렌기가 바람직하다. 더욱 바람직하게는, 2,7-링크된 디알킬 플루오렌기가 9,9-디옥틸 플루오렌인 것이 좋다. 9,9-이치환, 바람직하게는, 디알킬 또는 디아릴, 플루오렌기는 합성이 간편하므로 특히 바람직하다. 옥틸 치환기는 폴리머의 용해도를 증진시켜 주므로 바람직하다.

본 발명의 두 번째 측면에서, 제 2 대역은 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제 2 모노머를 포함한다. 바람직하게는, 제 2 모노머는 다음 일반식, $\dagger Ar_3N \dagger$ (여기서, 각각의 Ar은 같거나 다르고, 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기임)을 갖는 트리아릴아민 단위를 포함하는 것이 좋다. 제 2 모노머에서 트리아릴아민 단위가 존재하는 것이 바람직한데 이는, 트리아릴아민의 낮은 산화 포텐셜이 이들을 양전하 전달 물질로서 특히 적합하게 만들어주기 때문이다.

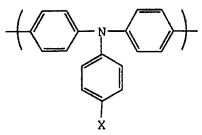
제 2 대역의 성분들은 적절한 제 2 HOMO 준위를 선택하도록 선택된다. 이러한 선택은 전기발광 장치에서 폴리머가 사용될 때 특이적인 시스템이다. 이 선택은 제 3 HOMO 준위일수 있거나 그렇지 않은, 방출 소재의 HOMO 준위와 양극의 일 기능에 따라 달라진다. 바람직하게는, 제 2 HOMO 준위가 방출 소재의 HOMO 준위와 양극 의 일 기능 사이에 놓여있는 에너지 준위이거나 또는 방출 소재의 HOMO 준위에 배치되는 것이 좋다.

적어도 하나의 Ar이 치환 또는 비치환된 페닐기인 것이 바람직하다. 이것은, 제 3 대역이거나 아닐 수 있는 적절한 방출 소재와 폴리머를 함께 사용할 경우, 제 2 대역에서 우수한 정공 전달 성능을 나타내기 때문이다.

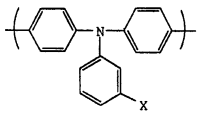
적어도 하나의 Ar은 폴리머 백본에 부속된 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족 부사슬기(side group)인 것도 바람직하다. 바람직한 부사슬기는 비치환된 페닐 또는 모노치환되거나, 또는 3,5-디-치환된 페닐기를 포함하는 것이다. 부사슬기가 치환기인 경우에는, 바람직한 치환기는 치환 또는 비치환된 알킬, 퍼플루오로알킬, 알킬아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 아릴, 알콕시, 티오알킬 또는 시아노기이다. 이는, 이들이 제 2 HOMO 준위의 선택에 도움을 주며, 및/또는 폴리머의 용해도를 증진시키는 것을 돕는 데 적합하기 때문이다.

트리아릴아민 유닛 중에 포함된 적절한 기를 다음의 화학식 I, II, III, IV, V 및 VI에 예시하였다;

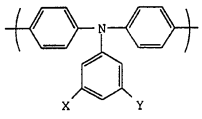
화학식 I



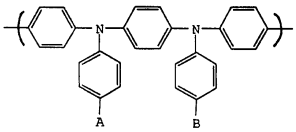
화학식 II



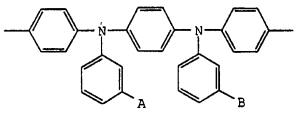
화학식 III



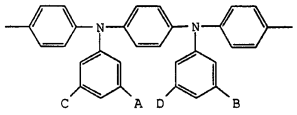
화학식 IV



화학식 V



화학식 VI



화학식 I, II 및 III에서, X와 Y는 같거나 다른 치환기이다. 화학식 IV, V 및 VI에서, A, B, C 및 D는 같거나 다른 치환기이다. 상기한 바와 같이, X, Y, A, B, C, 및 D 중 하나 또는 그 이상이 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 및 아릴알킬기 중에서 독립적으로 선택되는 것이 바람직하다. X, Y, A, B, C 및 D 중 하나 이상은 수소일 수도 있다.

X, Y, A, B, C 및 D 중 하나 이상이 독립적으로 비치환된 이소부틸기, n-알킬, n-알콕시 또는 트리플루오로메틸기인 것이 바람직한데, 이는, 이들이 제 2 HOMO 준위의 선택에 도움을 주고 및/또는 폴리머의 용해도를 증진시키는 것을 돕는 데 적합하기 때문이다.

실질상의 관점에서 볼 때, X, Y; 또는 A, B, C 및 D는 서로 동일한 것이 바람직하다.

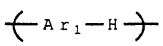
본 발명의 세번째 측면에서, 제 3 대역은 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제 3 모노머를 포함한다.

후술되는 본 발명의 제 3 대역의 제 3 구체예는 장치 구조내에 사용될 때 폴리머로부터 방출되는 상이한 파장의 빛을 각각 결과시킬 것이다. 주로, 구체예 1은 " 적색" 광 방출에 관한 것이나, 이에 한정되지 않는다. 본 발명의 목적상, " 적색" 광선은 600 nm 내지 700 nm의 파장 범위를 갖는 빛으로 정의될 수 있다. 주로, 구체예 2는, " 녹색" 광 방출에 관한 것이나 이에 한정되지 않는다. 본 발명의 목적상, " 녹색" 광선은 500 nm 내지 600 nm의 파장 범위를 갖는 빛으로 정의될 수 있다. 주로, 구체예 3은 " 청색" 광 방출에 관한 것이나 이에 한정되지 않는다. 본 발명의 목적상, " 청색" 광선은 400 nm 내지 500 nm의 파장 범위를 갖는 빛으로 정의될 수 있다.

본 발명의 세번째 측면에 따른 제 1 구체예에서, 제 3 모노머는 벤젠 또는 티오펜기에 퓨즈드된 방향족 또는 헤테로방향족 디아진기인 H 기를 포함한다.

특히, 제 1 구체예에 따른 제 3 모노머는 다음의 화학식 IX로 표시되는 기를 포함한다:

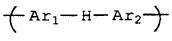
화학식 IX



식 중, Ar_1은 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기이다.

더욱 바람직하게는, 제 1 구체예에 따른 제 3 모노머는 다음의 화학식 X로 표히되는 기를 포함한다:

화학식 X

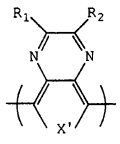


식 중, Ar_2는 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기이고, Ar_1은 상기 화학식 IX에서 정의된 바와 같다.

화학식 X에 있어서, Ar_1 또는 Ar_2는 각각 치환 또는 비치환, 퓨즈드되거나 퓨즈드되지 않은 벤젠, 티오펜, 퓨란, 퀴녹살린, 바이페닐 또는 플루오렌기를 포함하는 것이 바람직한데, 이는, 이 기들이 어느 정도 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위를 선택하기에 적합하기 때문이다. 상기한 바와 같이, 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위는 제 3 대역의 밴드갭을 정의하므로, 전자와 정공이 제 3 대역에서 결합되어 빛을 방출하게 된다.

제 1 구체예의 또 다른 특정예에서, 제 3 모노머는 다음의 화학식 VIII로 표시되는 기를 포함한다:

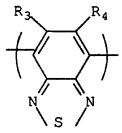
화학식 VIII



식 중, X'은 RC=CR 또는 S이고 R_1과 R_2는 같거나 다르며 각각 치환기이다. 바람직하게는, 각각의 R이 독립적으로 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 또는 아릴알킬인 것이 좋다.

제 1 구체예의 또다른 특정예에서, 제 3 모노머는 다음의 화학식 XI로 표시되는 기를 포함한다:

화학식 XI



식 중, R_3과 R_4는 같거나 다르며 각각 독립적인 치환기이다.

화학식 VIII와 XI가 바람직한데, 이는 이들 작용기들이 소망하는 제 3 LUMO 및 제 3 HOMO 준위를 갖는 제 3 대역을 생성시키기 때문이다.

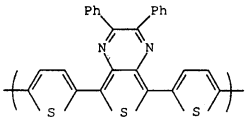
바람직하게는, 하나 이상의 R_1, R_2, R_3 및 R_4가 각각 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 또는 아릴알킬 중에서 선택되는 것이 좋다. 이 기들은 상기 X, A, B, C 및 D와 관련해서 논의된 것과 동일한 이유로 바람직하다.

바람직하게는, 실용상의 이유에서, R_1과 R_2 및 R_3와 R_4가 동일한 것이 좋다. 더욱 바람직하게는, 이들이 모두 동일하고 각각 페닐기인 것이 좋다. 더욱 바람직하게는, R_1과 R_2가 서로 같고 각각 피리딘 또는 퓨란기이며 R_3과 R_4가 서로 동일하고 각각 수소인 것이 좋다.

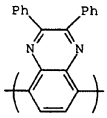
R_3과 R_4가 상이한 경우, R_3은 수소이고 R_4는 알킬기인 것이 바람직하다.

세번째 측면의 제 1 구체예의 제 3 모노머의 특정예로서 다음의 화학식 XIII 내지 XXVI의 기로 표시되는 것들을 들 수 있다:

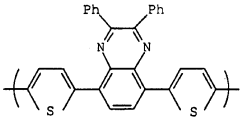
화학식 XIII



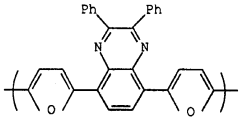
화학식 XIV



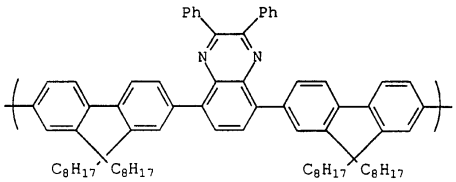
화학식 XV



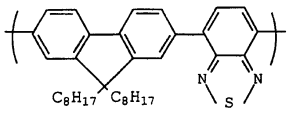
화학식 XVI



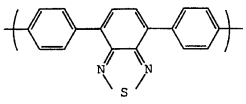
화학식 XVII



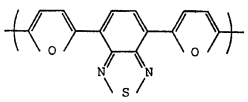
화학식 XVIII



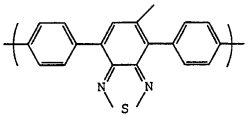
화학식 XIX



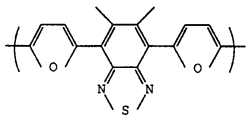
화학식 XX



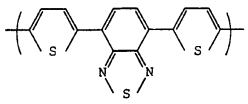
화학식 XXI



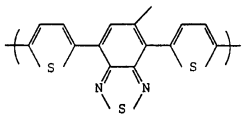
화학식 XXII



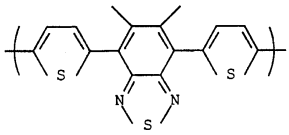
화학식 XXIII



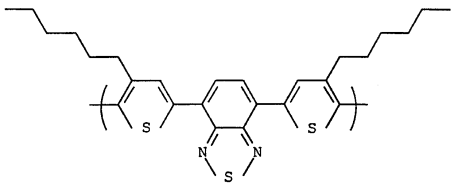
화학식 XXIV



화학식 XXV



화학식 XXVI



상기 제 3 모노머의 하나 이상을 선택하면 상이한 제 3 LUMO 및 제 3 HOMO 준위가 야기될 것이고, 그에 따라 제 3 대역에서 상이한 밴드갭이 결과될 것임을 이해하여야 한다. 이것은 전자와 정공이 빛을 발생시키기 위한 제 3 대역에서 결합될 경우 상이한 파장의 방출을 결과시킬 것이다.

본 발명의 세번째 측면 중 제 2 구체예에서, 제 3 모노머는 트리아릴아민 유닛을 포함한다.

바람직하게는, 제 2 구체예에 따라, 제 3 모노머가 다음 일반식, $\{(-Ar_2N-)-Ar-(-NAr_2-)\}$ (여기서, 각각의 Ar은 같거나 다르고, 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함함)을 갖는 것이 좋다. 적어도 하나의 Ar이 치환 또는 비치환된 아릴기, 특히, 비치환된 페닐기를 포함하는 것이 바람직하다.

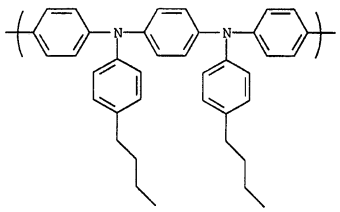
한 가지 측면에서, 적어도 하나의 Ar은 폴리머 백본에 부속된 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족 부사슬기를 포함한다. 바람직한 부사슬기로는 퓨즈드되거나 퓨즈드되지 않은 벤젠, 티오펜, 퓨란, 퀴녹살린, 비페닐 또는 플루오렌기를 들 수 있다.

부사슬기는 추가적으로 비치환된 또는 모노치환 페닐기를 포함하는 것이 바람직하다. 적당한 부사슬기는 앞에서 논의된 것과 같은 이유에서 치환 또는 비치환된 알킬, 과불소화알킬(perfluoroalkyl), 알킬아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 아릴, 알콕시, 티오알킬 또는 시아노기를 포함한다.

세 번째 측면에서 두 번째 구체예에 따르면, 일반적으로 트리아릴아민 단위는 화학식 IV에서 보여준 것과 같은 화학식을 갖는 그룹을 포함할 수 있는데, 여기서 A와 B는 서로 같거나 다르고, 앞에서 정의된 것과 같다.

화학식 IV의 구체적인 예는 다음의 화학식 XXVII에 나타낸 바와 같다:

화학식 XXVII



이러한 기를 포함하는 제 3 모노머는 제 3 LUMO와 제 3 HOMO 준위를 발생시키고, 이에 따라 전자와 정공(hole)이 제 3 대역에서 결합하여 빛을 발생시킬 때, 원하는 파장의 빛이 방출되게 하는 제 3 대역의 밴드갭을 제공하므로 바람직하다.

본 발명의 추가적인 측면에서, 제 1 대역은 추가적인 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제 4 모노머를 포함할 수 있다. 제 4 모노머는 음전하 담체 전달을 향상시키는 기능을 갖는다. 바람직하게는, 추가적인 치환 또는 비치환된 방향족, 또는 헤테로방향족기는 R_3과 R_4가 모두 수소인 일반식 XI을 갖는 기를 포함한다.

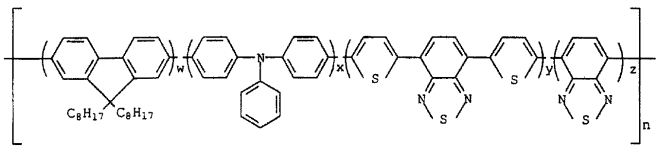
본 발명의 또다른 추가적인 측면에 있어서, 제 2 대역은 추가적으로 제 5 모노머를 포함할 수 있다. 제 5 모노머는, 제 2 모노머와는 다른, 앞에서 정의된 것과 같은 추가적인 제 2 모노머를 포함할 수 있는데, 제 5 모노머의 기능은 제 2 대역의 양전하 담체 전달 특성을 향상시키는 것이다.

본 발명의 첫 번째, 두 번째 및 세 번째 측면과 관련하여 앞에서 논의된 광범위한 그룹의 폴리머에 있어서, 네 가지 서브-그룹의 폴리머가 정의될 수 있다.

제 1 서브-그룹은 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 갖고 음전하 담체를 전달하는 제 1 대역, 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 갖고 양전하 담체를 전달하는 제 2 대역, 및 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위에 의해 정의 되는 제 3 밴드갭을 갖조 양전하와 음전하 담체를 수용하여 결합시켜 빛을 생성시키는 제 3 대역을 포함하는 유기 폴리머로서, 상기 각 대역은 하나 이상의 모노머를 포함하며, 유기 폴리머 내의 모노머의 양과 배열은 제 1, 제 2 및 제 3 밴드갭이 상기 폴리머 내에서 서로 구별되게 하는 것으로 선택된다.

상기 서브-그룹의 구체적인 예는 다음의 화학식 XXVIII에 나타낸 바와 같다:

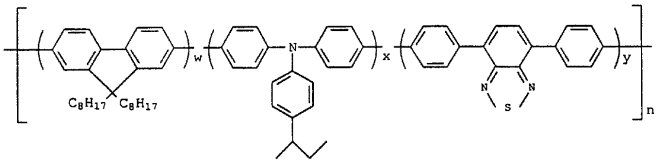
화학식 XXVIII



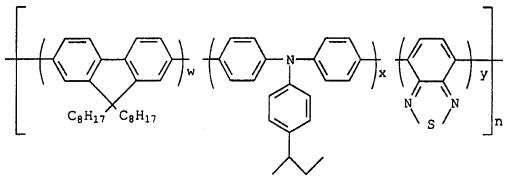
식 중, w + x + y + z = 1이고, w ≥ 0.5이고, 0 ≤ x + y + z ≤ 0.5이고, n ≥ 2이다. 바람직하게는 w는 약 0.5이고, x는 약 0.125이고, y는 약 0.034이고, z는 약 0.341이다. n은 ≥ 5인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 때 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다. 상기 폴리머는 전기발광 장치에 사용될 때 앞에서 정의된 것과 같은 적색광을 방출한다.

상기 서브-그룹의 추가적인 구체예는 다음의 화학식 XXIX 및 XXX에 나타낸 바와 같다:

화학식 XXIX



화학식 XXX

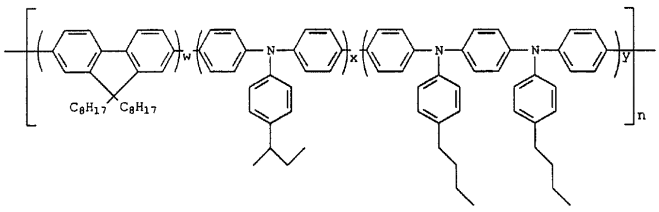


식 중, w + x + y = 1이고, w ≥ 0.5이고, 0 ≤ x + y ≤ 0.5이고, n ≥ 2이다. 상기 화학식 XXIX의 경우, 바람직하게는 w는 약 0.800이고, x는 약 0.171이고, y는 약 0.029이다. n은 ≥ 5 인 것이 바람직하다.

화학식 XXX의 경우, 바람직하게는 w는 약 0.864이고, x는 약 0.108이고, y는 약 0.028이다. 이 값들은 상기 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다. 상기의 폴리머들은 전기발광 장치에 사용될 때 앞에서 정의된 것과 같은 녹색광을 방출한다.

상기 서브-그룹의 또다른 추가적인 구체예는 다음의 화학식 XXXI에 나타낸 바와 같다:

화학식 XXXI

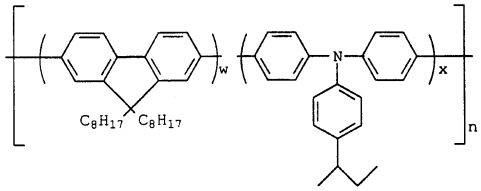


식 중, w + x + y = 1이고, w ≥ 0.5이고, 0 ≤ x + y ≤ 0.5이고, n ≥ 2이다. 바람직하게는, w는 약 0.80이고, x는 약 0.10이고, y가 약 0.10이다. n은 ≥ 5 인 것이 바람직하다. 또한, w가 약 0.85이고, x가 약 0.10이고, y는 약 0.05인 것도 바람직하다. 이 값들은 상기 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다. 상기의 폴리머는 전기발광 장치에 사용될 때 청색광을 방출한다.

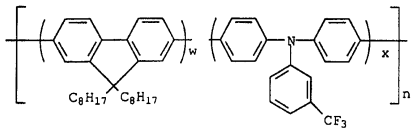
본 발명에 따른 폴리머의 제 2 서브-그룹은 음전하 담체를 전달하며 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 갖는 제 1 대역 및 양전하 담체를 전달하며 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 갖는 제 2 대역을 포함하는 유기 폴리머로서, 상기 각 대역은 하나 이상의 모노머를 포함하며, 유기 폴리머 내의 모노머의 양과 배열은 제 1 및 제 2 밴드갭이 폴리머 내에서 서로 구별되게 하는 방식으로 선택된다.

제 2 서브-그룹에 속하는 폴리머의 구체예는 다음의 화학식 XXXII 또는 XXXIII에 나타낸 바와 같다:

화학식 XXXII



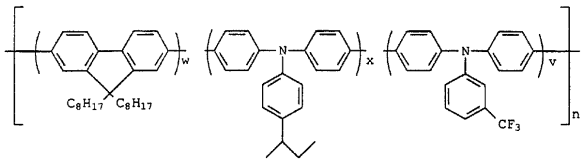
화학식 XXXIII



식 중, w + x = 1이고, w ≥ 0.5이고, x ≤ 0.5이고, n ≥ 2이다. 바람직하게는 w는 약 0.90이고, x는 약 0.10이다. n은 ≥ 5 인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다.

제 2 서브-그룹에 속하는 폴리머의 추가적인 예는 다음의 화학식 XXXIV에 나타낸 바와 같다:

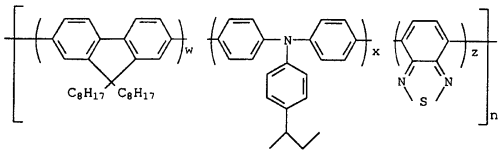
화학식 XXXIV



식 중, w + x + v = 1이고, w ≥ 0.5이고, 0 ≤ x + v ≤ 0.5이고, n ≥ 2이다. 바람직하게는, w가 약 0.50이고, x가 약 0.25이고, v가 약 0.25이거나, 또는 w가 약 0.90, x가 약 0.05이고, v가 약 0.05이다. n은 ≥ 5 인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다.

제 2 서브-그룹에 속하는 폴리머의 다른 추가적인 예는 다음의 화학식 XXXV에서 나타낸 바와 같다:

화학식 XXXV



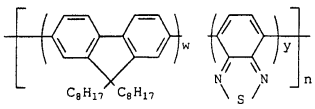
식중, w + x + z = 1, w ≥ 0.5, 0 ≤ x + z ≤ 0.5이고, n ≥ 2이다. 바람직하게는 w는 약 0.50, x는 약 0.377이고, z는 약 0.123이다. n은 ≥ 5 인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다.

제 2 서브-그룹에 속하는 폴리머는 광방출 물질과 편리하게 혼합될 수 있다. 혼합된 폴리머는 광방출 장치에서 단일층(single layer)을 형성할 수 있다. 광방출 물질의 적합한 예는 적합한 HOMO와 LUMO 준위 및, 따라서, 적합한 밴드갭을 갖는 광방출 물질이면 어떠한 것도 가능하다.

본 발명에 따른 제 3 서브-그룹에 속하는 폴리머는 음전하 담체를 전달하며 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 갖는 제 1 대역, 및 양전하와 음전하 담체를 수용하여 결합시켜 빛을 발생시키며 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 3 밴드갭을 갖는 제 3 대역을 포함하는 유기 폴리머로 정의될 수 있으며, 여기서 각 대역은 하나 이상의 모노머를 포함하며 상기 유기 폴리머 내의 모노머의 양과 배열은 상기 폴리머 내의 제 1 및 제 3 밴드갭이 서로 구별되게 하는 것으로 선택된다.

세 3 서브-그룹에 속하는 폴리머의 예는 다음의 화학식 XXXVI에 나타낸 바와 같다:

화학식 XXXVI



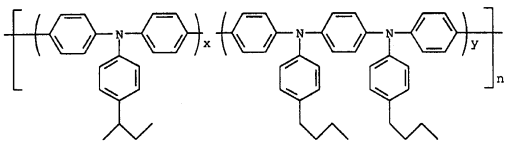
식 중, w + y = 1이고, w ≥ 0.5이고, y ≤ 0.5이고, n ≥ 2이다. 바람직하게는 w는 약 0.964이고, y는 약 0.036이다. n은 ≥ 5 인 것이 바람직하다. 이 값들은 상기 폴리머가 전기발광 장치에 사용될 때 장치의 효율 및 수명에 있어서 우수한 성능을 발휘하는 것을 나타낸 것이다.

제 3 서브-그룹에 속하는 폴리머는 광방출 장치에 사용될 때 정공 전달 물질과 편리하게 혼합될 수 있다. 적합한 정공 전달 물질의 예는 폴리트리아릴아민이다.

본 발명에 따른 제 4 서브-그룹에 속하는 폴리머는 양전하 담체를 전달하며 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 갖는 제 2 대역, 및 양전하와 음전하 담체를 수용하여 결합시켜 빛을 발생시키며 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위로 정의되는 제 3 밴드갭을 갖는 제 3 대역을 포함하는 유기 폴리머로 정의될 수 있으며, 여기서 각 대역은 하나 이상의 모노머를 포함하며 상기 유기 폴리머 내의 모노머의 양과 배열은 상기 폴리머 내에서 제 2 및 제 3 밴드갭이 서로 구별되게 하는 것으로 선택된다.

제 4 서브-그룹에 속하는 폴리머의 예는 다음의 화학식 XXXVII에 나타낸 바와 같다.

화학식 XXXVII



식 중, x + y = 1이고, x ≥ 0.5, y ≤ 0.5이고, n ≥ 2이다. 바람직하게는 x는 약 0.5이고, y는 약 0.5이다. n은 ≥ 5 인 것이 바람직하다.

제 4 서브-그룹에 속하는 폴리머는 광방출 장치에서 사용될 때 전자 전달 물질과 편리하게 혼합될 수 있다. 적합한 전자 전달 물질의 예는 폴리[2, 7-(9, 9-디알킬 플로렌)], 바람직하게는 폴리[2, 7-(9, 9-디옥틸플로렌)]과 같은 폴리플로렌이다.

본 발명에 따른 제 1, 제 2, 제 3 및 제 4 서브-그룹 폴리머에 관하여 앞에서 언급된 것과 같은 제 1, 제 2 및 제 3 대역은 상기한 본 발명의 측면 또는 구체예 중 어느 하나에서 정의된 것과 같은 대역이라는 것에 유념하여야 한다.

공지되어 있는 다양한 중합 방법이 본 발명에 따른 폴리머를 제조하는 데 이용될 수 있다.

특히 적합한 한 가지 방법으로는 영국특허출원 제 9925653.9 호에 개시되어 있는 바를 들 수 있는데, 이는 본문의 참고문헌이 된다. 상기 출원은 (a) 붕소산 그룹(boronic acid group), 붕소산 에스테르 그룹(boronic ester group) 및 보레인 그룹(borane group) 중에서 선택된 둘 이상의 반응성 붕소 유도체 그룹을 갖는 방향족 모노머, 및 둘 이상의 반응성 할라이드 작용 그룹을 갖는 방향족 모노머의 반응 혼합물; 또는 (b) 하나의 반응성 할라이드 작용 그룹(functional group)과 붕소산 그룹, 붕소산 에스테르 그룹 및 보레인 그룹 중에서 선택된 하나의 반응성 붕소 유도체 그룹을 갖는 방향족 반응 혼합물을 중합하는 것을 포함하는 콘쥬게이션 폴리머(conjugated polymer)를 제조하는 방법으로서, 상기 반응 혼합물이 촉매량의 팔라듐 촉매 및 반응성 붕소 유도체 그룹을 $-B(OH)_3$ 음이온으로 전환시키기에 충분한 양의 유기 염기(organic base)를 포함하는 방법을 개시하고 있다.

본 발명에 따른 폴리머가 상기 방법에 의하여 제조되는 것이 특히 유리하다. 이것은 반응시간이 짧고, 잔류하는 팔라듐의 수준이 낮기 때문이다.

다른 중합 방법은 미국특허 제 5,777,070 호에 개시되어 있다. 이 방법은 붕소산, C1-C6 붕소산 에스테르, C1-C6 보레인 및 이들의 혼합물 중에서 선택된 둘 이상의 반응성 그룹을 갖는 모노머를 방향족 디할라이드(dihalide) 작용 모노머와 접촉시키거나, 또는 하나의 반응성 붕소산, 붕소산 에스테르 또는 보레인 그룹과 하나의 반응성 할라이드 작용 그룹을 서로 접촉시키는 것을 포함한다.

추가적인 중합 방법은 " Macromolecules" , 31, 1099-1103(1998)로부터 알려진 것이다. 이 중합 방법은 니켈의 중개에 의한 디보라미드(diboramide) 모노머의 커플링을 포함한다. 이 방법은 보통 " 야마토 중합(Yamamoto Polymerization)" 으로 알려져 있다.

앞에서 언급된 중합 방법들에 있어서, " 모노머" 는, 하나의 구체예에서, 제 1, 제 2 또는 제 3 대역 중 하나를 포함하는 것이 선택될 수 있다. 다시 말하면, 각각 제 1, 제 2 또는 제 3 대역을 포함하며 둘 이상의 반응성 그룹을 갖는 여러 종류의 모노머들을 하나 이상의 제 1 반응 단계를 통하여 제조할 수 있다. 그 다음, 미리 제조된 모노머들을 중합 단계에서 다른 모노머들과 접촉시킬 수 있다. 실제에 있어서, 하나 이상의 제 1 반응 단계 및 중합단계는 각각 다른 반응 용기에서 수행될 것이다.

본 발명에 따른 폴리머는 통상적으로 2 보다 큰 중합도, 바람직하게는 3 보다 큰 중합도를 갖는다.

통상적으로, 본 발명에 따른 폴리머는 전기발광 장치에 하나의 층으로 도입될 것이다. 상기의 층은 음극과 양극 사이에 놓여질 것이다.

앞에서 정의된 것과 같은 제 1 서브-그룹에 속하는 폴리머의 경우, 제 1 서브-그룹에 속하는 고분자의 층 이외에 음극과 양극 사이에 추가적인 층이 필요하지는 않다. 그러나, 정공 전달 또는 전자 전달 층과 같은 추가적인 층들을 포함하는 것이 유리할 수도 있다.

앞에서 정의된 제 2 서브-그룹에 속하는 폴리머는 광방출 물질, 바람직하게는 광방출 폴리머와 편리하게 혼합될 수 있다. 혼합물 층은 전기발광 장치 내의 음극과 양극 사이에 포함될 수 있다.

앞에서 정의된 제 3 서브-그룹에 속하는 폴리머는 정공 전달 물질, 바람직하게는 정공 전달 폴리머와 편리하게 혼합될 수 있다. 혼합물의 층은 전기발광 장치 내의 음극과 양극의 사이에 포함될 수 있다.

앞에서 정의된 제 4 서브-그룹에 속하는 폴리머는 전기발광 장치에서 사용될 때 전자 전달 물질, 바람직하게는 전자 전달 폴리머와 편리하게 혼합될 수 있다. 혼합물 층은 전기발광 장치의 음극과 양극 사이에 포함될 수 있다.

제 2, 제 3 및 제 4 서브-그룹의 경우, 장치 내에서의 전자 전달 및/또는 정공 전달, 및/또는 장치로부터의 광방출을 최적화하기 위하여 필요한 경우 추가적인 폴리머 층이 또한 음극과 양극 사이에 도입될 수 있다.

도면의 간단한 설명

도 1은 일반적인 장치의 구조도를 나타낸 것이다.

도 2는 도 1에 따른 장치의 에너지 준위를 나타낸 것이다.

실시예

실시예 1

2,7-디브로모-9,9-디옥틸플로렌의 합성

플로렌(166.2 g, 1.0 ㏖), 요오드(0.4 g) 및 디클로로메탄 (1 L)을 자석 교반기, 적하 깔때기 및 알코올 온도계(spirit thermometer)가 장치된 5L 용량의 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣었다. 여기에 소듐 카보네이트 용액(물 2 L에 280 g이 용해된)을 가하고 반응 혼합물을 얼음/염 배쓰(ice/salt bath)를 이용하여 5 ℃ 이하로 냉각시켰다. 브롬 용액(120 mL, 디클로로메탄 250 mL에 2.34 ㏖이 용해된)을 온도를 5 ℃ 이하로 유지하면서 반응 혼합물에 적가하였다. 첨가가 끝난 다음 얼음 배쓰를 치우고 반응 혼합물을 교반하면서 실온까지 온도를 상승시켰다. 18 시간 동안 교반한 후에, 생성물이 미세한 백색 분말로 침전되었다. 생성물을 여과하고, 20% 소듐 티오설페이트 수용액 120 mL로 1 회 세척하고, 그 다음 증류한 탈이온수 350 mL × 3 회 세척하였다. 생성물을 회전증발기로 건조하여 순수한 백색분말 디브로모플로렌 321 g(99%)을 얻었다.

앞에서 제조한 디브로모플로렌(320 g)을, 85 ℃에서 자석 교반기, 환류 콘덴서 및 적하 깔때기가 장치된 3L 용량의 3구 둥근 바닥 플라스크 내에 있는 KOH 용액(1 L, 50 중량%) 및 Aliquat-336(3 mL)에 주입하였다. 상기 현탁액을 85 ℃로 가열하면서 n-옥틸브로마이드(500 mL)를 적가하여 이상계(two phase system) 반응물을 생성시켰다. 첨가가 끝나 후에 반응물을 85 ℃에서 밤새도록 교반하고, 그후에 실온으로 냉각시켰다. 그 다음, 디클로로메탄(500mL)을 반응 혼합물에 첨가하였다.

반응 혼합물을 2L 용량의 분별 깔때기로 옮겨서 유기층을 분리하고, 물층을 디클로로메탄 200 mL ×3 회 세척하고, 모아진 유기층을 물 200 mL ×3 회 세척하였다. 이 유기층을 무수 마그네슘 설페이트로 건조하고, 여과하고, 용매를 회전 증발기로 제거한 후에 어두운 색의 오일을 얻었으며, 이를 빙냉하고 긁어모아 황색/오렌지색 고체를 얻었다. 반응 혼합물을 냉장고에 1 시간 이상 놓아눈 다음, 고체를 여과하고 진공 펌프로 건조하였다.

생성물을 헥산(~1.5 L)에 용해시키고 모래(1 cm), 70-230 mesh의 실리카겔(60 cm), 모래 1 cm로 충진된 유리 컬럼(컬럼 직경 ~60 mm)을 질소압으로 통과시켰다. 이때, 생성물의 용리 전후에 컬럼을 헥산 1.5 L로 씻어주어야 한다는 것에 주의하여야 한다. 용리액을 증발시키고 냉각하여 백색 고체를 생성시키고, 이를 헥산으로 재결정하였다.

재결정은 필요한 최소 부피의 헥산으로 수행하였다. 생성물 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플로렌(i)은 색이 없는 결정성(백색) 고체로 얻어졌다. 상기 결정성 생성물을 일정한 질량이 유지될 때까지 실온에서 진공 건조하고, HPLC로 순도를 검사하였다. 2, 7-디브로모-9, 9-디옥틸플로렌의 최종 수득률은 347 g(64%)이였다.

실시예 2

2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플로렌의 합성

자석 교반기, 질소 주입구, 고무 격막(septum) 및 저온 온도계가 장치된 2L 용량의 3구 플라스크 내에서 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플로렌(200 g, 0.365 ㏖)을 건조 THF 1 L에 용해시킨다. 드라이아이스/아세톤 배쓰를 사용하여 -78 ℃로 상기 용액을 냉각시키고, 이 동안에 디브로마이드가 침전되었다. 부틸리튬(2.5M 헥산 용액 320 mL, 1.1 당량/브로마이드)을 약 -50℃ 이하로 온도를 유지하면서 상당히 빠르게 적가하였다. 1/2이 첨가된 시점에서 브로마이드가 모두 용해되고, 약 3/4가 첨가되었을 때 2,7-디리튬-9,9-디옥틸플로렌이 침전되기 시작하였다. 첨가가 끝난 다음, 이 디리튬플로렌 슬러리를 추가로 30분 동안 더 교반하였다. 정제된 트리메틸실릴 클로라이드(TMSCl, 120 mL)를 -30 ℃ 이하로 온도를 유지하면서 빠르게 첨가하였다. 냉각 배쓰를 제거하고, 상기 용액을 실온까지 온도 상승시켰다(통상 밤새도록). TLC 분석(헥산으로 용리시킴)은 용매 전면 근처에서 하나의 점(single spot)을 보여주었다. 상기 용액을 1구 플라스크로 여과하고, 용매를 회전 증발기로 제거하였다. 헥산을 여액에 가하여 얻어진 용액을 여과하여 LiCl을 제거하고, 헥산으로 잘 세척하였다. 헥산을 제거하고, 남은 오일을 고진공으로 하여 THF 및 헥산을 모두 제거하였다. 2,7-디(트리메틸실릴)-9,9-디옥틸플로렌의 수득량은 정량적이었다.

상기 디-TMS(트리메틸실릴) 유도체를 깨끗한 2L 3구 플라스크(질소 주입구, 고무 격막 및 온도계가 장치된)에 건조된 디클로로메탄 500 mL와 함께 옮기고, 이 용액을 질소 하에서 약 -78℃로 냉각시켜 이 동안에 결정화시켰다. 붕소트리브로마이드(120 mL, 약 1.5 당량/TMS기)를 5 분 동안 첨가하였다. 처음 1 또는 2 mL가 첨가됨에 따라 외관이 녹색이 되었다(강도가 변함). 첨가가 끝난 다음, 상기 혼합물을 실온까지 상승시키고, 통상적으로 밤새도록 교반하였다. 그러나, 대개 반응은 2시간 이내에 종결된다.

그 후에, 상기 용액을 실온에서 KOH 수용액(물 1.5L에 600g이 용해된)에 적가하고, 디포타슘 디보로네이트 염의 뻑뻑한 백색 침전 생성되었다. 모든 산이 반응하도록 10분 동안 계속 교반한다. 2상의 혼합물을 커다란 소결 유리 여과기(glass sinter funnel)로 여과하고, 부분적으로 건조되도록 흡입 처리한 후에, 충분한 양의 물로 세척하였다. 그리고나서, 고체를 빠르게 교반되는 5L 원뿔 모양의 플라스크에 들어있는 5M HCl(1.2 L)과 에테르(1.2 L)의 혼합물에 천천히 첨가하였다. 30분 경과 후에, 재생성된 이가산(diacid)은 에테르층에 있게 되고, 이를 분리하여 500 mL의 탈이온수로 세척하였다.

상기 과정을 반복하였다. 즉, 상기 에테르 용액을 KOH 수용액(물 1.5 L에 600 g이 용해된)에 적가하였다. 디포타슘 디보로네이트 염의 뻑뻑한 백색 침전이 생성되었다. 모든 산이 반응하도록 10분 동안 계속 교반하였다.

2상 혼합물을 커다란 소결 유리 여과기(glass sinter funnel)로 여과하고, 부분적으로 건조되도록 흡입처리(sucked)하고, 그 다음 충분한 양의 물로 세척하였다. 그 다음, 고체를 빠르게 교반되어지는 5L 원뿔 모양의 플라스크에 들어있는 5M HCl(1.2 L)과 에테르(1.2 L)의 혼합물에 천천히 첨가하였다. 30분 경과 후에, 재생성된 이가산(diacid)은 에테르 층에 있게 되며, 이를 분리하고 500 mL의 탈이온수로 세척하였다.

에테르를 제거한 후에, 생성물을 약 1 - 1.5 L 톨루엔에 용해시킨 다음, 에틸렌 글리콜(40 g, 0.645 ㏖)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 밤새도록 가열하고, 생성된 물을 딘-스탁(Dean-Stark) 트랩으로 제거하였다(17 mL가 모아짐). 톨루엔을 제거하고, 오일상의 생성물을 얻었다. 여기에 아세토니트릴(ca. 1L)을 가하고, 이 혼합물을 가열 환류하여 오일을 용해시키고, 그 다음 실온까지 냉각되도록 놓아두었다. 냉장고에서 추가적으로 냉각시켰다. 결정을 여과하고, 충분한 양의 아세토니트릴로 세척하고 건조하였다. 그 다음, 건조된 결정을 헥산(ca. 1 L)에 용해시킨 다음, 실온까지 냉각시키고, 냉장고에 밤새도록 놓아두었다. 목적 화합물 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플로렌이 색이 없는 고체로 얻어졌다(110 g, 57%).

실시예 3

비스(4-브로모페닐)-4-secsec-부틸페닐아민의 합성

기계적 교반기(mechanical stirrer), 유리 교반 막대(glass stirring shaft), 테프론(Teflon) 교반 날개, 콘덴서가 장치된 2L 둥근 바닥 플라스크에 4-sec-부틸아닐린(200 g, 1,34 ㏖, 대개 사용 전에 진공 증류시킴)을 넣었다. 그 다음, 이 화합물을 진한 염산(350 mL)과 물 350 mL의 혼합물에 용해시켰다. 온도계를 상기 용액 중에 넣고, 반응 플라스크를 아세톤/드라이아이스 배쓰에 담갔다. 상기 반응 혼합물을 교반하면서 5 ℃ 이하로 냉각시켰다. 냉각시킨 아질산나트륨 용액(물 250mL에 100 g, 1.440 ㏖이 용해된)을 상기 반응 혼합물에 천천히 첨가(주사기를 사용하여 1회에 3-5 mL씩) 하였다. 온도를 10 ℃ 이상으로 올라가지 않도록 하였다.

요오드화칼륨 용액(물 250 mL에 228 g, 1.73 ㏖이 용해된)을 서서히 첨가하였다(5-10 mL 분액으로). 상기 반응 혼합물을 실온에서 2 - 3 시간 동안 교반하였다. 그 다음, 반응 용기에 공기 콘덴서(air condenser)를 장착하고 반응 혼합물을 기체(질소) 발생이 멈출 때까지 조심스럽게 가열(오일 배쓰의 최대 온도 약 100 ℃)하였다. 그 다음, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 유기층을 물층으로부터 분리하고, 물층을 디클로로메탄으로 세척하였다(500mL ×4 회). 유기층과 디클로로메탄 추출액을 모아서 과량의 소듐 메타바이설파이트(sodium metabisulphite) 용액으로 세척하였다. 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조시키고 여과한 다음, 감압 회전 증발기를 사용하여 용매를 제거하였다. 그 다음, 조질의 오일상 생성물을 진공 증류하여 무색 액체 4-sec-부틸-1-요오드벤젠(245 g, 70%)을 얻었다.

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

그 다음, 반응 혼합물을 냉각시키고 2M 염산 1 L를 부어 반응을 중단시켰다. 유기층을 물층으로부터 분리하고 셀라이트를 통과시켰다. 그 다음, 용액을 농축하고, 질소압 하에서 70-230 mesh의 실리카겔로 충진된 유리 컬럼(직경 6 cm, 길이 약 70 cm)을, 헥산을 용리 용매로 사용하여 통과시켰다. 용리액에서 용매를 제거하여 오일상의 생성물을 얻고, 여기에 소량의 메탄올을 가하여 백색 고체로 결정화하였다. 그 다음, 고체를 이소프로판올을 사용하여 재결정하여 백색 결정의 N,N-디페닐-4-sec-부틸페닐아민(101 g, 37%)을 얻었다.

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

상기 혼합물을 실온까지 올라가도록 한 다음, 빠르게 교반하면서 에탄올/물 3:1 혼합 용매 2L에 적가하였다. 백색으로 침전된 고체를 여과하고, 이소프로판올로 재결정하여 백색 고체 상태의 비스(4-브로모페닐)-4-sec-부틸페닐아민(23.5 g, 53%)을 얻었다.

실시예 4

4,7-디브로모-2,1,3-벤조티아디아졸의 합성

2,1,3-벤조티아디아졸(100 g, 0.74 ㏖)과 브롬산 (48% 수용액, 500 mL) 현탁액(500 mL)을 100 ℃까지 가열하였다. 30 분 후에, 브롬(120 mL, 4.68 ㏖)을 적가하고, 상기 현탁액을 100 ℃에서 24 시간 동안 추가로 교반하였다. 이 조질의 혼합물을 격렬하게 교반되고 있는 얼음물에 부어 반응을 중단시켰다. 30 분 동안 더 교반하고, 여액을 소듐 티오설페이트로 세척하고(20% 용액, 400 mL × 2 회), 톨루엔(1.5 L)에 용해시켰다. 상기 용액을 챠콜(charcoal, 1g)로 2회 처리하고, 100 ℃에서 2 시간 동안 가열하였다. 활성탄을 제거한 다음, 고체가 나타날 때까지 용액을 농축하였다. 상기 혼합물에 메탄올을 가하여 다시 결정화하여, 105 g, 49%의 생성물을 얻었다.

실시예 5

화학식 XXXII에 따른 폴리머(중합도 ~10)의 합성

전기에 의한 기계적 교반기에 부착된 유리 교반 막대, 테프론 교반 날개, 환류 콘덴서(질소 라인에 연결된)가 장치된 2 L 용량의 반응 용기에 2,7-비스(1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플로렌(50.5610 g, 95.33 ㎜ol), 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플로렌(41.7812 g, 76.18 ㎜ol), 비스(4-브로모페닐)-4-sec-부틸페닐아민 (8.7560 g, 19.08 ㎜ol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 300 mg 및 톨루엔 950 mL를 넣었다. 이 혼합물을 실온에서 10 분 동안 교반하였다.

테트라에틸렌암모늄 히드록사이드(320, 20% 중량/부피)를 상기 혼합물에 첨가하고, 실온에서 질소를 흘려주면서 20 분 동안 교반하였다.

상기 반응 혼합물을 가열하여 질소압 하에서 교반하면서(속도를 2 내지 3으로 조절) 18 시간 이상(보통 밤새도록) 환류하였다.

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

상기 혼합물을 실온까지 냉각되도록 한 다음, 메탄올 4 L에 부어 폴리머를 침전시켰다. 폴리머/메탄올 혼합물을 여과하고, 분리된 폴리머를 톨루엔 용액으로부터 메탄올 용액에 부어 다시 침전시키고, 진공 건조하여 ~55를 얻었다.

상기 방법으로 얻은 폴리머의 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, 흐름 속도는 1 mL/min, 온도는 35 ℃로 조절하였다. 컬럼의 타입은 PL 600-500,000 폴리스티렌 표준물질을 사용하여 보정된 PL 혼성(*2, 30cm) 타입이었다.

실시예 6

화학식 XXXII를 갖는 폴리머와 광방출 물질의 혼합물의 합성

구조식 XXXII를 갖는 폴리머(60 g)와 구조식 XXXVI, w = y 인 폴리머(2.37 g)를 자석 교반기, 질소 기체를 흘려줄 수 있도록 연결된 환류 콘덴서가 장치된 5L 용량의 둥근 바닥 플라스크에 넣었다. 그 다음, 상기 폴리머 혼합물을 약 3.5 L의 톨루엔에 65 ℃, 질소압 하에서 교반하여 용해시켰다. 완전히 용해되었을 때 상기 폴리머 용액을 실온으로 냉각시켰다. 그 후에, 이 점성이 있는 용액을, 빠르게 교반되고 있는 과량의 메탄올(4 X 4 L)에 적가하였다. 그 다음, 침전된 폴리머를 여과하고, 진공 하에서 중량이 일정해질 때까지 건조하였다. 최종 수득량은 정량적으로, 즉, 62.37 g이었다.

(57) 청구의 범위

청구항 1.

폴리머 백본 길이를 따라 복수 대역을 갖으며, 다음 중에서 두 가지 이상을 포함하는 유기 폴리머:

(i) 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 전달하는 제 2 대역; 및

(ii) 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 전달하는 제 2 대역; 및

(iii) 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 3 밴드갭을 갖고, 양전하 및 음전하 담체를 수용하고 혼합하여 빛을 발생시키는 제 3 대역,

여기서, 각 대역은 하나 이상의 모노머를 포함하고, 상기 유기 폴리머 중의 모노머의 배열 및 양은 제 1, 제 2 및 제 3 의 밴드갭이 폴리머내에서 서로 각각 구별될 수 있도록 선택된 것임.

청구항 2.

전술한 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제 1 대역이 치환 또는 비치환된 방향족기 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제 1 모노머로 이루어진 것인 유기 폴리머.

청구항 3.

제 2 항에 있어서, 상기 제 1 모노머가 치환 또는 비치환된 플루오렌기를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 4.

제 3 항에 있어서, 상기 제 1 모노머가 2,7-링크된 디알킬 플루오렌기를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 5.

제 4 항에 있어서, 상기 2,7-링크된 디알킬 플루오렌기가 9,9-디옥틸 플루오렌기인 유기 폴리머.

청구항 6.

제 1 항 내지 5 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제 2 대역이 치환 또는 비치환된 방향족기 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제 2 모노머로 이루어진 것인 유기 폴리머.

청구항 7.

제 6 항에 있어서, 상기 제 2 모노머가 일반식 $-Ar_3N-$(여기서, 각각의 Ar 은 동일하거나 상이하고, 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족기임)을 갖는 트리아릴아민 단위를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 8.

제 6 항 또는 7 항에 있어서, 하나 이상의 Ar이 치환 또는 비치환된 페닐기인 유기 폴리머.

청구항 9.

제 7 항 또는 8 항에 있어서, 하나 이상의 Ar이 상기 폴리머에 연결된 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족 부사슬기를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 10.

제 9 항에 있어서, 상기 부사슬기가 치환 또는 비치환된 아릴기인 유기 폴리머.

청구항 11.

제 10 항에 있어서, 상기 부사슬기가 치환 또는 비치환된 페닐기 또는 모노-치환거나 3,5-디-치환된 페닐기인 유기 폴리머.

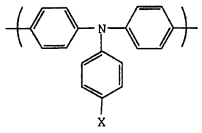
청구항 12.

제 9 항 내지 11 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 부사슬기가 치환 또는 비치환된 알킬, 퍼플루오로알킬, 알킬아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 아릴, 알콕시, 티오알킬 또는 시아노기를 갖는 것인 유기 폴리머.

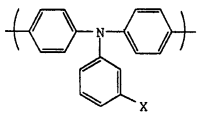
청구항 13.

제 7 항 내지 12 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 트리아릴아민 단위가 다음의 화학식 I, II 또는 III 중 어느 하나로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

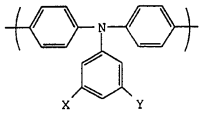
< 화학식 I>



< 화학식 II>



< 화학식 III>

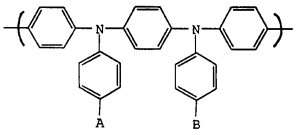


식 중, X 및 Y는 동일하거나 상이하고, 각각 치환기임.

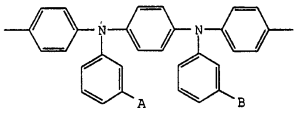
청구항 14.

제 13 항에 있어서, 상기 트리아릴아민 단위가 다음의 화학식 IV, V 또는 VI 중 어느 하나로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

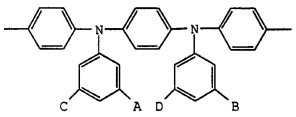
< 화학식 IV>



< 화학식 V>



< 화학식 VI>



식 중, A, B, C 및 D는 동일하거나 상이하고, 각각 치환기임.

청구항 15.

제 13 항 또는 14 항에 있어서, X, Y, A, B, C 및 D 중 하나 이상이 각각 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴 및 아릴알킬기로 이루어진 군 중에서 선택된 것인 유기 폴리머.

청구항 16.

제 15 항에 있어서, X, Y, A, B, C 및 D 중 하나 이상이 각각 비치환된 이소부틸기, n-알킬, n-알콕시 및 트리플루오로메틸기로 이루어진 군 중에서 선택된 것인 유기 폴리머.

청구항 17.

제 15 항 또는 16 항에 있어서, X 및 Y 또는 A, B, C 및 D 가 동일한 것인 유기 폴리머.

청구항 18.

전술한 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제 3 대역이 치환 또는 비치환된 방향족기 또는 헤테로방향족기를 포함하는 제 3 모노머로 이루어진 것인 유기 폴리머.

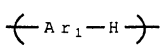
청구항 19.

제 18 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 벤젠기 또는 티오펜기에 퓨즈드된 방향족 또는 헤테로방향족 디아진기인 H 기를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 20.

제 19 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 다음의 화학식 IX로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

< 화학식 IX>

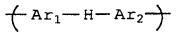


식 중, Ar_1 은 치환 또는 비치환된 방향족기 또는 헤테로방향족기임.

청구항 21.

제 20 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 다음의 화학식 X로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

< 화학식 X>



식 중, Ar_2는 치환 또는 비치환된 방향족기 또는 헤테로방향족기이며, Ar_1은 제 20 항에서 정의된 바와 같음.

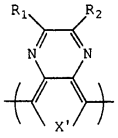
청구항 22.

제 20 항 또는 21 항에 있어서, 상기 Ar_1 또는 Ar_2가 각각 치환 또는 비치환의, 퓨즈드되거나 퓨즈드되지 않은 벤젠, 티오펜, 퓨란, 퀴녹살린, 바이페닐 또는 플루오렌기를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 23.

제 19 항 내지 22 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 다음의 화학식 VIII로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

< 화학식 VIII>

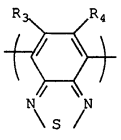


식 중, X'는 RC=CR 또는 S이고, R_1 및 R_2는 동일하거나 상이하고, 각각 치환기임.

청구항 24.

제 19 항 또는 22 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 다음의 화학식 XI로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

< 화학식 XI>



식 중, R_3 및 R_4는 동일하거나 상이하고, 각각 독립적인 치환기임.

청구항 25.

제 23 항 또는 24 항에 있어서, R_1, R_2, R_3 및 R_4 중 하나 이상이 각각 독립적으로 수소, 알킬, 아릴, 퍼플루오로알킬, 티오알킬, 시아노, 알콕시, 헤테로아릴, 알킬아릴, 아릴알킬, 피리딘 또는 퓨란기로 이루어진 군 중에서 선택된 것인 유기 폴리머.

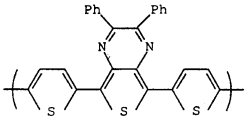
청구항 26.

제 25 항에 있어서, R_1 및 R_2, 또는 R_3 및 R_4가 동일하고 각각 페닐기인 유기 폴리머.

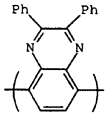
청구항 27.

제 23 항, 25 항 또는 26 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 다음의 화학식 XIII 내지 XVII 중 어느 하나로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

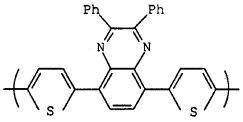
< 화학식 XIII>



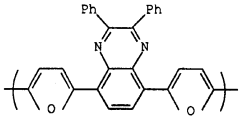
< 화학식 XIV>



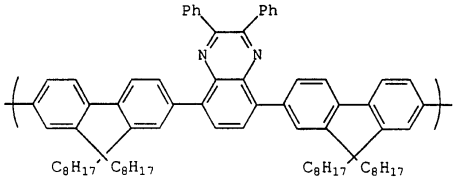
< 화학식 XV>



< 화학식 XVI>



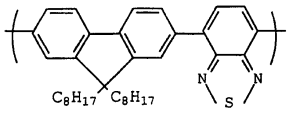
< 화학식 XVII>



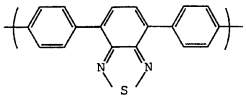
청구항 28.

제 23 항 내지 26 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 다음의 화학식 XVIII 내지 XXVI 중 어느 하나로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

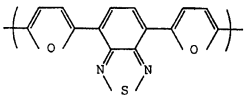
< 화학식 XVIII>



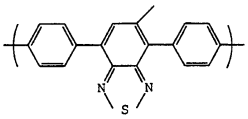
< 화학식 XIX>



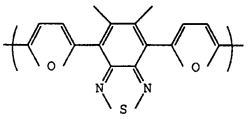
< 화학식 XX>



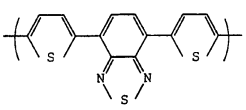
< 화학식 XXI>



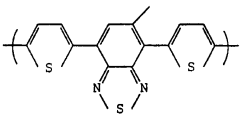
< 화학식 XXII>



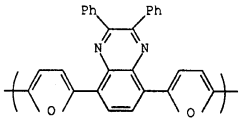
< 화학식 XXIII>



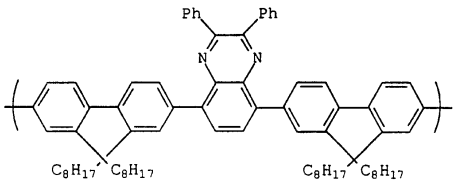
< 화학식 XXIV>



< 화학식 XXV >



< 화학식 XXVI >



청구항 29.

제 18 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 트리아릴아민 단위를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 30.

제 29 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 일반식 $\{(-Ar_2N-)-Ar-(-NAr_2-)\}$ 를 갖는 기(여기서, 각각의 Ar은 동일하거나 상이하고, 치환 또는 비치환된 방향족기 또는 헤테로방향족기를 포함하는 것임)를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 31.

제 30 항에 있어서, 상기 Ar 중 하나 이상이 치환 또는 비치환된 아릴기인 유기 폴리머.

청구항 32.

제 31 항에 있어서, 상기 Ar 중 하나 이상이 비치환된 페닐기인 유기 폴리머.

청구항 33.

제 30 항 내지 32 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 Ar 중 하나 이상이 상기 폴리머 백본에 결합된 치환 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족 부사슬기를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 34.

제 33 항에 있어서, 상기 부사슬기가 퓨즈드되거나 퓨즈드되지 않은 벤젠, 티오펜, 퓨란, 퀴녹살린, 바이페닐 또는 플루오렌기를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 35.

제 34 항에 있어서, 상기 부사슬기가 모노-치환된 페닐기를 포함하는 것인 유기 폴리머.

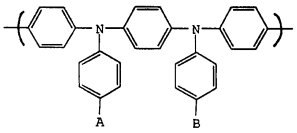
청구항 36.

제 33 항 내지 35 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 부사슬기가 수소, 또는 치환 또는 비치환된 알킬, 퍼플루오로알킬, 알킬아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 아릴, 알콕시, 티오알킬 또는 시아노기를 포함하는 치환기를 갖는 것인 유기 폴리머.

청구항 37.

제 35 항 또는 36 항에 있어서, 상기 트리아릴아민 단위가 다음의 화학식 IV로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

< 화학식 IV>

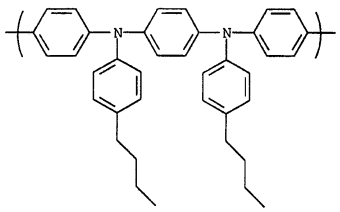


식 중, A 및 B는 동일하거나 상이하고, 각각 치환기임.

청구항 38.

제 37 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 다음의 화학식 XXVII로 표시되는 식을 갖는 기를 포함하는 것인 유기 폴리머:

< 화학식 XXVII>



청구항 39.

제 1 항 내지 38 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제 1 대역이 치환 또는 비치환된 추가의 방향족기 또는 헤테로방향족기를 함유하는 제 4 모노머를 추가로 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 40.

제 39 항에 있어서, 상기 추가로 치환 또는 비치환된 방향족기 또는 헤테로방향족기가 상기 화학식 XI로 표시되는 기(여기서, R_3 및 R_4는 모두 수소임)를 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 41.

제 6 항 내지 40 항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 제 2 대역이 제 2 모노머와 상이한 것으로, 제 6 항 내지 17 항 중 어느 한 항에서 정의된 바와 같은 추가의 제 2 모노머로 이루어지는 제 5 모노머를 추가로 포함하는 것인 유기 폴리머.

청구항 42.

전술한 항 중 어느 한 항에 있어서,

(i) 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 전달하는 제 1 대역; 및

(ii) 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 전달하는 제 2 대역; 및

(iii) 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위을 정의되는 제 3 밴드갭을 갖고, 양전하 및 음전하 담체를 수용하고 혼합하여 빛을 발생시키는 제 3 대역을 포함하고,

여기서, 각 대역이 하나 이상의 모노머를 포함하고, 상기 유기 폴리머 중의 모노머의 배열 및 양이 상기 제 1, 제 2 및 제 3의 밴드갭이 폴리머내에서 서로 구별될 수 있도록 선택된 것인 유기 폴리머.

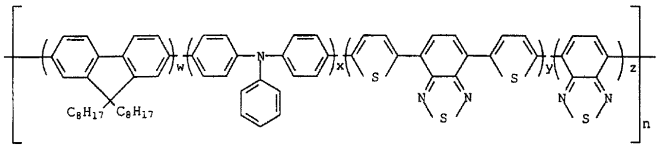
청구항 43.

제 42 항에 있어서, 상기 제 3 대역이 600 nm 내지 700 nm 범위의 파장을 갖는 빛을 발생시킬 수 있는 유기 폴리머.

청구항 44.

제 42 항 또는 43 항에 있어서, 다음의 화학식 XXVIII로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXVIII>



식 중, $w + x + y + z = 1$이고, $w \geq 0.5$이고, $0 \leq x + y + z \leq 0.5$ 이고, $n \geq 2$임.

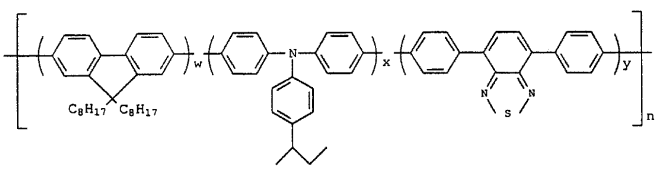
청구항 45.

제 42 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 500 nm 내지 600 nm 범위의 파장을 갖는 빛을 발생시킬 수 있는 유기 폴리머.

청구항 46.

제 42 항 또는 45 항에 있어서, 다음의 화학식 XXIX로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXIX>

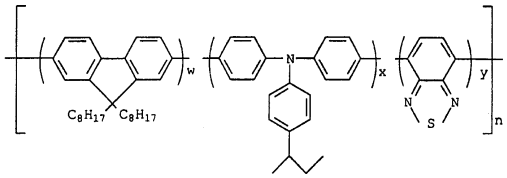


식 중, w + x + y = 1이고, w ≥0.5이고, 0 ≤x + y ≤0.5 이고, n ≥2임.

청구항 47.

제 42 항 또는 45 항에 있어서, 다음의 화학식 XXX로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXX>



식 중, w + x + y = 1이고, w ≥0.5이고, 0 ≤x + y ≤0.5 이고, n ≥2임.

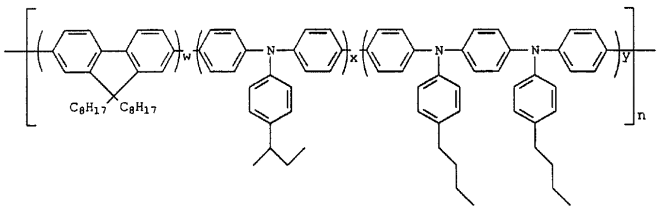
청구항 48.

제 42 항에 있어서, 상기 제 3 모노머가 400 nm 내지 500 nm 범위의 파장을 갖는 빛을 발생시킬 수 있는 유기 폴리머.

청구항 49.

제 51 항에 있어서, 다음의 화학식 XXXI로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXXI>



식 중, w + x + y = 1이고, w ≥0.5이고, 0 ≤x + y ≤0.5 이고, n ≥2임.

청구항 50.

제 1 항 내지 41 항 중 어느 한 항에 있어서,

(i) 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 전달하는 제 1 대역; 및

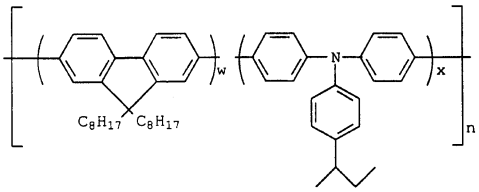
(ii) 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 전달하는 제 2 대역을 포함하고,

여기서, 각 대역이 하나 이상의 모노머를 포함하고, 상기 유기 폴리머 중의 모노머의 배열 및 양이 상기 제 1 및 제 2의 밴드갭이 폴리머내에서 서로 구별될 수 있도록 선택된 것인 유기 폴리머.

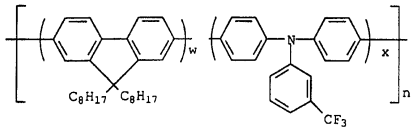
청구항 51.

제 50 항에 있어서, 다음의 화학식 XXXII 또는 XXXIII로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXXII >



< 화학식 XXXIII >

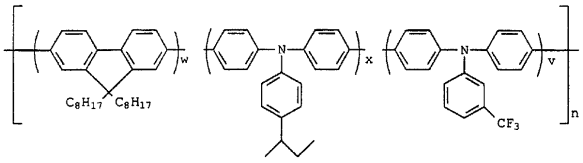


식 중, w + x = 1이고, w ≥0.5이고, x ≤0.5 이고, n ≥2임.

청구항 52.

제 50 항에 있어서, 다음의 화학식 XXXIV로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXXIV >

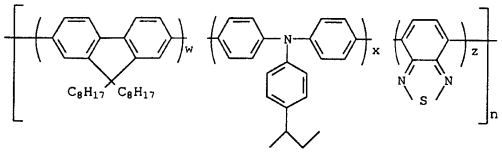


식 중, w + x + v = 1이고, w ≥0.5이고, 0 ≤x + v ≤0.5 이고, n ≥2임.

청구항 53.

제 50 항에 있어서, 다음의 화학식 XXXV로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXXV >



식 중, w + x + z = 1이고, w ≥0.5이고, 0 ≤x + z ≤0.5 이고, n ≥2임.

청구항 54.

제 50 항 내지 53 항 중 어느 한 항에 있어서, 광방출 물질과 혼합된 것인 유기 폴리머.

청구항 55.

제 1 항 내지 41 항 중 어느 한 항에 있어서,

(i) 제 1 LUMO 준위와 제 1 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 1 밴드갭을 갖고, 음전하 담체를 전달하는 제 1 대역; 및

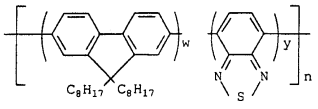
(ii) 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 3 밴드갭을 갖고, 양전하 및 음전하 담체를 수용하고 결합하여 빛을 발생시키는 제 3 대역을 포함하고,

여기서, 각 대역이 하나 이상의 모노머를 포함하고, 상기 유기 폴리머 중의 모노머의 배열 및 양이 상기 제 1 및 제 3의 밴드갭이 폴리머내에서 서로 구별될 수 있도록 선택된 것인 유기 폴리머.

청구항 56.

제 65 항에 있어서, 다음의 화학식 XXXVI으로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXXVI>



식 중, w + y = 1이고, w ≥0.5이고, y ≤0.5 이고, n ≥2임.

청구항 57.

제 55 항 또는 56 항에 있어서, 정공 전달 물질과 혼합된 것인 유기 폴리머.

청구항 58.

제 57 항에 있어서, 상기 정공 전달 물질이 폴리-트리아릴아민을 함유하는 것인 유기 폴리머.

청구항 59.

제 1 항 내지 41 항 중 어느 한 항에 있어서,

(i) 제 2 LUMO 준위와 제 2 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 2 밴드갭을 갖고, 양전하 담체를 전달하는 제 2 대역; 및

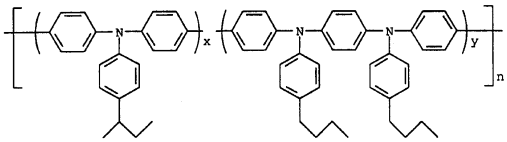
(ii) 제 3 LUMO 준위와 제 3 HOMO 준위에 의해 정의되는 제 3 밴드갭을 갖고, 양전하 및 음전하 담체를 수용하고 결합하여 빛을 발생시키는 제 3 대역을 포함하고,

여기서, 각 대역이 하나 이상의 모노머를 포함하고, 상기 유기 폴리머 중의모노머의 배열 및 양이 상기 제 2 및 제 3의 밴드갭이 폴리머내에서 서로 구별될 수 있도록 선택된 것인 유기 폴리머.

청구항 60.

제 59 항에 있어서, 다음의 화학식 XXXVII로 표시되는 식을 갖는 유기 폴리머:

< 화학식 XXXVII>



식 중, w + y = 1이고, w ≥0.5이고, y ≤0.5 이고, n ≥2임.

청구항 61.

제 59 항 또는 60 항에 있어서, 전자 전달 물질과 혼합된 것인 유기 폴리머.

청구항 62.

제 61 항에 있어서, 상기 전자 전달 물질이 폴리-플루오렌을 함유하는 것인 유기 폴리머.

청구항 63.

광학장내에서의 전술한 항 중 어느 한 항에 따른 물질의 용도.

청구항 64.

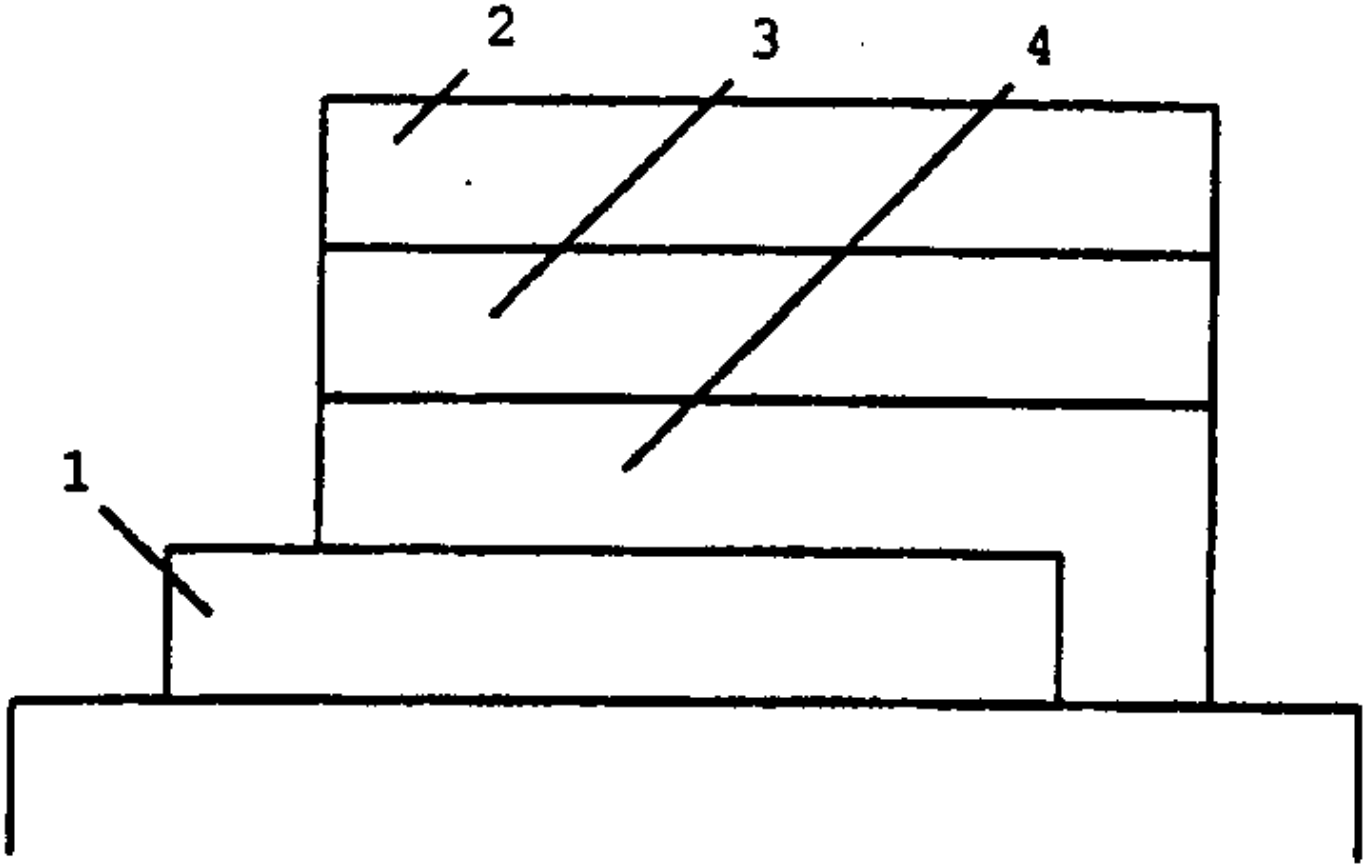
제 63 항에 있어서, 상기 광학 장치가 전기발광 장치를 포함하는 것인 용도.

청구항 65.

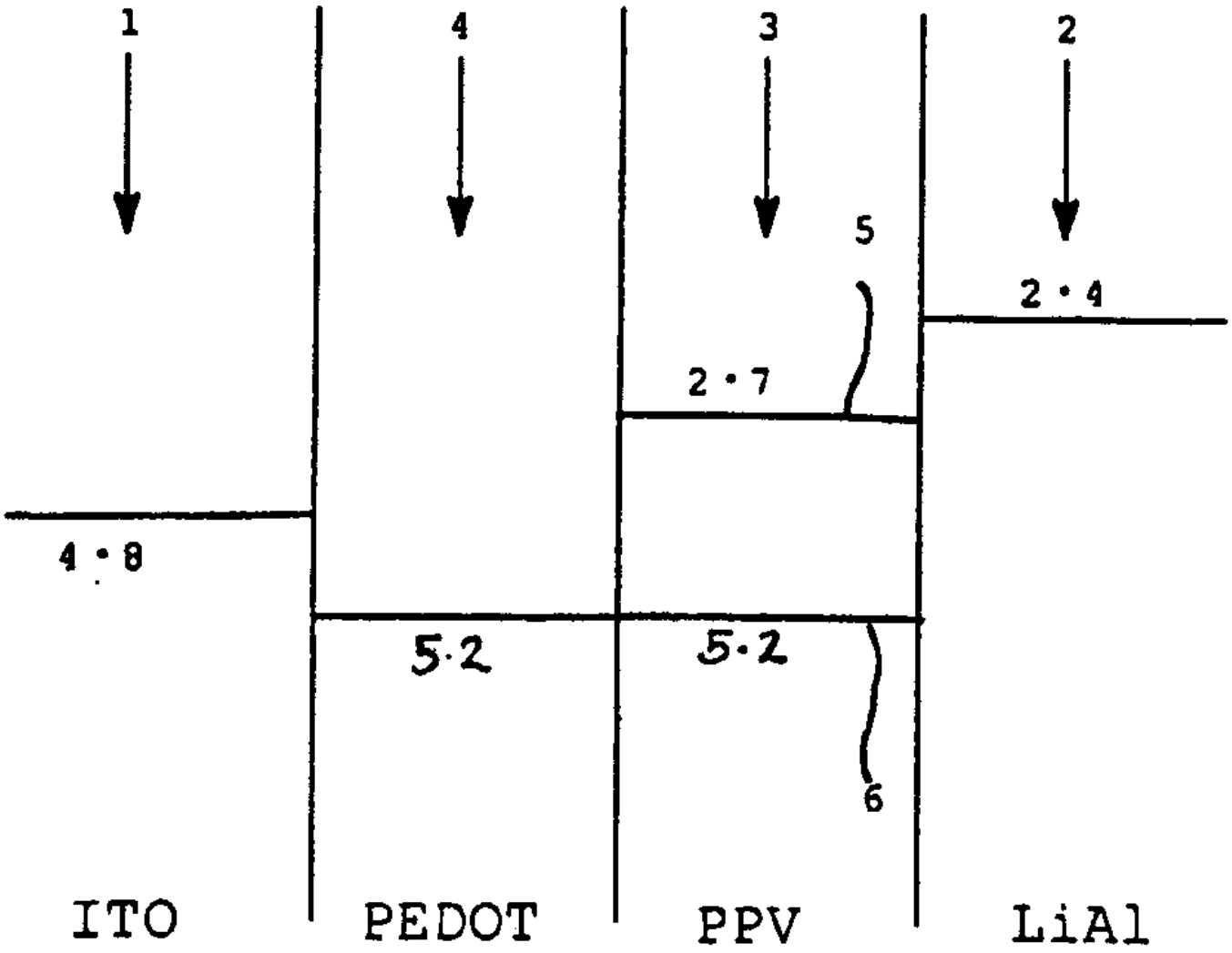
음극층, 양극층 및 상기 음극층과 양극층 사이에 놓인 제 1 항 내지 62 항 중 어느 한 항에 따른 폴리머층으로 이루어지는 전기발광 장치.

도면

도면 1



도면 2



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	KR1020010110661A	公开(公告)日	2001-12-13
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 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		
[标]发明人	TOWNS CARLROBERT 타운스칼로버트 ODELL RICHARD 오델리차드 OCONNOR STEPHENJOHNMARTIN 오커너스티븐존마틴		
发明人	타운스칼로버트 오'델리차드 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 C09K2211/1433 C09K2211/1425 Y10S428/917 C08G2261/3142 C08G2261/3162 C08G2261/3246 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	KR100835128B1		
外部链接	Espacenet		

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