



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0005137
(43) 공개일자 2016년01월13일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07F 15/00 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07F 15/0033 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2015-7036659(분할)
- (22) 출원일자(국제) 2009년09월16일
심사청구일자 2015년12월24일
- (62) 원출원 특허 10-2011-7008681
원출원일자(국제) 2009년09월16일
심사청구일자 2014년03월14일
- (85) 번역문제출일자 2015년12월24일
- (86) 국제출원번호 PCT/US2009/057098
- (87) 국제공개번호 WO 2010/033550
국제공개일자 2010년03월25일
- (30) 우선권주장
61/097,488 2008년09월16일 미국(US)

- (71) 출원인
유니버설 디스플레이 코포레이션
미국, 뉴저지 08618, 유잉, 필립스 불바르 375
- (72) 발명자
앨런 버트
미국 08618 뉴저지주 에빙 마스터슨 코트 543
광 레이몬드
미국 08536 뉴저지주 플레인스보로 부르 코트 1
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
김진희, 김태홍

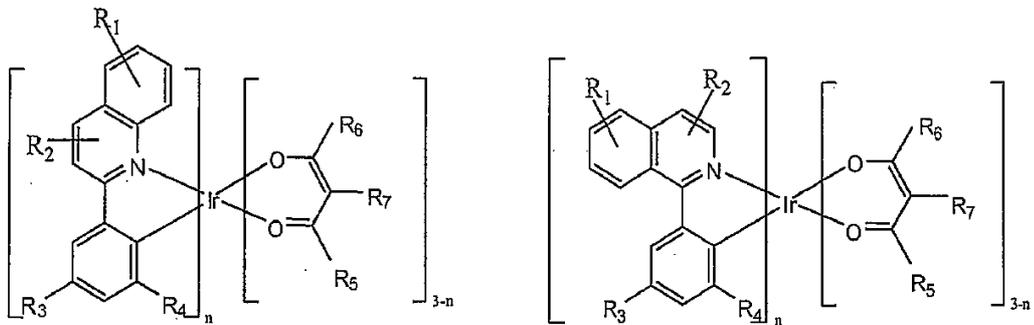
전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 인광성 물질

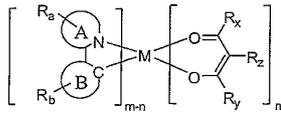
(57) 요약

본 발명은 고 효율 및 안정성, 좁은 스펙트럼, 및 개선된 처리성을 갖는 인광성 물질 및 디바이스를 제공한다.
(뒷면에 계속)

대표도 - 도3



그 인광성 물질은 하기 화학식(1)의 화합물을 갖는다:



상기 식 중,

M은 40보다 큰 원자량의 금속이고;

A 및 B는 각각 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로방향족 고리이며, A-B는 고리 A 상의 질소 원자 및 고리 B 상의 sp^2 혼성화 탄소 원자를 통해 금속에 배위결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리의 결합 쌍을 나타내고;

R_a , R_b , R_x , R_y , R_z 는 각각 비치환, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서 R_a 및 R_b 는 각각 하나 이상의 치환기를 나타내며, 결합하여 융합된 고리를 형성할 수 있고, R_x 및 R_y 중 하나 이상은 카르보닐 기에 대하여 α 위치보다 더 먼 위치에서 분지화하는 분지형 알킬 부분을 함유하고;

m은 금속의 산화 상태이며;

n은 m보다 작은 정수이고 1 이상이다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/0085 (2013.01)

H01L 51/5016 (2013.01)

H01L 51/5056 (2013.01)

H01L 51/5072 (2013.01)

H01L 51/5088 (2013.01)

H01L 51/5206 (2013.01)

H01L 51/5221 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/185 (2013.01)

(72) 발명자

이거 월터

미국 19067 펜실베이니아주 야들레이 힐크리 로드
274

지아 추안준

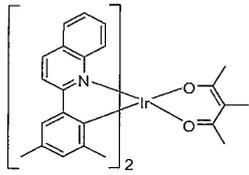
미국 08648 뉴저지주 로렌스빌 클리드덴 코트 16

명세서

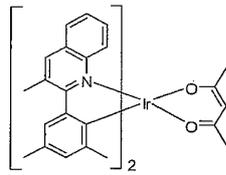
청구범위

청구항 1

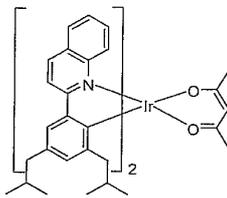
하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물:



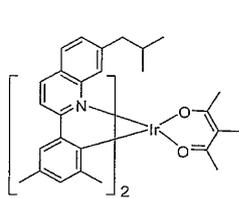
화합물 1



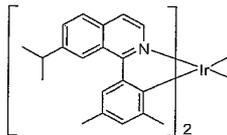
화합물 2



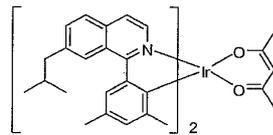
화합물 4



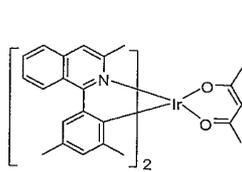
화합물 8



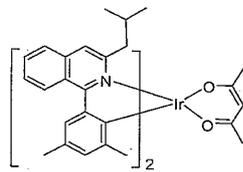
화합물 9



화합물 10



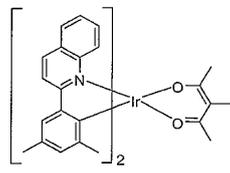
화합물 11



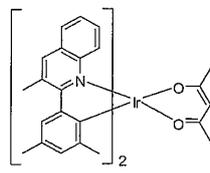
화합물 12

청구항 2

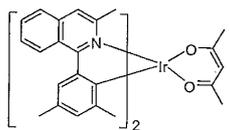
제1항에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물:



화합물 1



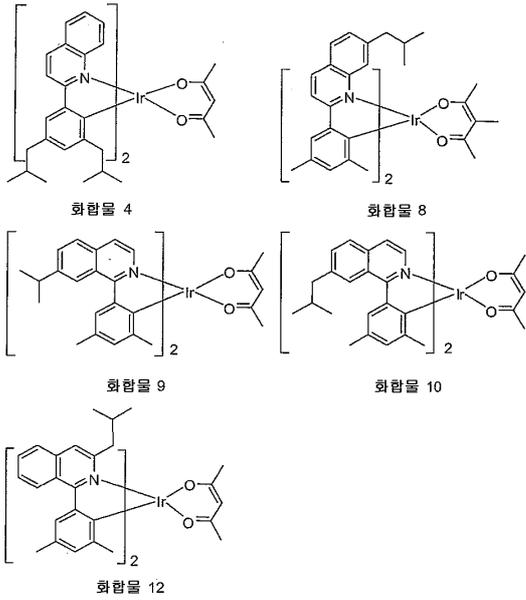
화합물 2



화합물 11

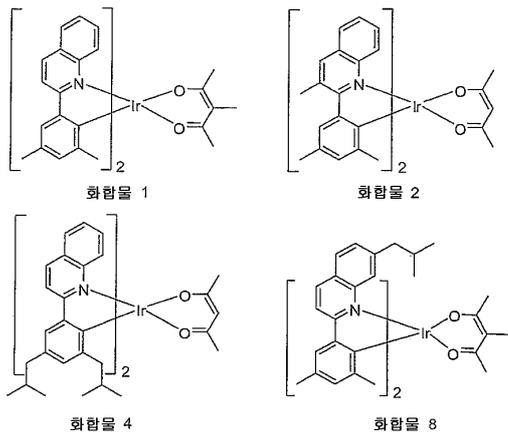
청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물:



청구항 4

제1항에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물:



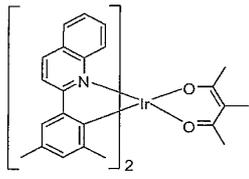
청구항 5

애노드,

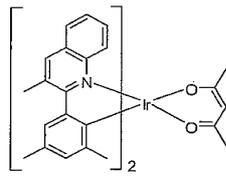
캐소드, 및

이 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 층으로서, 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물을 더 포함하는 유기 층

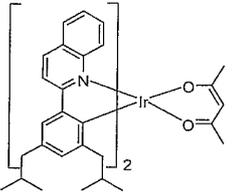
을 포함하는 유기 발광 디바이스:



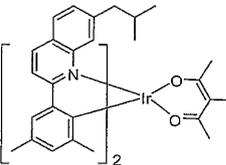
화합물 1



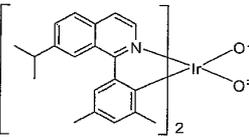
화합물 2



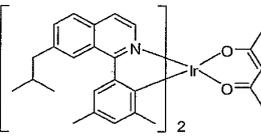
화합물 4



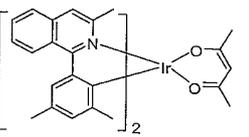
화합물 8



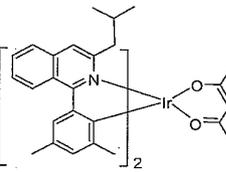
화합물 9



화합물 10



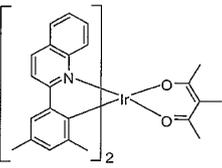
화합물 11



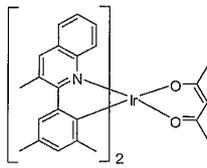
화합물 12

청구항 6

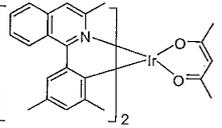
제5항에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 디바이스:



화합물 1



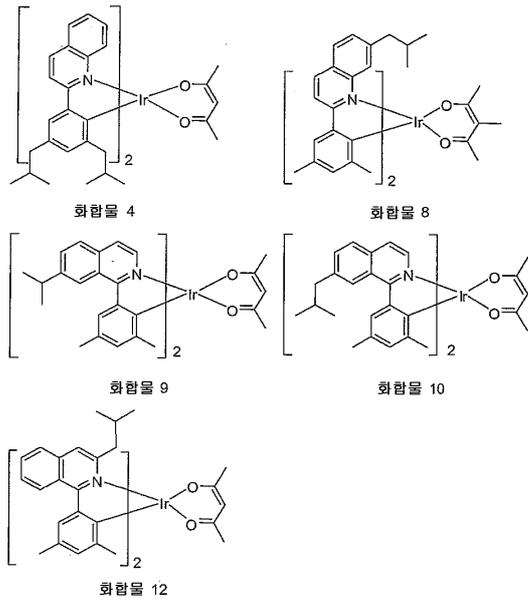
화합물 2



화합물 11

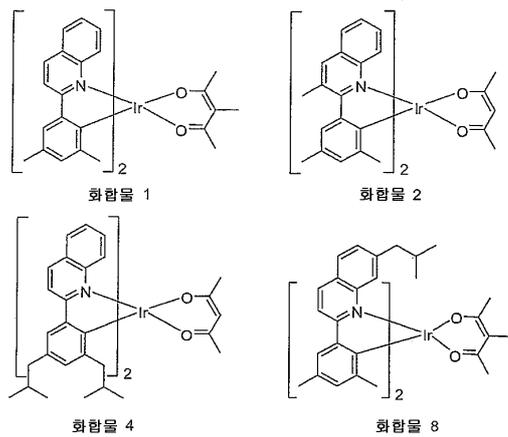
청구항 7

제5항에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 디바이스:



청구항 8

제5항에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 디바이스:



청구항 9

제5항에 있어서, 상기 유기 층이 상기 화합물 및 호스트를 포함하는 방출 층인 것인 디바이스.

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 화합물이 방출성 물질인 것인 디바이스.

청구항 11

제9항에 있어서, 상기 호스트가 금속 배위결합 착물인 것인 디바이스.

청구항 12

디바이스를 포함하는 소비자(consumer product)로서, 상기 디바이스는

애노드,

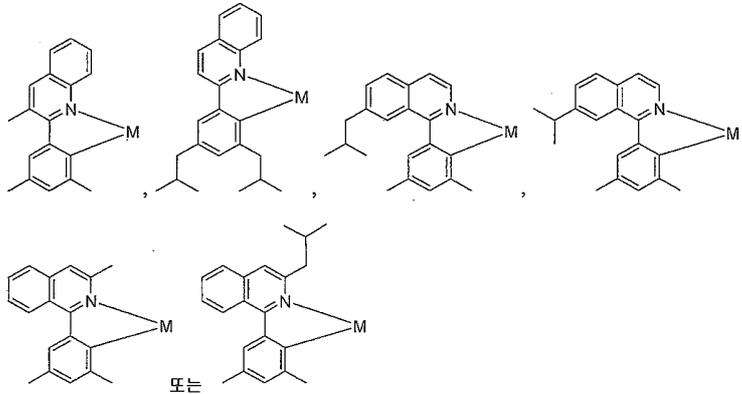
캐소드, 및

이 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 층으로서, 제1항에 정의된 화합물을 더 포함하는 유기 층을 더 포함하

는 것인 소비재.

청구항 13

하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된 구조식을 함유하는 유기금속 화합물:



상기 식 중, M은 40보다 더 큰 원자량을 지닌 금속임.

청구항 14

제13항에 있어서, M은 Ir인 화합물.

청구항 15

제14항에 있어서, 상기 화합물은 인광성 물질인 것인 화합물.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 출원은 전체 내용이 본원에 명백하게 참고 인용되어 있는 2008년 9월 16일자로 출원된 미국 가출원 번호 61/097,488을 우선권 주장하여 특허 청구한 것이다.

[0002] 그 특허 청구된 발명은 산학 공동 연구 계약에 대한 다음의 당사자: 리젠즈 오브 더 유니버시티 오브 미시간, 프린스턴 유니버시티, 더 유니버시티 오브 썬더 캘리포니아 및 더 유니버설 디스플레이 코퍼레이션 중 하나 이상에 의해, 그 하나 이상을 위해 그리고/또는 그 하나 이상과 협력으로 이루어진 것이다. 그 계약은 특허 청구된 발명이 이루어진 당일 및 그 이전부터 유효하고, 그 특허 청구된 발명은 상기 계약의 영역 내에서 수행된 활동의 결과로서 이루어진 것이다.

[0003] 본 발명은 유기 발광 디바이스(OLED)에 관한 것이고, 구체적으로 그러한 디바이스에 사용된 인광성 유기 물질에 관한 것이다. 보다 구체적으로, 본 발명은 OLED 내로 혼입된 좁은 스펙트럼을 갖는 이리듐 화합물에 관한 것이다.

배경 기술

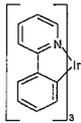
[0004] 유기 물질을 이용하는 광전자 디바이스는 다수의 이유로 점점 바람직하게 되고 있다. 그러한 디바이스를 제조하는데 사용된 물질 중 다수가 비교적 저렴하므로, 유기 광전자 디바이스는 무기 디바이스에 비하여 비용상 이점에 대한 가능성을 갖게 된다. 또한, 유기 물질의 고유 특성, 예컨대 가요성은 유기 물질이 가요성 기관 상에서의 제조와 같은 특정 용도에 매우 양호하게 적합하도록 만든다. 유기 광전자 디바이스의 예로는 유기 발광 디바이스(OLED), 유기 광트랜지스터, 유기 광기전력 전지, 및 유기 광검출기가 포함된다. OLED의 경우, 그 유기 물질은 통상적인 물질에 비하여 성능상 이점을 가질 수 있다. 예를 들면, 유기 방출 층이 광을 방출하는 파장은 일반적으로 적당한 도펀트에 의해 용이하게 동조될 수 있다.

[0005] OLED는 전압이 디바이스에 걸쳐서 인가될 때 광을 방출하는 유기 박막을 이용한다. OLED는 플랫 패널 디스플레이, 조명, 및 백라이트와 같은 용도에서 사용하기 위한 점차적으로 흥미로운 기술이 되어가고 있다. 몇몇 OLED

물질 및 구성이 미국 특허 번호 5,844,363, 6,303,238 및 5,707,745에 설명되어 있으며, 이들 특허는 그 전체 내용이 본원에 참고 인용되어 있다.

[0006] 인광성 발광 분자에 대한 하나의 용도는 풀 칼라 디스플레이(full color display)이다. 그러한 디스플레이에 대한 공업 규격은 "포화" 칼라라고 칭하는 특정 칼라를 방출하도록 적합하게 된 화소(pixel)를 필요로 한다. 특히, 그러한 규격은 포화 적색, 녹색 및 청색 화소를 필요로 한다. 칼라는 CIE 좌표를 사용하여 측정할 수 있으며, 이는 해당 기술 분야에 잘 알려져 있다.

[0007] 녹색 방출 분자의 한 예는 IR(ppy)₃으로 표시된 트리스(2-페닐피리딘) 이리듐이고, 이것은 하기 화학식 I의 구조를 갖는다.



[0008] 본원에서 이 도면 및 이후 도면에서는, 질소에서 금속(여기서는 Ir임)로의 배위 결합(daptive bond)이 직선으로서 설명되어 있다.

[0010] 본원에 사용된 바와 같이, 용어 "유기"는 유기 광전자 디바이스를 제조하는데 사용될 수 있는 중합체 물질 뿐만 아니라 소분자 유기 물질을 포함한다. "소분자"는 중합체가 아닌 임의의 유기 물질을 칭하고, "소분자"는 실제적으로 매우 클 수 있다. 소분자는 일부 환경에서 반복 단위를 포함할 수 있다. 예를 들면, 치환기로서 장쇄 알킬기를 사용하더라도, "소분자" 부류로부터 분자가 벗어나는 것이 아니다. 소분자는 또한 중합체 내로, 예를 들면 중합체 골격 상의 펜던트 기로서 또는 그 골격의 부분으로서 혼입될 수도 있다. 소분자는 또한 덴드리머의 코어 부분으로서 작용할 수도 있으며, 그 덴드리머는 코어 부분 상에 형성된 일련의 화학 껍질로 구성되어 있다. 덴드리머의 코어 부분은 형광성 또는 인광성 소분자 에미터일 수 있다. 덴드리머는 "소분자"일 수 있고, OLED의 분야에 현재 사용되는 모든 덴드리머는 소분자인 것으로 알려져 있다.

[0011] 본원에 사용된 바와 같이, "툽"은 기관으로부터 가장 멀리 있다는 것을 의미하고, 반면에 "바텀"은 기관에 가장 가까이 있다는 것을 의미한다. 제1 층이 제2 층 "위에 배치된" 것으로 설명되어 있는 경우, 제1 층은 기관으로부터 더욱 더 멀리 배치된다. 제1 층이 제2 층 "과 접촉한 상태로" 있다는 것을 특정하지 않는 한, 제1 층과 제2 층 사이에는 다른 층이 존재할 수 있다. 예를 들면, 캐소드는 애노드 "위에 배치된" 것으로서 설명될 수 있지만, 이들 사이에는 다양한 유기 층이 존재한다.

[0012] 본원에 사용된 바와 같이, "용액 처리가능한"은, 용액 또는 현탁액 형태로, 액체 매질 중에 용해, 분산 또는 수송될 수 있거나, 또는 그 액체 매질로부터 침착될 수 있다는 것을 의미한다.

[0013] 리간드는, 그 리간드가 방출성 물질의 광활성 특성에 직접 기여하는 것으로 간주될 때, "광활성"이라고 칭할 수 있다. 리간드는, 그 리간드가 방출성 물질의 광활성 특성에 기여하지 않는 것으로 간주될 때, "보조성"이라고 칭할 수 있으며, 하지만 보조성 리간드는 광활성 리간드의 특성을 변경할 수 있다.

[0014] 본원에 사용된 바와 같이, 그리고 해당 기술 분야의 당업자에 의해 일반적으로 이해되고 있는 바와 같이, 제1 "최고 점유 분자 오비탈(Highest Occupied Molecular Orbital: HOMO)" 또는 "최저 비점유 분자 오비탈(Lowest Unoccupied Molecular Orbital: LUMO)" 에너지 준위는, 제1 에너지 준위가 진공 에너지 준위에 보다 가까이 있다면, 제2 HOMO 또는 LUMO 에너지 준위보다 "더 크거나" 또는 "더 높다". 이온화 전위(IP)가 진공 준위에 비하여 음성 에너지로서 측정되기 때문에, 보다 높은 HOMO 에너지 준위는 보다 작은 절대 값을 갖는 IP(보다 덜 음성인 IP)에 해당한다. 유사하게, 보다 높은 LUMO 에너지 준위는 보다 작은 절대 값을 갖는 전자 친화도(EA)(보다 덜 음성인 EA)에 해당한다. 톱에는 진공 준위가 있는 통상적인 에너지 준위 다이어그램 상에서, 물질의 LUMO 에너지 준위는 동일 물질의 HOMO 에너지 준위보다 더 높다. "보다 높은" HOMO 또는 LUMO 에너지 준위는 "보다 낮은" HOMO 또는 LUMO 에너지 준위보다 그러한 다이어그램의 톱에 더 가까이 있는 것으로 나타난다.

[0015] 본원에 사용된 바와 같이, 그리고 해당 기술 분야의 당업자에 의해 일반적으로 이해되고 있는 바와 같이, 제1 일 함수는, 이 제1 일 함수가 보다 높은 절대 값을 갖는다면, 제2 일 함수보다 "더 크거나" 또는 "더 높다". 일 함수가 일반적으로 진공 준위에 대하여 음수로서 측정되기 때문에, 이는 "보다 높은" 일 함수가 보다 더 음성이라는 것을 의미한다. 톱에는 진공 준위가 있는 통상적인 에너지 준위 다이어그램 상에서, "보다 높은" 일 함수는 진공 준위로부터 아래 방향으로 보다 더 멀리 있는 것으로 예시된다. 따라서, HOMO 및 LUMO 에너지 준위의 정의

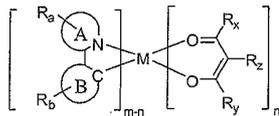
는 일 함수와는 다른 관례를 따른다.

[0016] OLED 및 상기 설명된 정의에 대한 보다 많은 상세 내용은 미국 특허 번호 7,279,704에서 발견될 수 있으며, 이 특허는 그 전체 내용이 본원에 참고 인용되어 있다.

발명의 내용

[0017] 발명의 개요

[0018] 본 발명은 하기 화학식을 갖는 화합물을 제공한다:



[0019] 상기 식 중,
[0020]

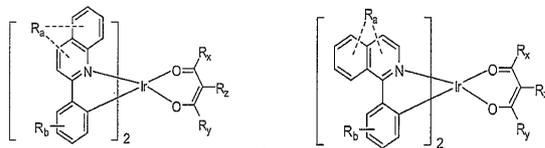
[0021] M은 40보다 큰 원자량의 금속이고;

[0022] A 및 B는 각각 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로방향족 고리이며, A-B는 고리 A 상의 질소 원자 및 고리 B 상의 sp² 혼성화 탄소 원자를 통해 금속에 배위결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리의 결합 쌍을 나타내고;

[0023] R_a, R_b, R_x, R_y, R_z는 각각 비치환(no substitution), 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서 R_a 및 R_b는 각각 하나 이상의 치환기를 나타내며, R_x 및 R_y 중 하나 이상은 카르보닐 기에 대하여 α 위치보다 더 먼 위치에서 분지화하는 분지형 알킬 부분을 함유하고;

[0024] m은 금속의 산화 상태이며;

[0025] n은 1 이상이다.



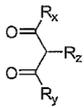
[0026] 그 화합물은 또는 일 수 있다. R_x 및 R_y는 이소부틸 기일 수 있다. R_z는 수소일 수 있다. 구체적인 예시의 화합물, 예를 들면 화합물 3 및 5-7이 또한 제공된다.

[0027] 또한, 구체적인 화합물, 예를 들면 화합물 1, 2, 4 및 8-12가 제공된다.

[0028] 본 발명은 유기 발광 디바이스를 제공한다. 이 디바이스는 애노드, 캐소드 및 이 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 층을 포함한다. 그 유기 층은 하나 이상의 본 발명의 화합물을 포함한다. 그 유기 층은 방출성 도펀트 및 호스트를 함유하는 방출 층일 수 있으며, 여기서 방출성 도펀트는 본 발명의 화합물이고, 호스트는 BAlq이다.

[0029] 또한, 본 발명은 소비재(consumer product)를 제공한다. 이 소비재는 애노드, 캐소드 및 이 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 층을 자체 포함하는 디바이스를 포함한다. 그 유기 층은 하나 이상의 본 발명의 화합물을 포함한다.

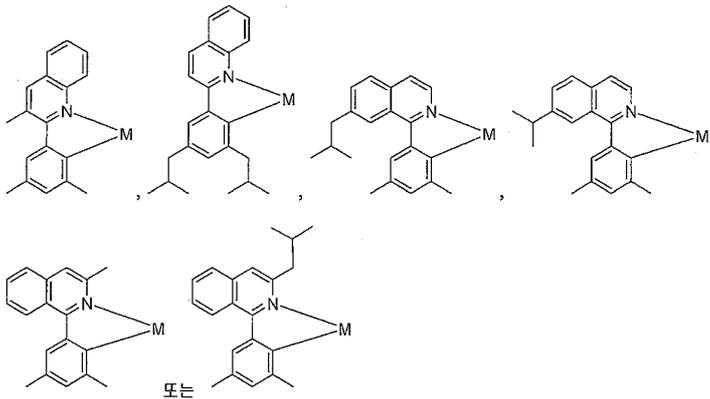
[0030] 본 발명은 를 R_z-X와 반응시켜서 유리 염기 를 형성시키는 단계; 미반응된 및 생성물



를, 알루미늄으로 이루어진 고정 상을 사용하는 컬럼 크로마토그래피로 분리하는 단계를 포함하는 방법을 제공하며, 상기 식 중, R_x 및 R_y는 각각 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며, R_z는 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 선택되고, X = Cl, Br, I, OTf, OTs 또는 OH이다.

[0031]

또한, 본 발명은 유기금속 화합물을 제공하며, 그 유기금속 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된 구조식을 함유한다:



[0032]

도면의 간단한 설명

[0033]

도 1은 유기 발광 디바이스를 도시한 것이다.

도 2는 별도의 전자 수송 층을 갖지 않는 역위(inverted) 유기 발광 디바이스를 도시한 것이다.

도 3은 이리듐 화합물의 예를 도시한 것이다.

상세한 설명

일반적으로, OLED는 애노드와 캐소드 사이에 배치되어 그 애노드와 캐소드에 전기 접속되는 하나 이상의 유기 층을 포함한다. 전류가 인가될 때, 애노드는 정공을 그리고 캐소드는 전자를 유기 층(들) 내로 주입한다. 그 주입된 정공 및 전자 각각은 반대 하전된 전극을 향해 이동한다. 전자와 정공이 동일 분자 상에 편재화될 때, 여기된 에너지 상태를 갖는 편재화된 전자-정공 쌍인 "엑시톤"이 형성된다. 엑시톤이 광방출 메커니즘을 통해 이완될 때 광이 방출된다. 일부 경우, 엑시톤은 엑시머 또는 엑시플렉스 상에 편재화될 수 있다. 비-방사선 메커니즘, 예컨대 열적 이완이 또한 발생할 수 있지만, 일반적으로 상당히 바람직하지 못한 것으로 간주된다.

초기 OLED에서는 예를 들면 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 4,769,292에 개시되어 있는 바와 같이 단일 상태("형광성")로부터 광을 방출하는 방출성 분자가 사용된다. 형광성 방출은 일반적으로 10 나노초 미만의 시간 프레임에서 발생한다.

보다 최근에는 삼중항 상태("인광성")로부터 광을 방출하는 방출성 물질을 갖는 OLED가 입증되고 있다. 문헌[Baldo et al., "Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices," Nature, vol. 395, 151-154, 1998; ("Baldo-I")] 및 문헌[Baldo et al., "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence," Appl. Phys. Lett., vol. 75, No. 3, 4-6 (1999) ("Baldo-II")]을 참조할 수 있으며, 이들 문헌은 그 전체 내용이 참고 인용되어 있다. 인광성은 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 7,279,704, cols. 5-6에 보다 상세히 설명되어 있다.

도 1은 유기 발광 디바이스(100)를 도시한 것이다. 도면은 반드시 실제 척도로 도시되어 있는 것이 아니다. 디바이스(100)는 기관(110), 애노드(115), 정공 주입 층(120), 정공 수송 층(125), 전자 차단 층(130), 방출 층(135), 정공 차단 층(140), 전자 수송 층(145), 전자 주입 층(150), 보호 층(155), 및 캐소드(160)를 포함할 수 있다. 캐소드(160)는 제1 전도성 층(162) 및 제2 전도성 층(164)을 갖는 복합 캐소드이다. 디바이스(100)는

설명된 층들을 순서대로 침착시킴으로써 제조할 수 있다. 이러한 다양한 층들의 특성 및 기능 뿐만 아니라 예시 물질들은 참고 인용되어 있는 미국 특허 7,279,704, cols. 6-10에 보다 더 상세히 설명되어 있다.

이러한 층들 각각에 대한 많은 수 많은 예가 이용가능하다. 예를 들면, 가요성 투명 기관-애노드 조합이 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 5,884,363에 개시되어 있다. p-도핑된 호스트 수송 층의 예는, 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 출원 공개 번호 2003/0230980에 개시된 바와 같이, 몰비 50:1로 F₄-TCNQ에 의해 도핑된 m-MTDATA이다. 방출성 및 호스트 물질의 예는 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 6,303,238(Thompson et al.에게 허여됨)에 개시되어 있다. n-도핑된 전자 수송 층의 예는, 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 출원 공개 번호 2003/0230980에 개시되어 있는 바와 같이, 몰비 1:1로 Li에 의해 도핑된 BPhen이다. 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 5,703,436 및 5,707,745에는, Mg:Ag와 같은 금속의 박층과 오버라이딩(overlying) 투명한 전기 전도성 스퍼터 침착된 ITO 층을 갖는 복합 캐소드를 비롯한 캐소드의 예가 개시되어 있다. 차단 층의 이론 및 용도는 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 6,097,147 및 미국 특허 출원 공개 번호 2003/0230980에 보다 상세히 설명되어 있다. 주입 층의 예는 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 출원 공개 번호 2004/0174116에 제공되어 있다. 보호 층의 설명은 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 출원 공개 번호 2004/0174116에서 찾아 볼 수 있다.

도 2는 역위 OLED(200)를 나타낸다. 이 디바이스(200)는 기관(210), 캐소드(215), 방출 층(220), 정공 수송 층(225) 및 애노드(230)를 포함한다. 디바이스(200)는 설명된 층들을 순서 대로 침착시킴으로써 제조할 수 있다. 가장 일반적인 OLED 구성이 애노드 위에 배치된 캐소드를 갖기 때문에, 디바이스(200)는 애노드(230) 하에 배치된 캐소드(215)를 가지며, 디바이스(200)는 "역위(inverted)" OLED라고 칭할 수 있다. 디바이스(100)에 관련하여 설명된 것과 유사한 물질은 디바이스(200)의 상응하는 층에 사용될 수 있다. 도 2는 일부 층을 디바이스(100)의 구조로부터 생략할 수 있는 방법의 한 예를 제공한다.

도 1 및 도 2에 예시된 단순 층상 구조가 비제한적인 예의 방식으로 제공되며, 본 발명의 실시양태는 다양한 다른 구조와 연관되어 사용될 수 있는 것으로 이해된다. 설명된 특정 물질 및 구조가 사실상 예시적이며, 다른 물질 및 구조가 사용될 수 있다. 기능성 OLED가 상이한 방식으로 설명된 다양한 층들을 조합함으로써 달성될 수 있거나, 또는 층들이 디자인, 성능 및 비용 인자에 기초하여 전체적으로 생략될 수 있다. 구체적으로 설명되지 않은 다른 층이 사용될 수 있다. 구체적으로 설명된 것을 제외한 물질이 사용될 수 있다. 본원에 제공된 수 많은 예가 단일 물질을 포함하는 것으로서 다양한 층을 설명하고 있긴 하지만, 물질들의 조합, 예컨대 호스트와 도펀트의 혼합물, 또는 보다 일반적으로 임의 혼합물이 사용될 수 있다. 또한, 층들은 다양한 서브층을 가질 수 있다. 본원에서 다양한 층에 부여된 명칭은 엄격하게 제한하고자 하는 것이 아니다. 예를 들면, 디바이스(200)에서, 정공 수송 층(225)은 방출 층(220) 내로 정공을 수송하고 정공을 주입하고, 정공 수송 층 또는 정공 주입 층으로서 설명될 수 있다. 하나의 실시양태에서, OLED는 캐소드와 애노드 사이에 배치된 "유기 층"을 갖는 것으로서 설명될 수 있다. 이러한 유기 층은 단일 층을 포함할 수 있거나, 또는 예를 들어 도 1 및 2와 관련하여 설명된 바와 같은 상이한 유기 물질의 복수 층을 더 포함할 수 있다.

구체적으로 설명되지 않은 구조 및 물질, 예컨대 전체 내용이 본원에 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 5,247,190(Friend et al.에게 허여됨)에 개시된 바와 같은 중합체 물질(PLED)로 구성된 OLED가 또한 사용될 수 있다. 추가 예를 들면, 단일 유기 층을 갖는 OLED가 사용될 수 있다. OLED는, 예를 들면 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 5,707,745(Forrest et al.에게 허여됨)에 설명된 바와 같이 적층될 수 있다. OLED 구조는 도 1 및 도 2에 예시된 단순한 층상 구조로부터 유도될 수 있다. 예를 들면, 기관은 전체 내용이 본원에 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 6,091,195(Forrest et al.에게 허여됨)에 설명된 바와 같이 메사 구조 및/또는 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 5,834,893호에 설명된 바와 같이 피트 구조와 같은, 아웃 커플링(outcoupling)을 개선시키는 각 형성된 반사성 표면을 포함할 수 있다.

달리 특정되어 있지 않다면, 다양한 실시양태의 층들 중 어느 것이든 임의의 적합한 방법에 의해 침착될 수 있다. 유기 층의 경우, 바람직한 방법으로는 열적 증발, 잉크 췌, 예컨대 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 6,013,982 및 6,087,196에 설명된 것, 유기 기상 침착(OVPD), 예컨대 전체 내용이 본원에 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 6,337,102(Forrest et al.에게 허여됨)에 설명된 것, 및 유기 증기 췌 프린팅(organic vapor jet printing: OVJP)에 의한 침착, 예컨대 전체 내용이 본원에 참고 인용되어 있는 미국 특허 출원 연속 번호 10/233,470에 설명된 것이 포함될 수 있다. 다른 적합한 침착 방법으로는 스핀 코팅 및 다른 용액계 공정이 포함된다. 용액계 공정은 질소 또는 불활성 대기 중에서 수행하는 것이 바람직하다. 다른 층의 경우, 바람직한 방법으로는 열적 증발이 포함된다. 바람직한 패터닝 방법으로는 마스크를 통한 침착, 상온 용접,

예컨대 전체 내용이 본원에 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 6,294,398 및 6,468,819에 설명된 것, 및 침착 방법 중 일부, 예컨대 잉크젯 및 OVJD와 관련된 패턴화가 포함된다. 다른 방법이 또한 사용될 수 있다. 침착하고자 하는 물질은 이것이 구체적인 침착 방법과 상용성을 갖도록 만들기 위해서 개질화될 수 있다. 예를 들면, 알킬 및 아릴 기와 같은 치환기, 분지형 또는 비분지형이고, 바람직하게는 3개 이상의 탄소를 함유하는 것은 용액 처리를 수행할 수 있는 성능을 강화시키기 위해서 소분자로 사용될 수 있다. 20개 이상의 탄소를 갖는 치환기가 사용될 수 있으며, 3-20개의 탄소가 바람직한 범위이다. 비대칭성 구조를 지닌 물질은 대칭성 구조를 갖는 것보다 더 우수한 용액 처리성(solution processibility)을 가질 수 있는데, 왜냐하면 비대칭성 물질은 재결정화하는 경향을 더 낮게 가질 수 있기 때문이다. 덴드리머 치환기는 용액 처리를 수행하는 소분자의 성능을 강화시키기 위해서 사용될 수 있다.

본 발명의 실시양태에 따라 제조된 디바이스는 플랫 패널 디스플레이, 컴퓨터 모니터, 텔레비전, 빌보드, 내부 또는 외부 조명 및/또는 시그널링을 위한 라이트, 헤즈업 디스플레이(heads up display), 완전 투명 디스플레이, 플렉서블 디스플레이, 레이저 프린터, 전화기, 휴대폰, PDA(personal digital assistant), 랩톱 컴퓨터, 디지털 카메라, 캠코더, 뷰파인더, 마이크로-디스플레이, 차량, 대면적 웹, 극장 또는 운동장 스크린, 또는 표지판(sign)을 비롯한 광범위한 소비자 제품(consumer product) 내로 혼입될 수 있다. 본 발명에 따라 제조된 디바이스를 제어하기 위해서, 능동 매트릭스 및 활성 매트릭스를 비롯한 다양한 제어 메카니즘이 사용될 수 있다. 디바이스 중 다수가 인간에게 편안한 온도 범위, 예컨대 18 내지 30°C, 보다 바람직하게는 실온(20-25°C)에서 사용되도록 의도되고 있다.

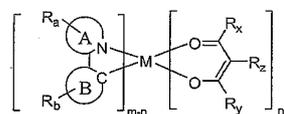
본원에 설명된 물질 및 구조는 OLED를 제외한 디바이스에서 용도를 가질 수 있다. 예를 들면, 유기 태양 전지 및 유기 광검출기와 같은 다른 광전자 디바이스는 상기 물질 및 구조를 이용할 수 있다. 보다 일반적으로, 유기 트랜지스터와 같은 유기 디바이스는 상기 물질 및 구조를 이용할 수 있다.

용어 할로, 할로겐, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 헤테로사이클릭 기, 아릴, 방향족 기, 및 헤테로아릴은 해당 기술 분야에 공지되어 있고, 전체 내용이 참고 인용되어 있는 미국 특허 번호 7,279,704, cols. 31-32에 정의되어 있다.

다수의 Ir(2-페닐퀴놀린) 및 Ir(1-페닐이소퀴놀린) 유형 인광성 물질이 합성되고 있고, 이것을 도펀트 에미터로서 혼입하고 있는 OLED가 제조되고 있다. 그 디바이스는 고 전류 효율, 고 안정성, 좁은 방출성, 개선된 처리성(processibility)(예를 들면, 고 용해도 및 저 승화 온도) 및/또는 고 발광 효율: 외부 양자 효율 비율(LE:EQE)을 유리하게 나타낼 수 있다.

기본 구조로서 Ir(3-Meppy)₃을 사용하여, 방출 리간드 및 보조 리간드 상에 모두 존재하는 상이한 알킬 치환 패턴을 연구하여 물질 처리성(증발 온도, 증발 안정성, 용해도 등)에 관한 구조-특성 관계 및 Ir(2-페닐퀴놀린) 및 Ir(1-페닐이소퀴놀린) 유형 인광성 물질 및 이의 PHOLED의 디바이스 특성을 달성하게 되었다. 알킬 치환은 증발 온도, 용해도, 에너지 준위, 디바이스 효율 및 방출 스펙트럼의 좁음성(narrowness)의 관점에서 광범위한 가변성(tunability)을 제공한다. 더구나, 그 치환은 적당히 적용될 때 디바이스 작동시 화학적으로 안정한 작용기이기도 하다.

본 발명은 하기 화학식(또한 도 3에도 예시된 것임)을 갖는 화합물을 제공한다:



상기 식 중,

M은 40보다 큰 원자량의 금속이고;

A 및 B는 각각 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로방향족 고리이며, A-B는 고리 A 상의 질소 원자 및 고리 B 상의 sp² 혼성화 탄소 원자를 통해 금속에 배위결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리의 결합 쌍을 나타내고;

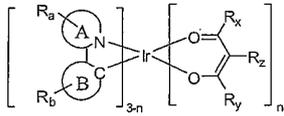
R_a, R_b, R_x, R_y, R_z는 각각 비치환, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서 R_a 및 R_b는 각각 하나 이상의 치환기를 나타내며, 결합하여 융합된 고리를 형성할 수 있고,

R_x 및 R_y 중 하나 이상은 카르보닐 기에 대하여 α 위치보다 더 먼 위치에서 분지화하는 분지형 알킬 부분을 함유하고;

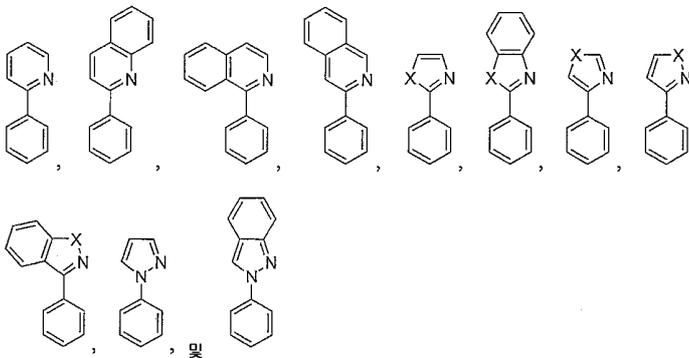
m 은 금속의 산화 상태이며;

n 은 m 보다 작은 정수이고 1 이상이다.

그 화합물은 하기 화학식을 가질 수 있다:

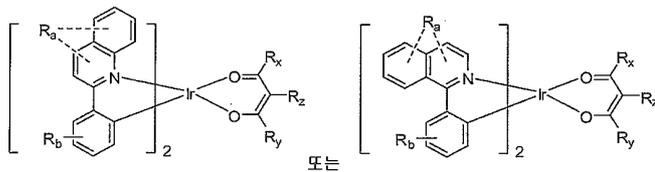


A-B에 의해 표시된, 그 화합물 내에 존재하는 방향족 또는 헤테로방향족 고리의 결합 쌍은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

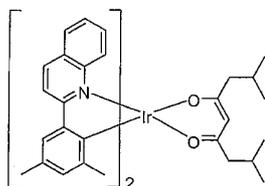


상기 식 중, X는 N-R, O 또는 S이고, 여기서 R은 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

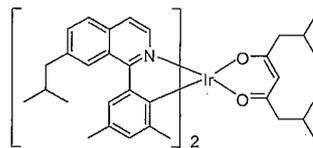
추가로, 그 화합물은 하기 화학식을 가질 수 있다:



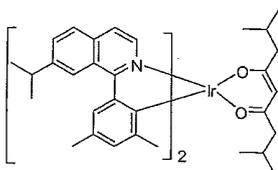
하나의 예에서, R_x 및 R_y 는 이소부틸 기이다. 다른 예에서, R_z 는 수소이다. 예시적 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된 화합물을 포함한다:



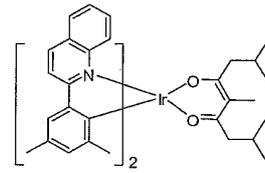
화합물 3



화합물 6



화합물 7



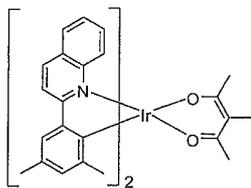
화합물 5

을 포함

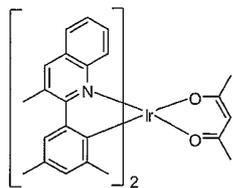
추가로, R₂가 메틸인 화합물이 제공된다. 이러한 화합물의 구체적인 예는 한다.

본원에 설명된 화합물은 고 디바이스 효율 및 안정성, 및 다른 소정의 특성 중에서도 특히 매우 좁은 스펙트럼을 제공한다. 그 화합물의 페닐 고리(고리 B) 상의 메틸 치환기와 조합하여, 분지형 치환기 R_x 및 R_y 중 하나 이상은 그 화합물의 매우 좁은 방출 스펙트럼 및 다른 주목할 만한 우수한 특성을 제공할 수 있다.

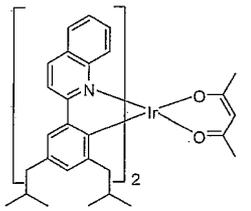
추가로, 본 발명은 특정 화합물을 제공하며, 그 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



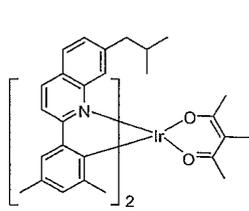
화합물 1



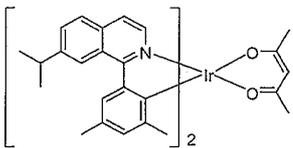
화합물 2



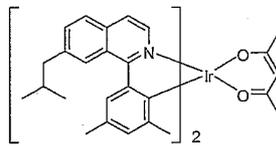
화합물 4



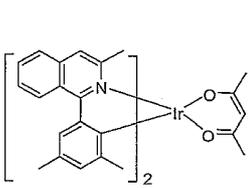
화합물 8



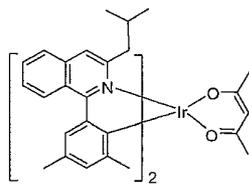
화합물 9



화합물 10

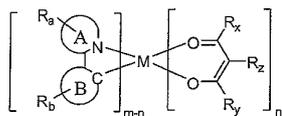


화합물 11



화합물 12

또한, 본 발명은 유기 발광 디바이스를 제공한다. 이 디바이스는 애노드, 캐소드 및 이 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 층을 포함한다. 이 유기 층은 하기 화학식을 갖는 화합물을 더 포함한다:



상기 식 중,

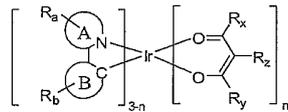
M은 40보다 큰 원자량의 금속이고;

A 및 B는 각각 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로방향족 고리이며, A-B는 고리 A 상의 질소 원자 및 고리 B 상의 sp^2 혼성화 탄소 원자를 통해 금속에 배위결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리의 결합 쌍을 나타내고;

R_a , R_b , R_x , R_y , R_z 는 각각 비치환, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서 R_a 및 R_b 는 각각 하나 이상의 치환기를 나타내며, R_x 및 R_y 중 하나 이상은 카르보닐 기에 대하여 α 위치보다 더 먼 위치에서 분지화하는 분지형 알킬 부분을 함유하고;

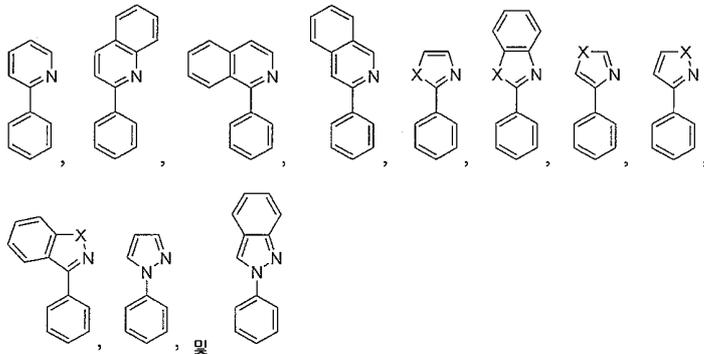
m 은 금속의 산화 상태이며;

n 은 m 보다 작은 정수이고 1 이상이다.



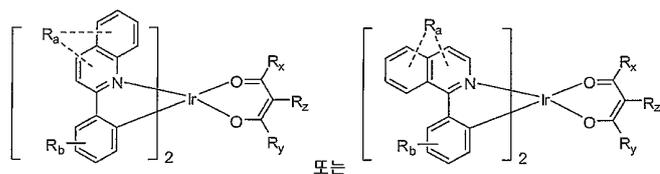
그 디바이스는 화합물 $\left[\left(\begin{array}{c} R_a \\ \text{A-N} \\ R_b \\ \text{B} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} R_x \\ \text{O} \\ R_y \\ \text{O} \end{array} \right) \right]_n$ 을 함유할 수 있다.

그 디바이스는 화합물의 A-B가 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물을 함유할 수 있다:

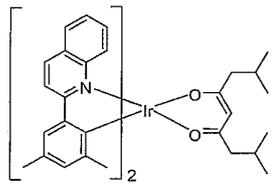


상기 식 중, X는 N-R, O 또는 S이고, 여기서 R은 비치환, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

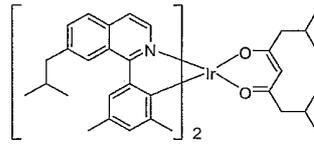
*추가로, 그 디바이스는 하기 화학식을 갖는 화합물을 함유할 수 있다:



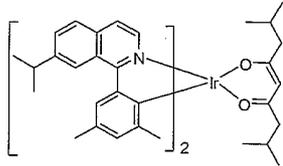
하나의 예에서, 그 디바이스는 R_x 및 R_y 가 이소부틸 기인 화합물을 함유할 수 있다. 또다른 예에서, 그 디바이스는 R_z 가 수소인 화합물을 함유할 수 있다. 또다른 예에서, 그 디바이스는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된 화합물을 함유할 수 있다:



화합물 3

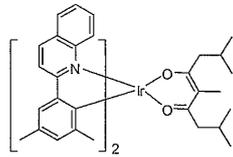


화합물 6



화합물 7

추가로, 그 디바이스는 R_2 가 메틸인 화합물을 함유할 수 있다. 게다가, 하나의 예에서, 그 디바이스는 화합물

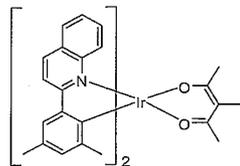


화합물 5

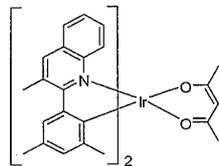
을 함유할 수 있다.

디바이스의 유기 층은 본 화합물 및 호스트를 포함하는 방출 층이다. 하나의 예에서, 그 화합물은 방출성 물질이다. 다른 예에서, 그 호스트는 금속 배위결합 착물이다. 그 호스트 물질은 BA1q일 수 있다. 또다른 예에서, 디바이스의 화합물은 방출성 물질이고, 그 호스트는 금속 배위결합 착물이다. 그 호스트 물질은 BA1q일 수 있다.

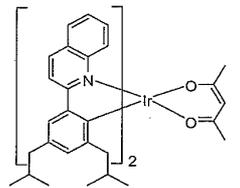
추가로, 본 발명은 유기 발광 디바이스를 제공한다. 그 디바이스는 애노드, 캐소드 및 이 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 층을 포함하고, 그 유기 층은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된 화합물을 포함한다:



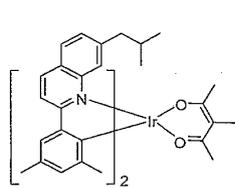
화합물 1



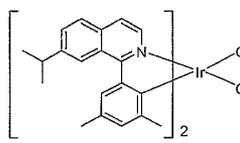
화합물 2



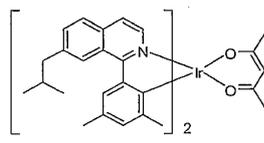
화합물 4



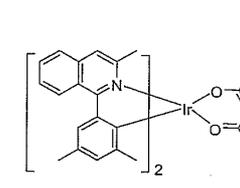
화합물 8



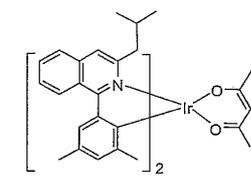
화합물 9



화합물 10



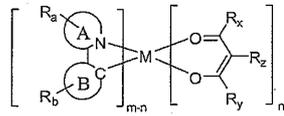
화합물 11



화합물 12

추가로, 그 디바이스의 유기 층은 본 화합물 및 호스트를 포함하는 방출 층일 수 있다. 본 발명의 화합물이 방출성 물질일 수 있고, 호스트가 금속 배위결합 착물일 수 있다. 예를 들면, 그 호스트는 BA1q일 수 있다.

또한, 본 발명은 소비재를 제공한다. 그 소비재는 디바이스를 포함하고, 그 디바이스는 애노드, 캐소드, 및 이 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 층을 더 포함한다. 그 유기 층은 하기 화학식을 갖는 화합물을 더 포함한다:



상기 식 중,

M은 40보다 큰 원자량의 금속이고;

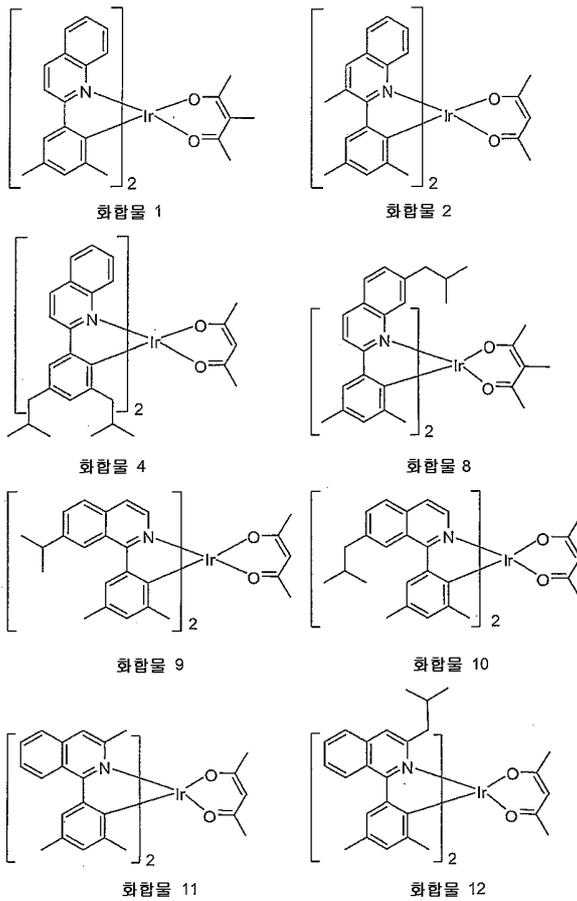
A 및 B는 각각 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로방향족 고리이며, A-B는 고리 A 상의 질소 원자 및 고리 B 상의 sp² 혼성화 탄소 원자를 통해 금속에 배위결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리의 결합 쌍을 나타내고;

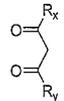
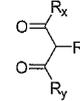
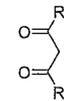
R_a, R_b, R_x, R_y, R_z는 각각 비치환, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서 R_a 및 R_b는 각각 하나 이상의 치환기를 나타내며, R_x 및 R_y 중 하나 이상은 카르보닐 기에 대하여 α 위치보다 더 먼 위치에서 분지화하는 분지형 알킬 부분을 함유하고;

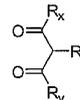
m은 금속의 산화 상태이며;

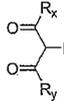
n은 1 이상이다.

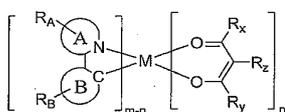
추가로, 본 발명은 소비재를 제공하며, 그 소비재는 디바이스를 포함하고, 그 디바이스는 애노드, 캐소드 및 이 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 층을 더 포함한다. 그 유기 층은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된 화합물을 더 포함한다:



추가로, 본 발명은  를 R_z-X와 반응시켜서 유리 염기  를 형성시키는 단계; 미반응된  및

생성물  를, 알루미늄으로 이루어진 고정 상을 사용하는 컬럼 크로마토그래피로 분리하는 단계를 포함하는 방법을 제공하며, 상기 식 중, R_x 및 R_y는 각각 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며, R_z는 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 선택되고, X = Cl, Br, I, OTf, OTs 또는 OH이다.

추가로, 그 방법은  을 M 및 하나 이상의 리간드와 반응시켜서 하기 화학식을 갖는 화합물을 형성시키는 단계를 더 포함할 수 있다:



상기 식 중,

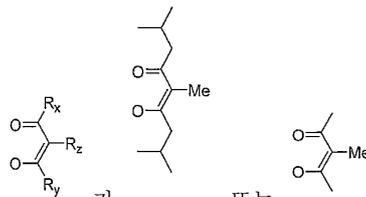
M은 40보다 큰 원자량의 금속이고;

A 및 B는 각각 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로방향족 고리이며, A-B는 고리 A 상의 질소 원자 및 고리 B 상의 sp^2 혼성화 탄소 원자를 통해 금속에 배위결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리의 결합 쌍을 나타내고;

R_A 및 R_B 는 각각 비치환 또는 하나 이상의 치환기를 나타내며, 여기서 치환기 R_A 및 R_B 는 각각 알킬, 헤테로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고;

m은 금속의 산화 상태이며;

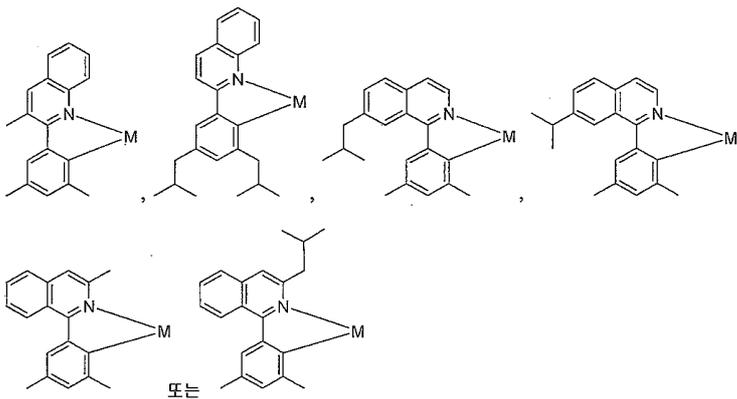
n은 m보다 작은 정수이고 1 이상이다.



추가로, 그 방법은 R_z 가 메틸 기이고 가 또는 인 화합물을 더 포함할 수 있다.

본원에는 수소가 중수소에 의해 치환되어 있는 본 발명의 화합물의 동위원소 유사체가 또한 포함된다.

추가로, 본 발명은 유기금속 화합물을 제공한다. 이 유기금속 화합물은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된 구조식을 함유한다:



상기 식 중, M은 40보다 더 큰 원자량을 지닌 금속이다.

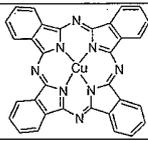
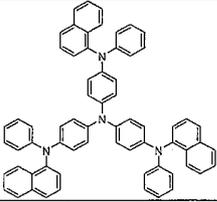
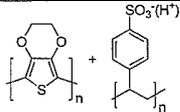
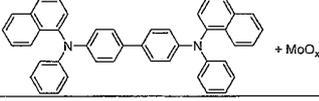
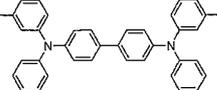
그 제공된 유기금속 화합물은 Ir로서 M을 보유할 수 있다.

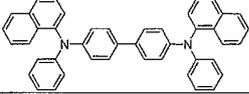
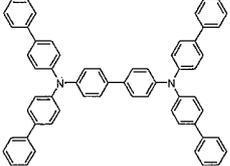
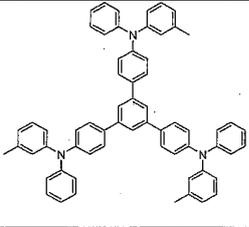
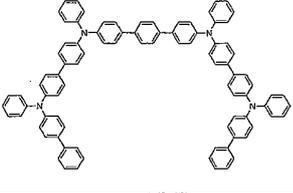
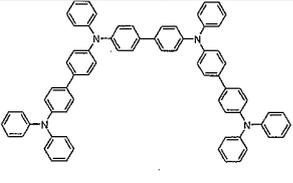
그 제공된 유기금속 화합물은 인광성 물질일 수 있다.

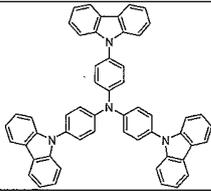
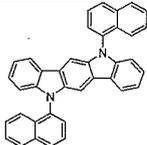
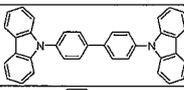
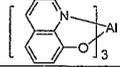
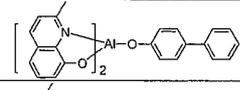
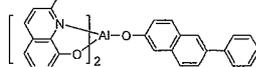
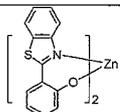
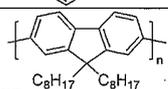
유기 발광 디바이스에서 특정 층에 유용한 것으로서 본원에 설명된 물질은 디바이스 내에 존재하는 광범위하게 다양한 다른 물질과 조합하여 사용될 수 있다. 예를 들면, 본원에 개시된 방출성 도펀트는 존재할 수 있는 광범위하게 다양한 호스트, 수송 층, 차단 층, 주입 층, 전극 및 다른 층과 함께 사용될 수 있다. 이하에 설명되거나 언급된 물질은 본원에 개시된 화합물과 조합하여 유용할 수 있는 물질의 비제한적 예이고, 해당 기술 분야의 당업자라면, 조합하여 유용할 수 있는 다른 물질을 확인할 수 있는 문헌을 용이하게 참고할 수 있다.

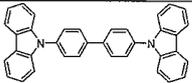
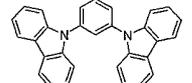
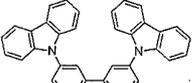
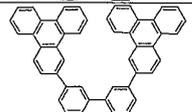
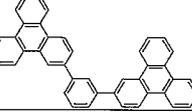
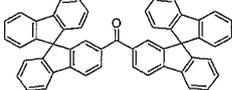
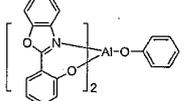
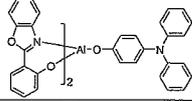
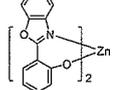
본원에 개시된 물질 이외에도 그리고/또는 그 개시된 물질과 조합하여, 수 많은 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 호스트 물질, 도펀트 물질, 엑시톤/정공 차단 층 물질, 전자 수송 및 전자 주입 물질이 OLED에 사용될 수 있다. 본원에 개시된 물질과 조합하여 OLED에 사용될 수 있는 물질의 비제한적인 예들이 하기 표 1에 열거 기재되어 있다. 표 1에는 물질의 비제한적인 부류, 각 부류의 화합물의 비제한적인 예, 및 그 물질들을 개시하고 있는 참고 문헌이 열거 기재되어 있다.

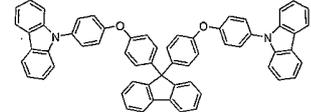
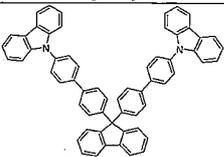
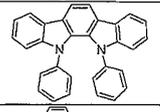
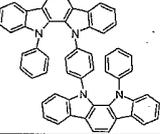
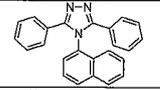
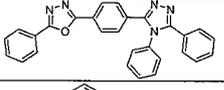
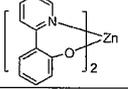
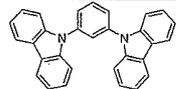
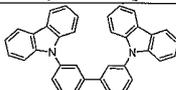
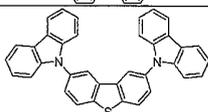
[표 1]

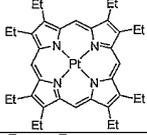
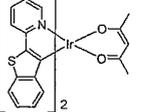
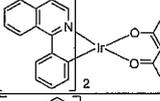
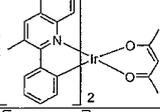
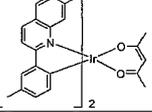
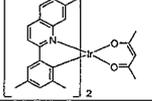
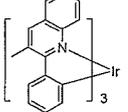
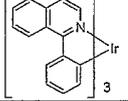
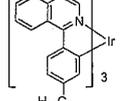
물질	물질의 예	공개물
정공 주입 물질 프탈로시아닌 및 포르피린 화합물		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
성상(starburst) 트리아릴아민		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CFx 플루오로히드로카본 중합체	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
전도성 중합체 (예를 들면, PEDOT:PSS, 폴리아닐린, 폴리티오펜)		Synth. Met. 87, 171 (1997)
금속 산화물, 예컨대 몰리브덴 및 텅스텐 산화물과 착화된 아릴아민	 + MoO _x	SID Symposium Digest, 37, 923 (2006)
정공 수송 물질		
트리아릴아민 (예를 들면, TPD, α-NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)

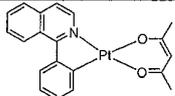
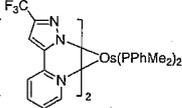
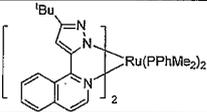
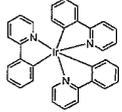
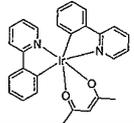
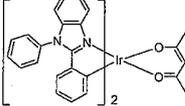
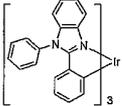
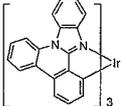
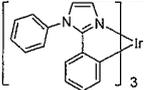
물질	물질의 예	공개물
		US5061569
		EP650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
스피로플루오렌 코어 상의 트리아릴아민		Synth. Met. 91, 209 (1997)

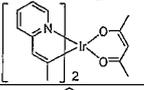
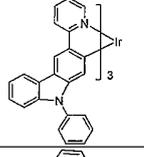
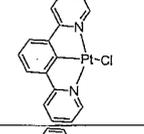
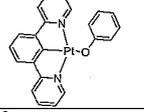
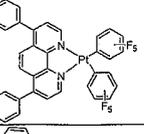
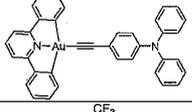
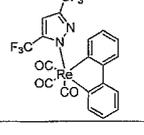
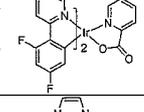
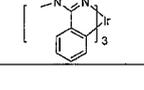
물질	물질의 예	공개물
아릴아민 카르바졸 화합물		Adv. Mater. 6, 677 (1994)
인돌로카르바졸		Synth. Met. 111, 421 (2000)
이소인돌 화합물		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
인광성 OLED 호스트 물질		
적색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예를 들면, Alq ₃ , BAlq)		Nature 395, 151 (1998)
		US20060202194
		WO2005014551
금속 페녹시벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
공역 올리고머 및 중합체 (예를 들면, 폴리플루오렌)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
녹색 호스트		

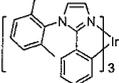
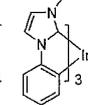
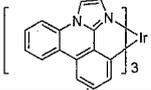
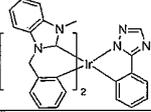
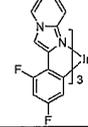
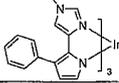
물질	물질의 예	공개물
아크릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US2003175553
		WO2001039234
아릴트리페닐렌 화합물		US20060280965
		US20060280965
중합체(예를 들면, PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
스피로플루오렌 화합물		WO2004093207
금속 페녹시벤조옥사졸 화합물		WO05089025
		WO06132173
		JP200511610

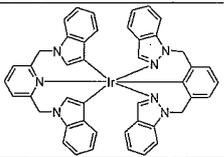
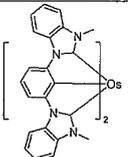
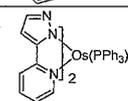
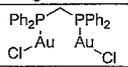
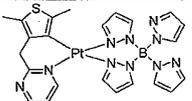
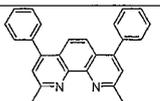
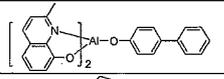
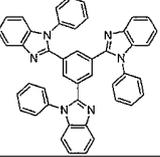
물질	물질의 예	공개물
스피로플루오렌-카르바졸 화합물		JP2007254297
		JP2007254297
인돌로카르바졸		WO07063796
		WO07063754
5원 고리 전자 부족 해태로사이클(예를 들면, 트리아졸, 옥사디아졸)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO04107822
금속 폐녹시피리딘 화합물		WO05030900
청색 호스트		
아랄카르바졸		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US20070190359
디벤조티오펜-카르바졸 화합물		WO2006114966
인광성 도펀트		

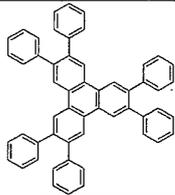
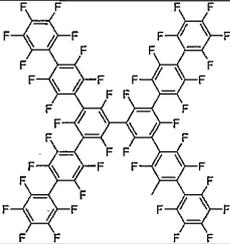
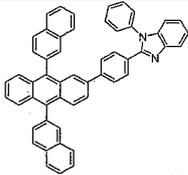
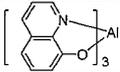
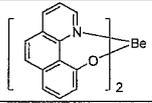
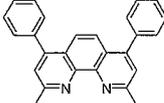
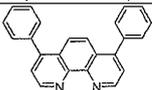
물질	물질의 예	공개물
적색 도펀트 중금속 포르피린 (예를 들면, PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
이리듐(III) 유기금속 착물		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US06835469
		US06835469
		US20060202194
		US20060202194
		US07087321
		US07087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)

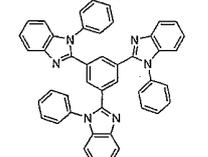
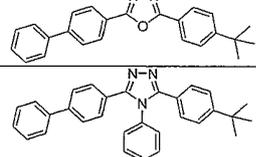
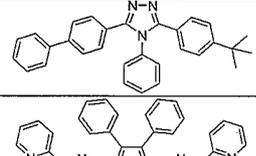
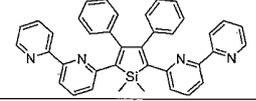
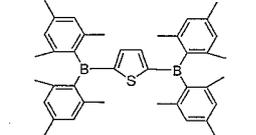
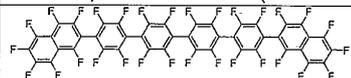
물질	물질의 예	공개물
백금(II) 유기금속 착물		WO2003040257
오스뮴(III) 착물		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
루테튬(II) 착물		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
녹색 도펀트		
이리듐(III) 유기금속 착물	 및 이의 유도체	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
		US2002034656
		US06687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US2007190359
		US 2006008670 JP2007123392

물질	물질의 예	공개물
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
Pt(II) 유기금속 착물		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
금 착물		Chem. Commun. 2906 (2005)
레늄(III) 착물		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
청색 도펀트		
이리듐(III) 유기금속 착물		WO2002002714
		WO2006009024

물질	물질의 예	공개물
		US2006251923
		WO2006056418, US2005260441
		US2007190359
		US2002134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO05123873
		WO05123873
		WO07004380

물질	물질의 예	공개물
		WO06082742
오스뮴(II) 착물		US2005260449
		Organometallics 23, 3745 (2004)
금 착물		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
백금(II) 착물		WO06098120, WO06103874
엑시톤/정공 차단 층 물질		
바소쿠린 화합물 (예를 들면, BCP, BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예를 들면, BA1q)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5원 고리 전자 부족 헤테로사이클, 예컨대 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조티이미다졸		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)

물질	물질의 예	공개물
트리페닐렌 화합물		US20050025993
플루오르화 방향족 화합물		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
전자 수송 물질		
안트라센-벤조이미다졸 화합물		WO03060956
안트라센-벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예를 들면, Alq ₃)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
금속 히드록시벤조퀴놀레이트		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
바소쿠마린 화합물, 예컨대 BCP, BPhen 등		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)

물질	물질의 예	공개물
5원 고리 전자 부족 해테로사이클(예를 들면, 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)
실록 (silolide) 화합물		Org. Electron. 4, 113 (2003)
아릴보란 화합물		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
플루오르화 방향족 화합물		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0034]

실현

[0035]

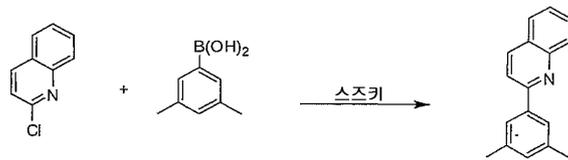
화합물 실시예

[0036]

화합물 1의 합성

[0037]

단계 1



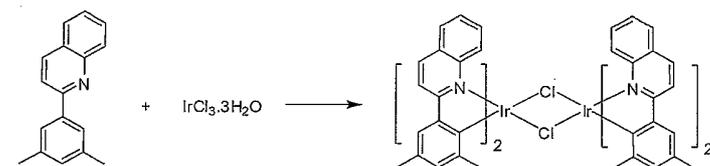
[0038]

[0039]

2-클로로퀴놀린(9.0 g, 54.4 mmol), 3,5-디메틸페닐보르산(9.2 g, 59.8 mmol), Pd(PPh₃)₄(1.8 g, 1.5 mmol), K₂CO₃(22.4 g, 163 mmol), 1,2-디메톡시에탄(150 mL) 및 물(150 mL)을 500 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 이 반응 혼합물을 질소 하에 18 h 동안 환류로 가열하였다. 이어서, 그 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 유기상을 수상으로부터 분리하였다. 수상을 에틸 아세테이트로 세척하고, 모든 유기 성분을 합하여 무수 황산마그네슘으로 건조시켰다. 이어서, 용매를 진공 하에 제거하고, 생성물은 실리카 겔 크로마토그래피(용출액으로서 헥산 중의 10% 에틸 아세테이트)를 사용하여 정제하였다. 얻어진 물질을 진공 증류로 추가 정제하여 무색 오일로서 생성물 12.2 g(95% 수율)을 산출하였다.

[0040]

단계 2



[0041]

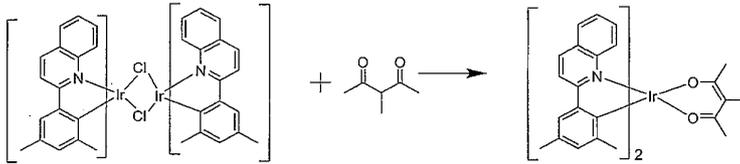
*

[0042]

단계 1로부터 얻은 리간드(46 g, 197.4 mmol), 2-에톡시에탄올(536 mL) 및 물 (178 mL)을 1 L 3목 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 질소 가스로 반응 혼합물을 통해 45 분 동안 발포시켰다. 이어서, $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (32.0 g, 86.2 mmol)을 첨가하고, 이 반응 혼합물을 질소 하에 17 시간 동안 환류로 가열하였다. 이 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 여과시켰다. 암회색 잔류물을 메탄올(4 x 150 mL), 이어서 헥산(3 x 300 mL)으로 세척하였다. 디클로로브리지 형성된(dichlorobridged) 이리듐 다이머 36.5 g을 진공 오븐에서 건조시킨 후 얻었다.

[0043]

단계 3



[0044]

[0045]

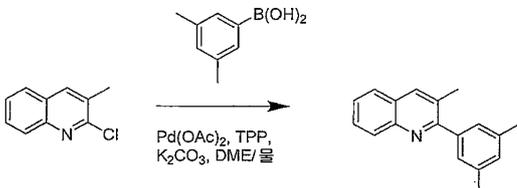
단계 2로부터 얻은 디클로로브리지 형성된 이리듐(3.0 g, 2.2 mmol), 3-메틸-2,4-펜타디온(2.5 g, 10 mol eq), Na_2CO_3 (6.3 g, 20 mol eq) 및 2-에톡시에탄올(25 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 이 반응 혼합물을 주위에서 24 h 동안 교반하였다. 그 반응 혼합물에 셀라이트 2 g 및 디클로로메탄 200 mL를 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 이어서, 그 혼합물을 셀라이트 층을 통해 여과시켰다. 이어서, 그 여과물을 실리카/알루미나 플러그를 통해 통과시키고, 디클로로메탄으로 세척하였다. 그 맑아진 용액을 GF/F 필터지를 통해 여과시키고, 여과물을 가열하여 대부분의 디클로로메탄을 제거하였다. 이어서, 이소프로판올 20 mL를 첨가하고, 그 슬러리를 주위로 냉각하고, 생성물을 여과시키고 이소프로판올로 세척한 후, 건조시켜서 미정제 생성물 3.2 g(97% 수율)을 생성하였다. 이어서, 그 생성물은 디클로로메탄 및 이소프로판올을 사용하여 2회 재결정화한 후, 승화시켰다.

[0046]

화합물 2의 합성

[0047]

단계 1



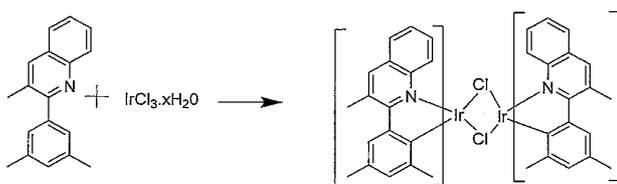
[0048]

[0049]

2-클로로-3-메틸-퀴놀린(4.5 g, 25.0 mmol), 디메틸페닐보론산(4.6 g, 30 mmol), 트리페닐포스핀(1.60 g, 6.11 mmol), 및 탄산칼륨(12.67 g, 91.69 mmol)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 그 플라스크에 물 25 mL 및 디메톡시에탄 25 mL를 첨가하였다. 질소로 반응 혼합물을 통해 30 분 동안 발포시켰다. 이어서, 반응 혼합물에 팔라듐 아세테이트(0.34 g, 1.53 mmol)를 첨가한 후, 질소 대기 하에 밤새 환류시켰다. 생성물을 에틸 아세테이트로 추출하고, 물로 세척한 후, 무수 황산마그네슘으로 건조시켰다. 생성물은 실리카 겔 크로마토그래피(용출액으로서 헥산 중의 5-15% 에틸 아세테이트)를 이용하여 정제함으로써 담황색 오일(85% 수율)을 생성하였다. 추가 정제는 진공 증류를 통해 수행하였다.

[0050]

단계 2



[0051]

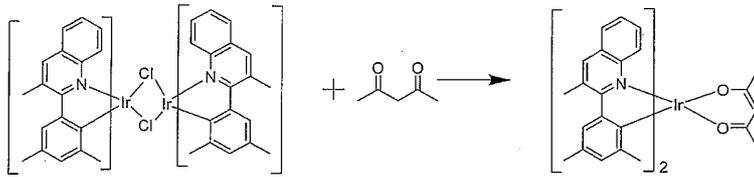
[0052]

단계 1로부터 얻은 리간드(16 g, 65 mmol), 염화이리듐(5.0 g, 14 mmol), 2- 에톡시에탄올(75 mL) 및 물(12.5 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 반응기 내용물을 질소 대기 하에 16-19h 동안 102°C로 가열하였

다. 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머는 단리하지 않았다.

[0053]

단계 3



[0054]

[0055]

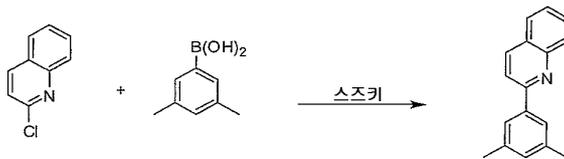
단계 2로부터 얻은 반응기 내용물을 주위 냉각하였다. 반응기에 2,4-펜탄디온(14.0 g, 140 mmol) 및 탄산나트륨(30.0 g, 280 mmol)을 첨가하였다. 이 반응 혼합물을 주위에서 24 h 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 셀라이트 5 g 및 디클로로메탄 500 mL를 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 이어서, 그 혼합물을 셀라이트 층을 통해 여과시켰다. 이어서, 여과물을 실리카/알루미나 플러그를 통해 통과시키고, 디클로로메탄으로 세척하였다. 이어서, 맑아진 용액을 GF/F 필터지를 통해 여과시키고, 여과물을 가열하여 대부분의 디클로로메탄을 제거하였다. 이어서, 이소프로판올 20 mL를 첨가하고, 그 슬러리를 주위로 냉각하고, 생성물을 여과시키고, 이소프로판올로 세척한 후, 건조시켜서 미정제 생성물 6.3 g(57% 수율)을 생성하였다. 이어서, 이 생성물은 디클로로메탄 및 이소프로판올을 사용하여 2회 재결정화한 후, 승화시켰다.

[0056]

화합물 3의 합성

[0057]

단계 1



[0058]

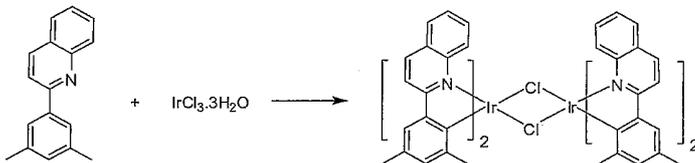
[0059]

2-클로로퀴놀린(9.0 g, 54.4 mmol), 3,5-디메틸페닐보론산(9.2 g, 59.8 mmol), Pd(PPh₃)₄(1.8 g, 1.5 mmol), K₂CO₃(22.4 g, 163 mmol), 1,2-디메톡시에탄(150 mL) 및 물(150 mL)을 500 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다.

이 반응 혼합물을 질소 하에 18 h 동안 환류로 가열하였다. 이어서, 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 유기상을 수상으로부터 분리하였다. 수상을 에틸 아세테이트로 세척하고, 모든 유기 성분을 합하여 무수 황산마그네슘으로 건조시켰다. 이어서, 용매를 진공 하에 제거하고, 생성물은 실리카 겔 크로마토그래피(용출액으로서 헥산 중의 10% 에틸 아세테이트)를 사용하여 정제하였다. 얻어진 물질을 진공 증류로 추가 정제하여 무색 오일로서 생성물 12.2 g(95% 수율)을 산출하였다.

[0060]

단계 2

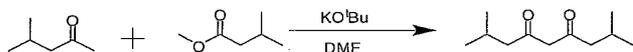


[0061]

[0062]

단계 1로부터 얻은 리간드(46 g, 197.4 mmol), 2-에톡시에탄올(536 mL) 및 물(178 mL)을 1 L 3목 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 질소 가스로 반응 혼합물을 통해 45 분 동안 발포시켰다. 이어서, 반응 혼합물에 IrCl₃·H₂O(32.0 g, 86.2 mmol)을 첨가하고, 질소 하에 17 시간 동안 환류로 가열하였다. 이 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 여과시켰다. 암회색 잔류물을 메탄올(4 x 150 mL), 이어서 헥산(3 x 300 mL)으로 세척하였다. 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머 36.5 g을 진공 오븐에서 건조시킨 후 얻었다.

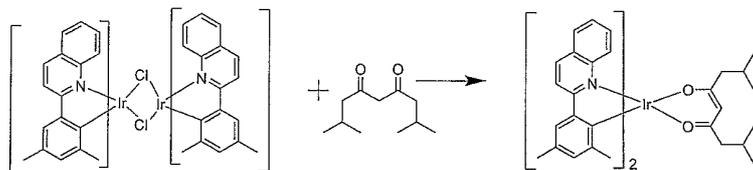
[0063] 단계 3



[0064]

[0065] N,N-디메틸포름아미드(DMF)(1 L) 및 칼륨 tert-부톡사이드(135.0 g, 1.2 mol)을 질소 하에 50℃로 가열하였다. 메틸 3-메틸부타노에이트(86.0 g, 0.75 mol)를 적하 깔대기로부터 적가하고, 이어서 DMF 100 mL 중의 4-메틸펜탄-2-온(50 g, 1 mol)의 용액을 첨가하였다. 반응의 과정을 GC로 모니터링하였다. 반응이 종료되었을 때, 그 혼합물을 주위로 냉각하고, 서서히 20% H₂SO₄ 용액으로 중화시켰다. 물(300 mL)을 첨가하자 2개의 층이 형성되었다. 2,8-디메틸노난-4,6-디온을 함유하는 층을 진공 증류를 이용하여 정제함으로써 분홍색 오일 40 g(43% 수율)을 생성하였다.

[0066] 단계 4



[0067]

[0068] 단계 2로부터 얻은 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머(3.0 g, 2.2 mmol), 2,8-디메틸노난-4,6-디온(4.1 g, 10 mol eq), Na₂CO₃(6.3 g, 20 mol eq) 및 2-에톡시에탄올(25 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 이 반응 혼합물을 주위에서 24 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 셀라이트 2 g 및 디클로로메탄 200 mL를 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 이어서, 그 혼합물을 셀라이트 층을 통해 여과시켰다. 이어서, 여과물을 실리카/알루미나 플러그를 통해 통과시키고, 디클로로메탄으로 세척하였다. 이어서, 맑아진 용액을 GF/F 필터지를 통해 여과시키고, 그 여과물을 가열하여 대부분의 디클로로메탄을 제거하였다. 이어서, 이소프로판올 20 mL를 첨가하고, 그 슬러리를 주위로 냉각하고, 생성물을 여과시키고, 이소프로판올로 세척한 후, 건조시켜서 미정제 생성물 2.9 g(79% 수율)을 생성하였다. 이어서, 그 생성물은 디클로로메탄 및 이소프로판올을 사용하여 2회 재결정화한 후, 승화시켰다.

[0069] 화합물 4의 합성

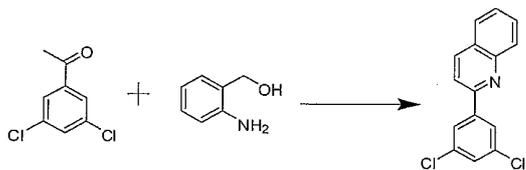
[0070] 단계 1



[0071]

[0072] 디클로로요오도벤젠(37.0 g, 136 mmol), Pd₂(dba)₃(1.5 g, 1.6 mmol), 염화리튬(29.0 g, 682 mmol)을 500 mL 둥근 바닥 플라스크에서 DMF 100 mL 중에 용해시켰다. 이어서, 반응 혼합물에 아세트산 무수물 64.0 mL 및 N-에틸디이소프로필아민 47.0 mL를 첨가하였다. 그 반응은 8 시간 동안 100℃로 가열하였다. 반응 혼합물에 물을 첨가하고, 그 생성물을 에틸 아세테이트로 추출하고, 용출액으로서 에틸 아세테이트와 헥산을 사용하는 실리카 겔 컬럼을 이용하여 크로마토그래피 처리하였다. 생성물 8 g을 얻었다.

[0073] 단계 2

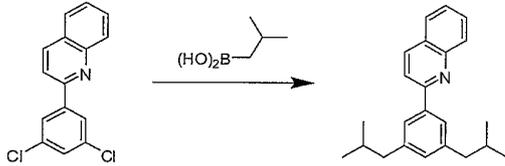


[0074]

[0075] 2-아미노벤질 알콜(6.0 g, 48 mmol), 3,5-디클로로아세트페논(12.0 g, 63.5 mmol), RuCl₂(PPh₃)₃(0.5 g, 10 mol%), 및 KOH(2.4 g, 42.0 mmol)을 톨루엔 100 mL 중에서 10 시간 동안 환류시켰다. 딤-스타크 트랩을 사용하

여 반응으로부터 물을 수집하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각하고, 실리카 겔 플러그를 통해 여과시켰다. 생성물은 용출액으로서 헥산 중의 2% 에틸 아세테이트를 사용하는 실리카 겔 컬럼으로 추가 정제하였다. 생성물 4.0 g(30% 수율)을 컬럼 후에 얻었다. 생성물은 이소프로판올로부터 추가 재결정화하였다. 소정의 생성물 3.5 g을 얻었다.

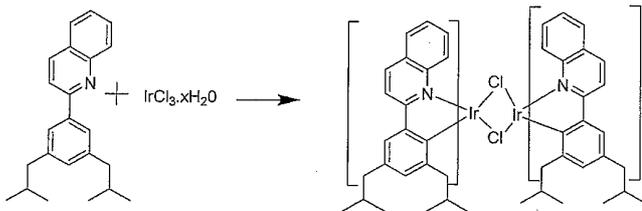
[0076] 단계 3



[0077]

[0078] 2-(3,5-디클로로페닐)퀴나졸린(4.0 g, 14.6 mmol), 이소부틸보론산(6.0 g, 58.4 mol), Pd₂(dba)₃(0.13 g, 1 mol%), 디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시바이페닐(0.24 g, 4 mol%), 인산칼륨 1수화물(10 g, 13.8 mmol)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크에서 톨루엔 100 mL 중에 혼합하였다. 질소로 혼합물을 통해 20 분 동안 발포시키고, 그 혼합물을 질소 대기 하에 밤새 환류시켰다. 반응 혼합물을 냉각하고, 용매를 진공 하에 제거하였다. 미정제 생성물은 용출액으로서 헥산 중의 2% 에틸 아세테이트에 의한 실리카 겔 컬럼을 사용하여 크로마토그래피 처리하였다. 이어서, 용매를 진공 하에 제거하여 생성물 3.5 g을 생성하였다.

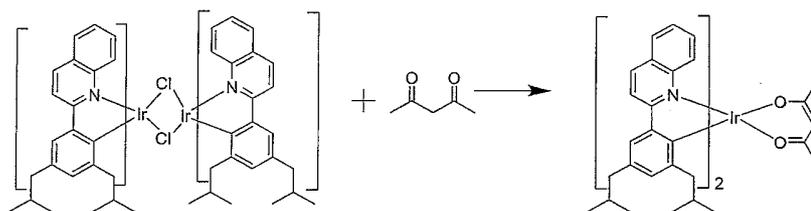
[0079] 단계 4



[0080]

[0081] 단계 3으로부터 얻은 리간드(20 g, 65 mmol), 염화이리듐(5.0 g, 14 mmol), 2-에톡시에탄올(75 mL) 및 물(12.5 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 반응기 내용물을 질소 대기 하에 16-19h 동안 102°C로 가열하였다. 디클로로 브리지 형성된 이리듐 다이머는 단리하지 않았다.

[0082] 단계 5

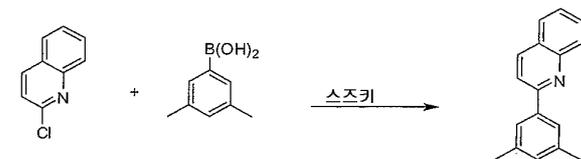


[0083]

[0084] 단계 4로부터 얻은 반응기 내용물을 주위로 냉각하였다. 2,4-펜탄디온(14.0 g, 140 mmol) 및 탄산나트륨(30.0 g, 280 mmol)을 반응기에 첨가하였다. 이 반응 혼합물을 주위에서 24 h 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 셀라이트 5 g 및 디클로로메탄 500 mL를 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 이어서, 그 혼합물을 셀라이트 층을 통해 여과시켰다. 이어서, 여과물을 실리카/알루미나 플러그를 통해 여과시키고, 디클로로메탄으로 세척하였다. 이어서, 맑아진 용액을 GF/F 필터지를 통해 여과시키고, 여과물을 가열하여 대부분의 디클로로메탄을 제거하였다. 이어서, 이소프로판올 20 mL를 첨가하고, 이 슬러리를 주위로 냉각한 후, 생성물을 여과시키고, 이소프로판올로 세척한 후, 건조시켜서 미정제 생성물 7.1 g(55% 수율)을 생성하였다. 이어서, 그 생성물은 디클로로메탄 및 이소프로판올을 사용하여 2회 재결정화한 후, 승화시켰다.

[0085] 화합물 5의 합성

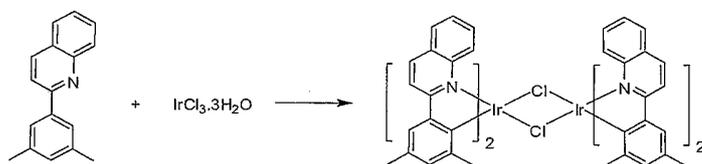
[0086] 단계 1



[0087] *

[0088] 2-클로로퀴놀린(9.0 g, 54.4 mmol), 3,5-디메틸페닐보론산(9.2 g, 59.8 mmol), Pd(PPh₃)₄(1.8 g, 1.5 mmol), K₂CO₃(22.4 g, 163 mmol), 1,2-디메톡시에탄(150 mL) 및 물(150 mL)을 500 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 그 반응 혼합물을 질소 하에 18 h 동안 환류로 가열하였다. 이어서, 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 유기상을 수상으로부터 분리하였다. 수상을 에틸 아세테이트로 세척하고, 모든 유기 성분을 합하여 무수 황산마그네슘으로 건조시켰다. 이어서, 용매를 진공 하에 제거하고, 생성물은 실리카 겔 크로마토그래피(용출액으로서 헥산 중의 10% 에틸 아세테이트)를 사용하여 정제하였다. 얻어진 물질을 진공 증류로 추가 정제하여 무색 오일로서 생성물 12.2 g(95% 수율)을 생성하였다.

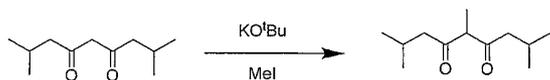
[0089] 단계 2



[0090]

[0091] 단계 1로부터 얻어지는 리간드(46 g, 197.4 mmol), 2-에톡시에탄올(536 mL) 및 물(178 mL)을 1 L 3목 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 질소 가스로 반응 혼합물을 통해 45 분 동안 발포시켰다. 이어서, IrCl₃·H₂O(32.0 g, 86.2 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 질소 하에 17 시간 동안 환류로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 여과시켰다. 암회색 잔류물을 메탄올(4 x 150 mL), 이어서 헥산(3 x 300 mL)으로 세척하였다. 디클로로브리징 형성된 이리듐 다이머 36.5 g을 진공 오븐에서 건조시킨 후 얻었다.

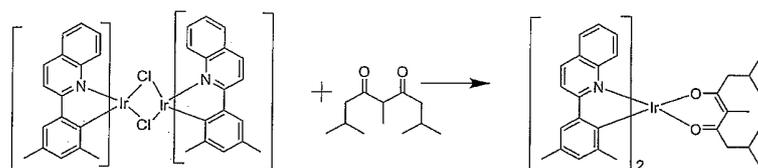
[0092] 단계 3



[0093]

[0094] 2,8-디메틸노난-4,6-디온(10.0 g, 5.4 mmol), 칼륨 tert-부톡사이드(7.0 g, 6.5 mmol) 및 무수 THF(150 mL)를 250 mL 3목 건조 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 이 반응 혼합물을 주위에서 질소의 대기 하에 1h 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 요오도메탄(15 g, 105 mmol)을 바늘 및 주사기를 통해 첨가하였다. 이 반응 혼합물을 주위에서 추가 4 h 동안 계속 교반하였다. 반응은 GC로 모니터링하였다. 반응을 물 100 mL로 킨칭하고, 1M 염산으로 산성화하였다. 생성물을 에틸 아세테이트로 추출하고, 실리카 겔 크로마토그래피(헥산 중의 1-5% 에틸 아세테이트)를 이용하는 크로마토그래피 처리하였다. HPLC에 의하면, 생성물(2,5,8-트리메틸노난-4,6-디온)은 2,8-디메틸노난-4,6-디온(출발 물질)의 혼합물을 함유한 것으로 나타났다. 이로부터 이동상으로서 헥산 중의 1-5% 에틸 아세테이트와 함께 탈활성화된 염기성 알루미나를 사용하는 크로마토그래피를 통해 생성물을 분리하여 생성물 3.6 g(33% 수율)을 생성하였다.

[0095] 단계 4



[0096]

[0097]

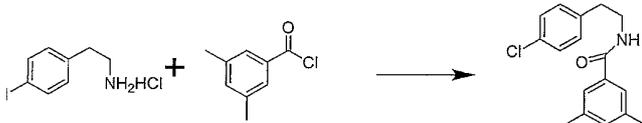
단계 2로부터 얻어지는 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머(1.0 g, 0.7 mmol), 2,5,8-트리메틸노란-4,6-디온 (1.4g, 10 mol eq), Na_2CO_3 (2.0 g, 20 mol eq) 및 2-에톡시에탄올(25 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 반응 혼합물을 주위에서 24 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 셀라이트 1g 및 디클로메탄 100 mL를 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 이어서, 혼합물을 셀라이트 층을 통해 여과시켰다. 이어서, 여과물을 실리카/알루미나 플러그를 통해 통과시키고, 디클로메탄으로 세척하였다. 이어서, 맑아진 용액을 GF/F 필터지를 통해 여과시키고, 여과물을 가열하여 대부분의 디클로로메탄을 제거하였다. 이어서, 이소프로판올 10 mL를 첨가하고, 그 슬러리를 주위로 냉각하고, 생성물을 여과시키고, 이소프로판올로 세척한 후, 건조시켜서 미정제 생성물 0.7 g(57% 수율)을 생성하였다. 이어서, 이 생성물은 디클로로메탄 및 이소프로판올을 사용하여 2회 재결정화한 후, 승화시켰다.

[0098]

화합물 6의 합성

[0099]

단계 1



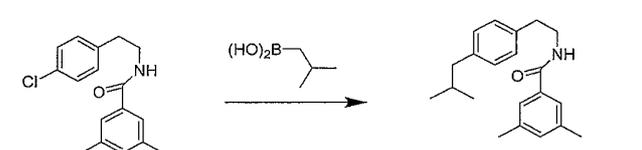
[0100]

[0101]

4-클로로페닐에틸아민 히드로클로라이드(10.0 g, 64 mmol), 피리딘(15.3 g, 193 mmol) 및 디클로로메탄(50 mL)을 3목 둥근 바닥 플라스크에 첨가하였다. 이 용액을 빙조에서 냉각하고, 3,5-디메틸벤조일 클로라이드(10.8 g, 64 mmol)를 서서히 첨가하였다. 이 용액을 실온으로 가온하고, 12 시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄을 첨가하고, 유기상을 물로 세척하고, 이어서 5% HCl 용액, 이어서 5% NaOH 용액으로 세척한 후, 무수 MgSO_4 로 건조시켰다. 용매를 진공 하에 증발시켜서 결과적으로 미정제 생성물 15 g(82% 수율)을 형성시켰고, 이것을 추가 정제 없이 사용하였다.

[0102]

단계 2



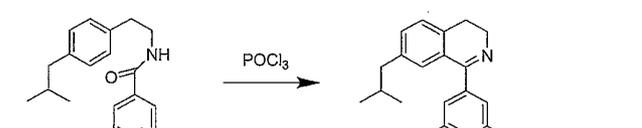
[0103]

[0104]

N-(4-(isobutyl)phenyl)-N-(3,5-dimethylphenyl)acetamide(15 g, 52 mmol), 이소부틸보론산(10.6 g, 104 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1 mol%), 2-시클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시바이페닐(4 mol%), 인산칼륨 1수화물(22.0 g, 212 mmol) 및 톨루엔(200 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 질소로 반응 혼합물을 통해 20 분 동안 발포시키고, 18 h 동안 밤새 환류로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고, 미정제 생성물은 용매로서 헥산 중의 2% 에틸 아세테이트를 사용하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다. 소정의 생성물 15 g(93% 수율)을 얻었다.

[0105]

단계 3



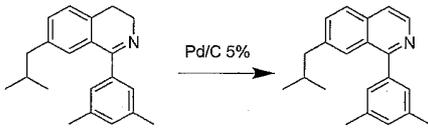
[0106]

[0107]

N-(4-(isobutyl)phenyl)-N-(3,5-dimethylphenyl)pyridine(15.0 g), 오산화인(50 g), 옥시염화인(50 mL) 및 크실렌(160 mL)을 1 L 둥근 바닥 플라스크에서 3 시간 동안 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각한 후, 용매를 경사 분리하고, 얼음을 플라스크의 바닥의 고체에 서서히 첨가하였다. 물-잔류물 혼합물을 50% NaOH로 약 알칼리성으로 만들고, 생성물을 톨루엔으로 추출하였다. 유기층을 물로 세척하고, 무수 MgSO_4 로 건조시켰다. 용매를 증발시켜서 미정제 생성물 12.4 g(88% 수율)을 생성하였고, 이것을 추가 정제 없이 사용하였다.

[0108]

단계 4



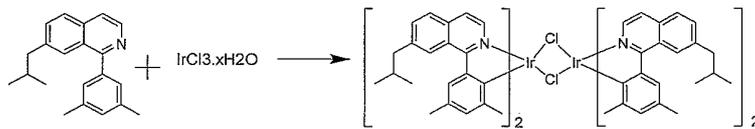
[0109]

[0110]

1-(3,5-디메틸페닐)-7-이소부틸-3,4-디히드로이소퀴놀린(12.4 g, 42.5 mmol) 및 5% Pd/C(~10 중량%) 2 g을, 크실렌 100 mL를 구비한 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 첨가하였다. 이 용액을 24 h 동안 환류시켰고, 생성물의 형성을 TLC로 모니터링하였다. 용매를 진공 하에 제거하고, 생성물은 용출액으로서 헥산 중의 5% 에틸 아세테이트를 사용하는 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다. 이어서, 생성물을 진공 증류시켜서 순수 생성물(6.0 g, 21 mmol)을 생성하였다.

[0111]

단계 5



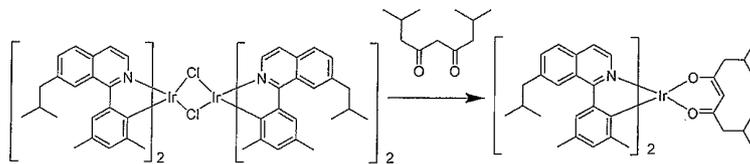
[0112]

[0113]

단계 4로부터 얻은 리간드(4.7g, 14 mmol), 2-에톡시에탄올(25 mL) 및 물(5 mL)을 1 L 3목 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 질소 가스로 반응 혼합물을 통해 45 분 동안 발포시켰다. 이어서, IrCl₃·H₂O(1.2 g, 3.6 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 질소 하에 17 시간 동안 환류로 교반하였다. 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 여과시켰다. 암적색 잔류물을 메탄올(2 x 25 mL), 이어서 헥산(2 x 25 mL)으로 세척하였다. 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머 2.5 g을 진공 오븐에서 건조시킨 후 얻었다.

[0114]

단계 6



[0115]

[0116]

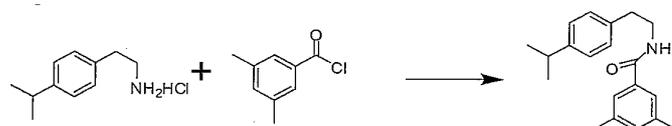
단계 5로부터 얻어지는 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머(2.5 g, 1.5 mmol), 2,8-디메틸노난-4,6-디온(2.8 g, 10 mol eq), Na₂CO₃(4.3 g, 20 mol eq) 및 2-에톡시에탄올(25 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 이 반응 혼합물을 주위에서 24 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 셀라이트 2 g 및 디클로로메탄 200 mL를 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 이어서, 반응 혼합물을 셀라이트 층을 통해 여과시켰다. 이어서, 여과물을 실리카/알루미나 플러그를 통해 통과시키고, 디클로로메탄으로 세척하였다. 이어서, 맑아진 용액을 GF/F 필터지를 통해 여과시키고, 여과물을 가열하여 대부분의 디클로로메탄을 제거하였다. 이어서, 이소프로판올 20 mL을 첨가하고, 그 슬러리를 주위로 냉각하고, 생성물을 여과시키고 이소프로판올로 세척한 후, 건조시켜서 미정제 생성물 2.5 g(86% 수율)을 생성하였다. 이어서, 그 생성물은 디클로로메탄 및 이소프로판올로 2회 재결정화한 후, 승화시켰다.

[0117]

화합물 7의 합성

[0118]

단계 1



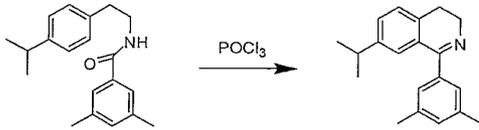
[0119]

[0120]

4-이소프로필페닐에틸아민 히드록로라이드(5.0 g, 25 mmol), 피리딘(5.9 g, 75 mmol) 및 디클로로메탄(25

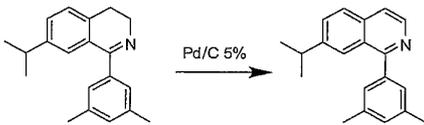
mL)을 3목 둥근 바닥 플라스크 내에 첨가하였다. 이 용액을 빙조에서 냉각하고, 3,5-디메틸벤조일 클로라이드 (4.2 g, 25 mmol)를 서서히 첨가하였다. 이어서, 그 용액을 실온으로 가온하고, 12 시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄을 첨가하고, 유기상을 물, 5% HCl 용액, 이어서 5% NaOH 용액으로 세척한 후, 무수 MgSO₄로 건조시켰다. 용매를 진공 하에 증발시켜서 미정제 생성물 7.5 g(82% 수율)을 생성하였고, 이것을 추가 정제 없이 사용하였다.

[0121] 단계 2



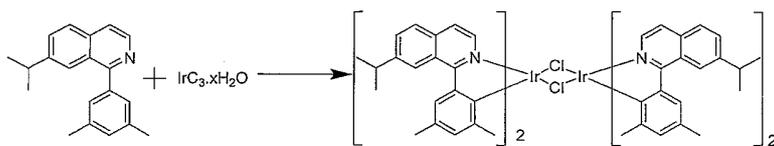
[0122] 크실렌 80 mL 중의 N-(4-p-이소프로필페닐에틸)벤즈아미드(7.5 g)를 오산화인(25 g) 및 옥시염화인(25 mL)과 함께 3 시간 동안 환류시켰다. 냉각 후, 용매를 경사 분리하고, 얼음을 플라스크의 바닥에 있는 고체에 서서히 첨가하였다. 물-잔류물 혼합물을 50% NaOH로 약 알칼리성으로 만들고, 생성물을 톨루엔으로 추출하였다. 유기층을 물로 세척하고, 무수 MgSO₄로 건조시켰다. 용매를 진공 하에 제거하여 미정제 생성물 6.2 g을 생성하였고, 이것을 추가 정제 없이 사용하였다.

[0124] 단계 3



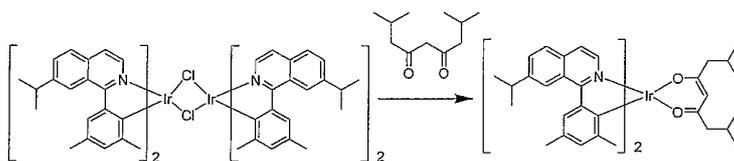
[0125] 7-이소프로필-1-페닐-3,4-디히드로이소퀴놀린(6.2 g) 및 5% Pd/C(~10 중량%)(1 g)을, 크실렌 100 mL를 구비한 둥근 바닥 플라스크 내에 첨가하였다. 이 용액을 24 시간 동안 환류시켰고, 생성물의 형성은 TLC로 모니터링 하였다. 크실렌 용매를 제거하고, 생성물은 에틸 아세테이트/헥산을 사용하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다. 순수 분획을 수집하고, 용매를 제거하였다. 이어서, 생성물은 쿠겔로 장치(kugelrohr apparatus)에서 185°C로 증류시켜서 순수 생성물 1.8 g(0.0073 mol)을 생성하였다. 리간드 형성의 전체 수율은 ~15%이었다.

[0127] 단계 4



[0129] 단계 3으로부터 얻은 리간드(1.8 g, 7.3 mmol), 2-에톡시에탄올(25 mL) 및 물(5 mL)을 1 L 3목 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 질소 가스로 반응 혼합물을 통해 45 분 동안 발포시켰다. 이어서, IrCl₃·H₂O(1.2 g, 3.6 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 질소 하에 17 시간 동안 환류로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 여과시켰다. 암적색 잔류물을 메탄올(2 x 25 mL), 이어서 헥산(2 x 25 mL)으로 세척하였다. 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머 1.3 g을 진공 오븐에서 건조시킨 후 얻었다.

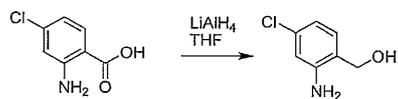
[0130] 단계 5



[0132] 단계 2로부터 얻어지는 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머(1.3 g, 0.9 mmol), 2,8-디메틸노란-4,6-디온(1.6 g, 10 mol eq), Na₂CO₃(2.5 g, 20 mol eq) 및 2-에톡시에탄올(25 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 반응 혼합물을 주위에서 24 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 셀라이트 2 g 및 디클로로메탄 200 mL를 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 이어서, 혼합물을 셀라이트 층을 통해 여과시켰다. 이어서, 여과물을 실리카/알루미나 플러그를 통해 통과시키고, 디클로로메탄으로 세척하였다. 이어서, 맑아진 용액을 GF/F 필터지를 통해 여과시키고, 여과물을 가열하여 대부분의 디클로로메탄을 제거하였다. 이어서, 이소프로판올 20 mL를 첨가하고, 그 슬러리를 주위로 냉각하고, 생성물을 여과시키고 이소프로판올로 세척한 후, 건조시켜서 미정제 생성물 1.4 g(92% 수율)을 생성하였다. 이어서, 그 생성물은 디클로로메탄 및 이소프로판올을 사용하여 2회 재결정화한 후, 승화시켰다.

[0133] 화합물 8의 합성

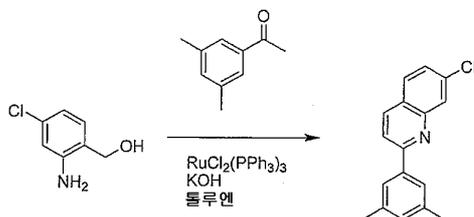
[0134] 단계 1



[0135]

[0136] 2-아미노-4-클로로벤조산(42.8 g, 0.25 mol)을 무수 THF 200 mL 중에 용해시키고, 빙수조에서 냉각하였다. 이 용액에 수소화알루미늄리튬 칩(11.76 g, 0.31 mol)을 첨가하였다. 그 결과로 형성된 혼합물을 실온에서 8 h 시간 동안 교반하였다. 물 12 g을 첨가한 후, 15% NaOH 12 g을 첨가하였다. 이어서, 물 36 g을 첨가하였다. 그 슬러리를 실온에서 30 분 동안 교반하였다. 슬러리를 여과시켰다. 고체를 에틸 아세테이트로 세척하였다. 액체를 합하여 용매를 증발시켰다. 이 미정제 물질을 정제 없이 다음 단계에 사용하였다.

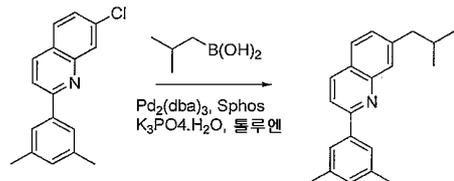
[0137] 단계 2



[0138]

[0139] 2-아미노-4-클로로페닐)메탄올(6.6 g, 0.04 mol), 1-(3,5-디메틸페닐)에탄온(10.0 g, 0.068 mol), RuCl₂(Ph₃)₃(0.1 g) 및 KOH(2.4 g)을 톨루엔 100 mL 중에 10 시간 동안 환류시켰다. 단-스타크 트랩을 사용하여 물을 반응으로부터 수집하였다. 반응을 실온으로 냉각한 후, 그 혼합물을 실리카 겔 플러그를 통해 여과시켰다. 생성물은 용출액으로서 헥산 중의 2% 에틸 아세테이트를 사용하는 컬럼 크로마토그래피로 추가 정제하였다. 생성물 9 g을 컬럼 후에 얻었다. 생성물은 이소프로판올로부터 추가 재결정화하였다. 소정의 생성물 5 g을 얻었다.

[0140] 단계 3

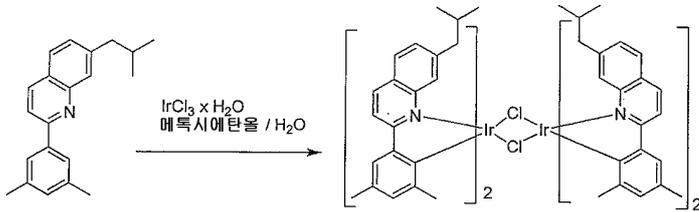


[0141]

[0142] 7-클로로-2-(3,5-디메틸페닐)퀴놀린(3.75 g, 0.014 mol), 이소부틸보론산(2.8 g, 0.028 mol), Pd₂(dba)₃(1 mol%), 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시바이페닐(4 mol%) 및 톨루엔(100 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 질소로 반응 혼합물을 통해 20 분 동안 발포시키고, 18 시간 동안 밤새 환류로 가열하였다. 반

응 혼합물을 주위 온도로 냉각하고, 미정제 생성물은 용출액으로서 헥산 중의 2% 에틸 아세테이트를 사용하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다. 소정의 생성물 3.6 g을 얻었다.

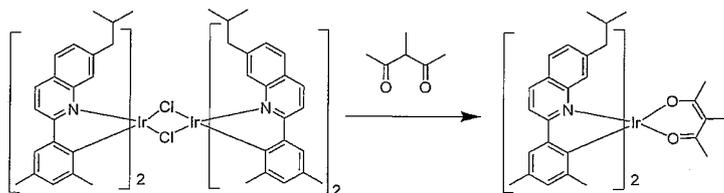
[0143] 단계 4



[0144]

[0145] 단계 3으로부터 얻어지는 리간드(4.6 g, 16 mmol), 2-에톡시에탄올(25 mL) a 및 물(5 mL)을 1 L 3목 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 질소 가스로 반응 혼합물을 통해 45 분 동안 발포시켰다. 이어서, IrCl₃·H₂O(1.2 g, 3.6 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 질소 하에 17 시간 동안 환류로 가열하였다. 반응 혼합물을 주위로 냉각하고, 여과시켰다. 암적색 잔류물을 메탄올(2 x 25 mL), 이어서 헥산(2 x 25 mL)으로 세척하였다. 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머 1.3 g을 진공 오븐에서 건조시킨 후, 얻었다.

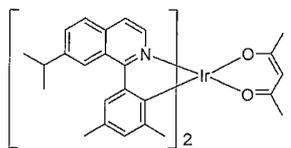
[0146] 단계 5



[0147]

[0148] 단계 2로부터 얻어지는 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머(1.0 g, 0.6 mmol), 3-메틸-2,4-펜탄디온(0.8 g, 10 mol eq), Na₂CO₃(3 g, 20 mol eq) 및 2-에톡시에탄올(25 mL)을 250 mL 둥근 바닥 플라스크 내에 넣었다. 반응 혼합물을 주위에서 24 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 셀라이트 2 g 및 디클로로메탄 200 mL를 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 이어서, 그 혼합물을 셀라이트 층을 통해 여과시켰다. 이어서, 그 여과물을 실리카/알루미나 플러그를 통해 통과시키고, 디클로로메탄으로 세척하였다. 이어서, 맑아진 용액을 GF/F 필터지를 통해 여과시키고, 그 여과물을 가열하여 대부분의 디클로로메탄을 제거하였다. 이어서, 이소프로판올 20 mL를 첨가하고, 그 슬러리를 주위로 냉각하고, 생성물을 여과시키고 이소프로판올로 세척한 후, 건조시켜서 미정제 생성물 1.1 g(97% 수율)을 생성하였다. 이어서, 이 생성물은 디클로로메탄 및 이소프로판올을 사용하여 2회 재결정화한 후, 승화시켰다.

[0149] 화합물 9의 합성

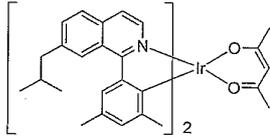


[0150]

[0151] 화합물 9는 본 발명 화합물 7에 대하여 요약 기재된 바와 같은 동일한 절차를 이용하여 합성할 수 있었다. 이 경우에는 형성되는 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머를 2,4-펜탄 디온으로 절단하여 그 생성물을 제공해야 했다.

[0152]

화합물 10의 합성



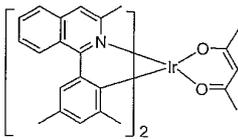
[0153]

[0154]

화합물 10은 본 발명 화합물 6에 대하여 요약 기재된 바와 같은 동일한 절차를 이용하여 합성할 수 있었다. 이 경우에는 형성되는 디클로로브리지 형성된 이리듐 다이머를 2,4-펜탄디온으로 절단하여 그 생성물을 제공해야 했다.

[0155]

화합물 11의 합성



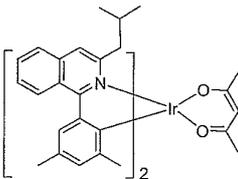
[0156]

[0157]

화합물 11의 합성은 이미 개시된 일반적인 합성 접근법을 이용하여 용이하게 합성할 수 있었다.

[0158]

화합물 12의 합성



[0159]

[0160]

화합물 12의 합성은 이미 개시된 일반적인 합성 접근법을 이용하여 용이하게 합성할 수 있었다.

[0161]

디바이스 실시예

[0162]

모든 디바이스 실시예는 고 진공($< 10^{-7}$ Torr) 열적 증발로 제조하였다. 애노드 전극은 인듐 주석 산화물(ITO) 1200Å이었다. 캐소드는 LiF 10Å, 이어서 Al 1000 Å로 구성되었다. 모든 디바이스는 제조 직후 질소 글로브 박스(H₂O 및 O₂ < 1 ppm)에서 에폭시 수지에 의해 밀봉된 유리 리드로 캡슐화하였고, 그 패키지 내부에 수분 게터(getter)를 혼입하였다.

[0163]

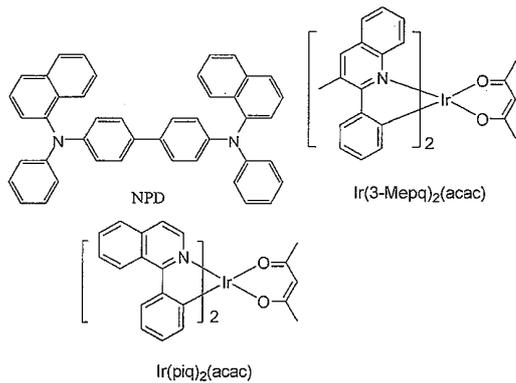
표 2에서 디바이스 실시예 1-8의 유기 스택은 ITO 표면, 정공 주입 층(HIL)으로서 Ir(3-Meppy)₃ 100 Å, 정공 수송 층(HTL)으로서 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐(α -NPD) 400Å, 방출 층(EML)으로서 본 발명 화합물 8-12% 도핑된 BA1q 300Å 및 ETL로서 Alq₃(트리스-8-히드록시퀴놀린 알루미늄) 550Å로 순차적으로 구성되었다.

[0164]

비교예 1 및 2는 Ir(3-Mepq)₂(acac) 또는 Ir(piq)₂(acac)를 방출성 도펀트로서 사용했다는 점을 제외하고는 디바이스 실시예와 유사하게 제조하였다.

[0165]

디바이스 구조 및 데이터를 표 2에 요약 기재하였다. 본원에 사용된 바와 같이, 하기 화합물은 하기 구조식을 보유하였다.



[0166]

[0167]

[표 2]

디바이스 실시예	에미터 (도핑 %)	T _{sub} at 0.24 Å/s	10 mA/cm ² 에서							40 mA/cm ² 에서	
			Em _{max} (nm)	FWHM (nm)	CIE	V (V)	LE (cd/A)	EQE (%)	LE:EQE	L ₀ (cd/m ²)	T _{0.8} at 70°C
비교예 1	Ir(3-Mepq) ₂ (acac) (9)	206	622	94	0.65 0.35	8.1	14.3	14.1	1.01	4,817	60
비교예 2	Ir(pi-q) ₂ (acac) (9)	229	632	84	0.68 0.32	8.8	10.6	15.2	0.70	3,757	240
1	1 (8)	177	634	68	0.682 0.316	8.6	12.6	16.2	0.78	4,200	70
2	2 (8)	198	636	66	0.688 0.308	8.5	8.5	13	0.66	2,895	80
3	3 (8)	180	618	59	0.662 0.335	8.4	21.1	18.2	1.16	7,042	55
4	4 (12)	186	621	61	0.666 0.331	9.2	18.7	17.4	1.07	6,443	31
5	5 (12)	190	633	67	0.681 0.316	8.5	11.9	15.3	0.78	4,029	25
6	6 (12)	205	631	55	0.691 0.307	8.5	14.0	20.4	0.68	4,694	69
7	7 (12)	210	632	55	0.690 0.307	8.1	13.3	19.4	0.68	4,493	190

[0168]

[0169]

표 2로부터 이해할 수 있는 바와 같이, 본 발명의 화합물을 함유하는 디바이스 실시예는 Ir(3-Mepq)₂(acac) 또는 Ir(pi-q)₂(acac)를 함유하는 비교예에 대하여 유사하거나 더 높은 디바이스 효율 및 수명을 나타내고 또한 극히 좁은 방출 스펙트럼을 나타낸다. 디바이스 실시예 중 몇몇은 매우 우수한 특성을 나타낸다. 예를 들면, 실시예 3의 LE 및 EQE는 각각 (0.662, 0.335)의 CIE에서 21.1 cd/A 및 18.2%이다. 또한, 실시예 4의 LE 및 EQE는 각각 (0.666, 0.331)의 CIE에서 18.7 cd/A 및 11.4%이다. 이러한 효율은 비교예 1의 것보다 유의적으로 더 크고, 비교예 1은 LE 및 EQE 14.3 cd/A 및 14%를 가지며, 약간 보다 더 청색 CIE(0.65, 0.35)를 갖는다. 추가로, 실시예 6의 LE 및 EQE는 각각 (0.691, 0.307)의 CIE에서 14.0 cd/A 및 20.4%이고, 실시예 8의 LE 및 EQE는 각각 (0.690, 0.307)의 CIE에서 13.3 cd/A 및 19.4%이며, 이는 (0.68, 0.32)의 CIE에서 11.1 cd/A 및 15.4%를 갖는 LE 및 EQE를 보유하는 비교예 2와 비교된다. 유의할 것은 이러한 실시예가 비교예 2보다 훨씬 더 적색이라고 할지라도, 이들 실시예에 대한 효율은 여전히 유의적으로 더 높다. 실시예 3, 4, 6 및 7에 대한 EL의 FWHM(Full Width Half Max)은 각각 59, 61, 55 및 55 nm이다. 이들은 FWHM 94 및 84 nm를 지닌 비교예 1 및 2에 대하여 각각 측정된 EL보다 훨씬 더 좁다. 디바이스 실시예 6 및 7은 현재까지 보고된 임의의 적색 인듐 착물 중 가장 좁은 FWHM을 갖는다. 그러므로, 본 발명의 화합물은 디바이스에서 효율, 안정성 및 발광성을 개선시키는데 유리하게 사용될 수 있다. 분지형 디케톤 리간드, 예를 들면 화합물 3, 6 및 7을 사용하는 승화 온도는 또한 제조에서 요구되는 장기간 열적 증발에 매우 적합하도록 매우 낮다.

[0170]

추가로, 70°C 수명 비교는 디바이스 실시예 8이 비교예 1 및 2 양자 보다 더 안정하다는 점을 보여준다. 그러므로, 본 발명의 화합물은 디바이스 수명을 개선시키기 위해서 디바이스에 유리하게 사용될 수 있다.

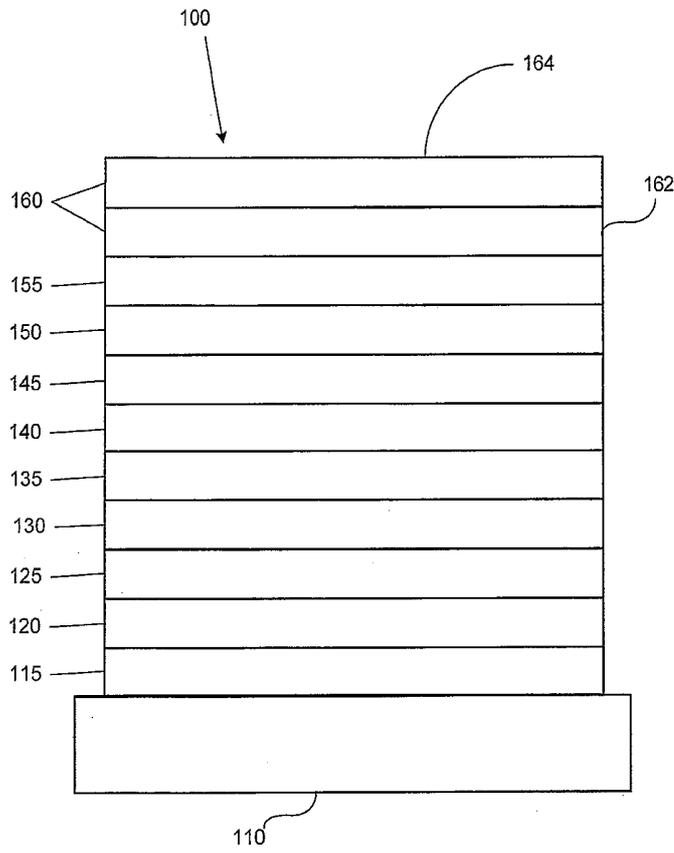
[0171]

본원에 설명된 다양한 실시양태가 단지 예를 들어 존재하며, 그리고 본 발명의 영역을 한정하지 않는 것으로 이해되어야 한다. 예를 들면, 본원에 설명된 물질 및 구조의 다수는 본 발명의 사상으로부터 벗어나는 일 없이 다른 물질 및 구조에 의해 대체될 수 있다. 그러므로, 특허 청구된 바와 같은 본 발명은, 해당 기술 분야의 당업자에게는 명백한 바와 같이, 본원에 설명된 구체적 실시예 및 바람직한 실시양태로부터 유래된 변형을 포함할

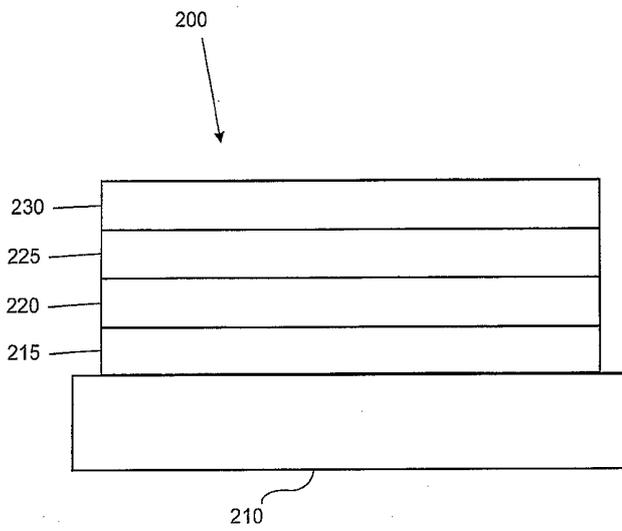
수 있다. 본 발명이 작동하는지에 관한 다양한 이론은 제한되지 않는 것으로 이해되어야 한다.

도면

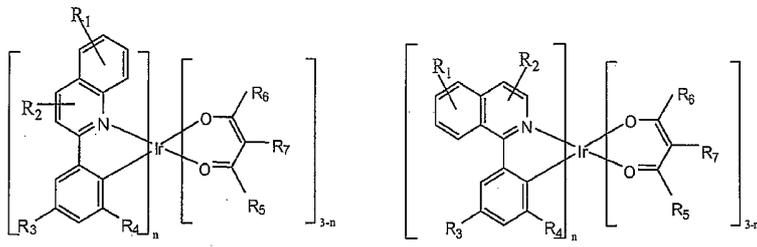
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	发明名称磷光材料		
公开(公告)号	KR1020160005137A	公开(公告)日	2016-01-13
申请号	KR1020157036659	申请日	2009-09-16
[标]申请(专利权)人(译)	环球展览公司		
申请(专利权)人(译)	通用显示器公司		
当前申请(专利权)人(译)	通用显示器公司		
[标]发明人	ALLEYNE BERT 엘린버트 KWONG RAYMOND 광레이몬드 YEAGER WALTER 이거월터 XIA CHUANJUN 지아추안준		
发明人	엘린버트 광레이몬드 이거월터 지아추안준		
IPC分类号	C09K11/06 C07F15/00		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L51/5221 C07F15/0033 C09K2211/1029 C09K2211/185 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5206 H01L2251/301 H01L2251/308		
代理人(译)	基姆金锄 金泰HONG		
优先权	61/097488 2008-09-16 US		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及有机发光器件 (OLED) , 具体涉及用于这种器件的磷光有机材料。更具体地, 本发明涉及如下定义的铱化合物, 其具有结合到OLED中的窄光谱。

