

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2013-0130789 (43) 공개일자 2013년12월02일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C07D 403/10</i> (2006.01) <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01) (21) 출원번호 10-2013-7019094 (22) 출원일자(국제) 2011년12월20일 심사청구일자 없음 (85) 번역문제출일자 2013년07월19일 (86) 국제출원번호 PCT/US2011/066313 (87) 국제공개번호 WO 2012/088192 국제공개일자 2012년06월28일 (30) 우선권주장 61/425,556 2010년12월21일 미국(US)		(71) 출원인 이 아이 듀폰 디 네모아 앤드 캄파니 미합중국 델라웨어주 (우편번호 19898) 월밍톤시 마아캣트 스트리트 1007 (72) 발명자 페니모어, 아담 미국 19808 델라웨어주 월밍톤 아베이 로드 704 하워드, 마이클, 헨리, 주니어 미국 19710 델라웨어주 몽캐닌 몽캐닌 로드 908 (74) 대리인 김영, 양영준, 양영환

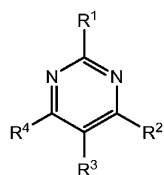
전체 청구항 수 : 총 18 항

(54) 발명의 명칭 **피리미딘 화합물을 포함하는 전자 소자**

(57) 요약

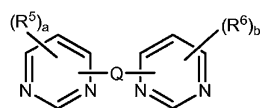
화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 화합물이 제공된다.

[화학식 I]



화학식 I에서, R¹ 내지 R⁴는 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아틸이다. R¹ 내지 R⁴ 중 2개 이상이 아틸 기이며, 하나 이상의 아틸 기는 N,O,S-헤테로사이클을 포함한다. R¹ 내지 R⁴ 중 2개가 N-카르바졸릴 기를 포함하는 경우, R¹ 내지 R⁴ 중 2개는 아틸이 아니다.

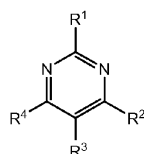
[화학식 II]



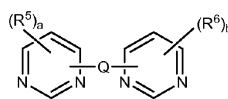
화학식 II에서, Q는 단일 결합 또는 탄화수소 아틸이고;

R⁵ 및 R⁶은 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아틸이다. 하나 이상의 R⁵ 및 하나 이상의 R⁶은 아틸 기이다. 하나 이상의 아틸 기는 N,O,S-헤테로사이클을 포함한다.

대표도



화합물 I



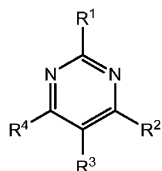
화합물 II

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 화합물:

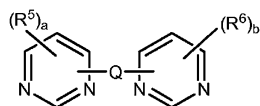
[화학식 I]



(여기서,

R^1 내지 R^4 는 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 R^1 내지 R^4 중 2개 이상이 아릴 기이며, 아릴 기 중 하나 이상이 N,O,S-헤테로사이클을 포함하고, 다만, R^1 내지 R^4 중 2개가 N-카르바졸릴 기를 포함하는 경우에 R^1 내지 R^4 중 2개는 아릴이 아님);

[화학식 II]



(여기서,

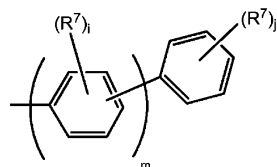
Q는 단일 결합 또는 탄화수소 아릴이고;

R^5 및 R^6 는 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 하나 이상의 R^5 및 하나 이상의 R^6 은 아릴 기이며, 하나 이상의 아릴 기는 N,O,S-헤테로사이클을 포함함).

청구항 2

제1항에 있어서, R^1 내지 R^4 및 R^5 및 R^6 중 하나 이상이 하기 화학식 a를 갖는 화합물:

[화학식 a]



(여기서,

R^7 은 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, D, 알킬, 아릴, 실릴, 알콕시, 실록산, 시아노, 또는 N,O,S-헤테로사이클이고, 다만, 하나 이상의 R^7 은 N,O,S-헤테로사이클이며;

i는 각각 나타날 때 동일하거나 상이하고, 0 내지 4의 정수이며;

j는 0 내지 5의 정수이고;

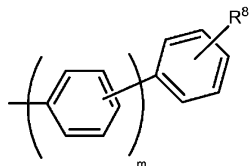
m은 1 내지 5의 정수이며;

여기서, R^1 내지 R^4 중 하나 이상에서 하나 이상의 R^7 이 N,O,S-헤테로사이클임).

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서, R^1 내지 R^4 중 하나 이상 및 R^5 및 R^6 중 하나 이상이 하기 화학식 b를 갖는 화합물 또는 그의 중수소화 유사체:

[화학식 b]



(여기서,

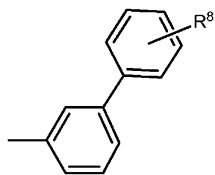
R^8 은 N,O,S-헤테로사이클이고,

m은 1 내지 5의 정수임).

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, R^1 내지 R^4 중 하나 이상 및 R^5 및 R^6 중 하나 이상이 하기 화학식 c를 갖는 화합물:

[화학식 c]



(여기서, R^8 은 N,O,S-헤테로사이클임).

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, R^1 내지 R^6 중 하나 이상이 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 또는 그의 중수소화 유사체인 화합물.

청구항 6

제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서, N,O,S-헤테로사이클이 피리딘, 피리미딘, 트리아진, N-카르바졸릴, 다이벤조퓨란, 다이벤조티오펜, 또는 그의 중수소화 유사체인 화합물.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서, R^1 내지 R^4 중 2개가 아틸이고 R^1 내지 R^4 중 2개가 H 또는 D인 화합물.

청구항 8

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서, R^1 내지 R^4 중 3개가 아틸이고 R^1 내지 R^4 중 하나가 H 또는 D인 화합물.

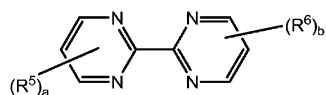
청구항 9

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서, R^1 내지 R^6 이 모두 아릴인 화합물.

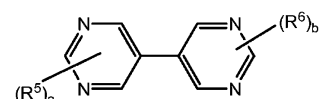
청구항 10

제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 있어서, Q가 단일 결합이며, 하기 화학식 II(a), 화학식 II(b), 또는 화학식 II(c)를 갖는 화합물:

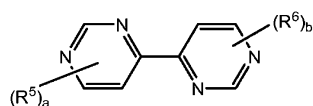
[화학식 II(a)]



[화학식 II(b)]



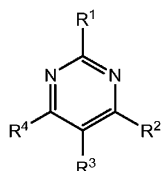
[화학식 II(c)]



청구항 11

(a) 하기 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 및 (b) 380 내지 750 nm에서 최대 방출을 갖는 전계발광이 가능한 도판트를 포함하는 조성물:

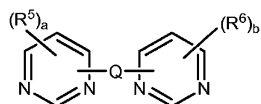
[화학식 I]



(여기서,

R^1 내지 R^4 는 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 R^1 내지 R^4 중 2개 이상이 아릴 기이며, 아릴 기 중 하나 이상이 N,O,S-헤테로사이클을 포함하고, 다만, R^1 내지 R^4 중 2개가 N-카르바졸릴 기를 포함하는 경우에 R^1 내지 R^4 중 2개는 아릴이 아님);

[화학식 II]



(여기서,

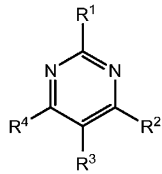
Q는 단일 결합 또는 탄화수소 아릴이고;

R^5 및 R^6 은 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 하나 이상의 R^5 및 하나 이상의 R^6 은 아릴 기이며, 하나 이상의 아릴 기는 N,O,S-헤테로사이클을 포함함).

청구항 12

하기 화학식 I 또는 화학식 II의 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 갖는 전자 소자:

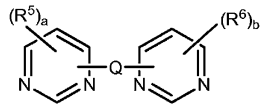
[화학식 I]



(여기서,

R^1 내지 R^4 는 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 R^1 내지 R^4 중 2개 이상이 아릴 기이며, 아릴 기 중 하나 이상이 N,O,S-헤테로사이클을 포함하고, 다만, R^1 내지 R^4 중 2개가 N-카르바졸릴 기를 포함하는 경우에 R^1 내지 R^4 중 2개는 아릴이 아님);

[화학식 II]



(여기서,

Q는 단일 결합 또는 탄화수소 아릴이고;

R^5 및 R^6 은 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 하나 이상의 R^5 및 하나 이상의 R^6 은 아릴 기이며, 하나 이상의 아릴 기는 N,O,S-헤테로사이클을 포함함).

청구항 13

제12항에 있어서,

기재

절연 층;

게이트 전극(gate electrode);

소스 전극(source electrode);

드레인 전극(drain electrode); 및

화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물을 포함하는 유기 반도체 층을 포함하며;

여기서, 게이트 전극 및 반도체 층 양자 모두가 절연 층에 접촉되고, 소스 전극 및 드레인 전극 양자 모두가 반도체 층에 접촉되며, 전극들이 서로에 접촉되지 않는다면, 절연 층, 게이트 전극, 반도체 층, 소스 전극, 및 드레인 전극은 임의의 순서로 배열될 수 있는, 유기 박막 트랜지스터인 소자.

청구항 14

제12항에 있어서, 2개의 전기 접촉 층 사이에 위치하는 하나 이상의 전기활성 층을 포함하며, 여기서 소자의 하나 이상의 전기활성 층이 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 화합물을 포함하는 소자.

청구항 15

제12항 또는 제14항에 있어서, 애노드, 정공 주입 층, 광활성 층, 전자 수송 층, 및 캐소드를 포함하며, 여기서 광활성 층 및 전자 수송 층 중 하나 이상이 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 화합물을 포함하는 소자.

청구항 16

제15항에 있어서, 광활성 층이 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 호스트 재료 및 (b) 유기금속 전계발광 도판트를 포함하는 소자.

청구항 17

제15항 또는 제16항에 있어서, 정공 주입 층이 하나 이상의 전기 전도성 중합체 및 하나 이상의 플루오르화 산 중합체를 포함하는 소자.

청구항 18

제15항 또는 제17항에 있어서, 전자 수송 층이 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 화합물을 포함하는 소자.

명세서

기술분야

[0001] 관련 출원 데이터

[0002] 본 출원은 본 명세서에 전체적으로 참고로 포함된, 2010년 12월 21일자로 출원된 미국 가특허 출원 제 61/425,556호로부터 35 U.S.C. § 119(e) 하에 우선권을 주장한다.

[0003] 본 개시는 일반적으로 전기활성 피리미딘 화합물에 관한 것이다. 이는 또한, 피리미딘 화합물을 갖는 하나 이상의 층을 포함하는 유기 전자 소자에 관한 것이다.

배경기술

[0004] 유기 발광 다이오드("OLED") 디스플레이를 구성하는 OLED와 같은 유기 광활성 전자 소자에서, 유기 전기활성 층은 OLED 디스플레이 내의 2개의 전기 접촉 층 사이에 개재된다. OLED에서, 유기 광활성 층은 전기 접촉 층을 가로질러 전압을 적용할 때 광투과성 전기 접촉 층을 통해 광을 방출한다.

[0005] 발광 다이오드에서 전기활성 성분으로서 유기 전계발광 화합물을 사용하는 것이 주지되어 있다. 단순한 유기 분자, 공액 중합체, 및 유기금속 착물이 사용되어 왔다.

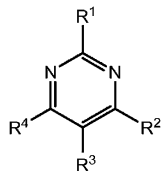
[0006] 광활성 재료를 사용하는 소자는 종종 광활성(예를 들어, 발광) 층과 접촉 층(정공-주입 접촉 층) 사이에 위치하는 하나 이상의 전하 수송 층을 포함한다. 소자는 2개 이상의 접촉 층을 포함할 수 있다. 정공 수송 층은 광활성 층과 정공-주입 접촉 층 사이에 위치할 수 있다. 정공-주입 접촉 층은 또한 애노드(anode)로 불릴 수 있다. 전자 수송 층은 광활성 층과 전자-주입 접촉 층 사이에 위치할 수 있다. 전자-주입 접촉 층은 또한 캐소드(cathode)로 불릴 수 있다. 전하 수송 재료는 또한 광활성 재료와 조합하여 호스트로서 사용될 수 있다.

[0007] 전자 소자를 위한 신규 재료의 필요성이 지속적으로 존재한다.

[0008] 요약

[0009] 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물이 제공된다:

[0010] [화학식 I]



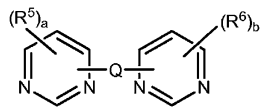
[0011]

[0012] (여기서,

[0013] R¹ 내지 R⁴는 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 R¹ 내지 R⁴ 중 2개 이상이 아릴 기이며, 아릴 기 중 하나 이상이 N,O,S-헤테로사이클을 포함하고, 다만, R¹ 내지 R⁴ 중 2개가 N-

카르바졸릴 기를 포함하는 경우에 R^1 내지 R^4 중 2개는 아릴이 아님);

[0014] [화학식 II]



[0015] (여기서,

[0016] Q는 단일 결합 또는 탄화수소 아릴이고;

[0017] R^5 및 R^6 은 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 하나 이상의 R^5 및 하나 이상의 R^6 은 아릴 기이며, 하나 이상의 아릴 기는 N,O,S-헤테로사이클을 포함함).

[0018] (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트, 및 (b) 380 내지 750 nm에서 최대 방출을 갖는 전계발광이 가능한 도판트를 포함하는 조성물 또한 제공된다.

[0019] 화학식 I 또는 화학식 II의 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 포함하는 전자 소자 또한 제공된다.

[0020] 기재

[0021] 절연 층;

[0022] 게이트 전극(gate electrode);

[0023] 소스 전극(source electrode);

[0024] 드레인 전극(drain electrode); 및

[0025] 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물을 포함하는 유기 반도체 층을 포함하는 박막 트랜지스터 또한 제공되며;

[0026] 여기서, 게이트 전극 및 반도체 층 양자 모두가 절연 층에 접촉되고, 소스 전극 및 드레인 전극 양자 모두가 반도체 층에 접촉되며, 전극들이 서로에 접촉되지 않는다면, 절연 층, 게이트 전극, 반도체 층, 소스 전극, 및 드레인 전극은 임의의 순서로 배열될 수 있다.

[0027] 2개의 전기 접촉 층 사이에 위치하는 하나 이상의 전기활성 층을 포함하는 전자 소자 또한 제공되며, 여기서 소자의 하나 이상의 전기활성 층은 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물을 포함한다.

[0028] 애노드, 정공 주입 층, 광활성 층, 전자 수송 층, 및 캐소드를 포함하는 유기 전자 소자 또한 제공되며, 여기서 광활성 층 및 전자 수송 층 중 하나 이상이 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 화합물을 포함한다.

[0029] 상기의 일반적인 설명 및 하기의 상세한 설명은 단지 예시적이고 설명적이며, 첨부된 청구의 범위에서 한정되는 본 발명을 제한하지 않는다.

도면의 간단한 설명

[0030] 실시 형태들은, 본 명세서에 제시되는 개념의 이해를 돕기 위해 수반되는 도면에서 설명된다.

<도 1a>

도 1a는 유기 전계 효과 트랜지스터(OTFT: organic field effect transistor)의 개략도를 포함하며, 하부 접촉 모드에서 이러한 소자의 전기활성 층의 상대 위치를 나타낸다.

<도 1b>

도 1b는 OTFT의 개략도를 포함하며, 상부 접촉 모드에서 이러한 소자의 전기활성 층의 상대 위치를 나타낸다.

<도 1c>

도 1c는 유기 전계 효과 트랜지스터(OTFT)의 개략도를 포함하며, 상부에 게이트를 가진 하부 접촉 모드에서 이러한 소자의 전기활성 층의 상대 위치를 나타낸다.

<도 1d>

도 1d는 유기 전계 효과 트랜지스터(OTFT)의 개략도를 포함하며, 상부에 게이트를 가진 하부 접촉 모드에서 이러한 소자의 전기활성 층의 상대 위치를 나타낸다.

<도 2>

도 2는 유기 전자 소자의 다른 예의 개략도를 포함한다.

<도 3>

도 3은 유기 전자 소자의 다른 예의 개략도를 포함한다.

당업자는 도면의 물체가 단순함 및 명확함을 위해 예시되어 있으며 반드시 축척에 맞게 그려진 것은 아니라는 것을 인식한다. 예를 들어, 도면 내의 대상들 중 일부의 치수는 실시 형태의 이해를 증진시키는 것을 돕기 위해 다른 대상에 비해 과장될 수도 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0032] 많은 태양 및 실시 형태가 위에서 설명되었으며, 이는 단지 예시적이며 제한하지 않는다. 본 명세서를 읽은 후에, 숙련자는 다른 태양 및 실시 형태가 본 발명의 범주로부터 벗어남이 없이 가능함을 이해한다.

[0033] 실시 형태들 중 임의의 하나 이상의 기타 특징 및 이익이 하기 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용 및 특허청구범위로부터 명백해질 것이다. 상세한 설명은 먼저 용어의 정의 및 해설, 이어서 피리미딘 화합물, 전기활성 조성물, 전자 소자, 및 마지막으로 실시예를 다룬다.

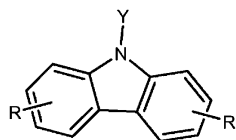
[0034] 1. 용어의 정의 및 해설

[0035] 이하에서 기술되는 실시 형태의 상세 사항을 다루기 전에, 일부 용어를 정의하거나 해설하기로 한다.

[0036] 용어 "알킬"은 지방족 탄화수소로부터 유도된 기를 의미하고자 하는 것이다.

[0037] 용어 "아릴"은 방향족 탄화수소로부터 유도된 기를 의미하고자 하는 것이다. 용어 "방향족 화합물"은 비편재된 pi 전자를 갖는 적어도 하나의 불포화 환형 기를 포함하는 유기 화합물을 의미하고자 하는 것이다. 이 용어는 탄소 및 수소 원자만을 갖는 방향족 화합물, 및 환형 기 내의 하나 이상의 탄소 원자가 다른 원자, 예를 들어 질소, 산소, 황 등에 의해 대체된 헤테로방향족 화합물 양자 모두를 포괄하고자 하는 것이다.

[0038] 용어 "카르바졸릴"은 하기 단위를 함유하는 기를 지칭한다:



[0039]

[0040] (여기서, R은 H, D, 알킬, 아릴, 또는 부착점이고, Y는 아릴 또는 부착점임). 용어 "N-카르바졸릴"은 Y가 부착점인 카르바졸릴 기를 지칭한다.

[0041] 층, 재료, 부재, 또는 구조와 관련하여 용어 "전하 수송"은, 이러한 층, 재료, 부재, 또는 구조가, 상대적 효율 및 전하의 적은 손실을 가지면서 이러한 층, 재료, 부재, 또는 구조의 두께를 통과하여 이러한 전하의 이동을 촉진함을 의미하고자 하는 것이다. 정공 수송 재료는 양전하를 촉진하며; 전자 수송 재료는 음전하를 촉진한다. 광활성 재료는 일부 전하 수송 특성 또한 가질 수 있지만, 용어 "전하 수송 층, 재료, 부재 또는 구조"는 주요 작용이 발광 또는 수광인 층, 재료, 부재, 또는 구조를 포함하는 것을 의도하지 않는다.

[0042] 용어 "도판트"는, 호스트 물질을 포함하는 층 내부에서, 그러한 물질의 부재 하에서의 층의 전자적 특성(들) 또는 방사(radiation)의 방출, 수송, 또는 여파의 파장(들)과 비교하여 층의 전자적 특성(들) 또는 방사의 방출, 수송, 또는 여파의 목표 파장(들)을 변경시키는 물질을 의미하고자 한다.

[0043] 층 또는 재료를 지칭할 때, 용어 "전기활성"은 전자 특성 또는 전자-방사 특성을 나타내는 층 또는 재료를 의미하고자 하는 것이다. 전자 소자에서, 전기활성 재료는 소자의 작동을 전자적으로 촉진한다. 전기활성 재료의 예에는 전자 또는 정공일 수 있는 전하를 전도, 주입, 수송, 또는 차단하는 재료와, 방사를 수송할 때 전자-정공 쌍의 농도 변화를 나타내거나 방사를 방출하는 재료가 포함되나 이에 한정되지 않는다. 비활성 재료의 예는

절연 재료 및 환경 장벽 재료를 포함하나 이에 한정되지 않는다.

- [0044] 용어 "호스트 재료"는 보통 층 형태의 재료를 의미하고자 하며, 여기에 도판트를 첨가할 수 있거나 첨가하지 않을 수 있다. 호스트 재료는 전자적 특성(들) 또는 방사를 방출, 수용 또는 여과하는 능력을 갖거나 갖지 않을 수 있다.
- [0045] 용어 "탄화수소 아릴"은 수소 및 탄소 원자만을 함유하는 아릴 기를 의미하고자 하는 것이다.
- [0046] "층"이라는 용어는 "필름"이라는 용어와 상호 교환 가능하게 사용되고, 목적하는 영역을 덮는 코팅을 말한다. 이 용어는 크기에 의해 제한되지 않는다. 상기 영역은 전체 소자만큼 크거나, 실제 시각 디스플레이와 같은 특정 기능 영역만큼 작거나, 또는 단일 서브픽셀만큼 작을 수 있다. 층 및 필름은 증착, 액체 침착(연속 및 불연속 기술), 및 열 전사를 포함한, 임의의 종래의 침착 기술에 의해 형성될 수 있다. 연속식 침착 기술은 스핀 코팅(spin coating), 그라비어 코팅(gravure coating), 커튼 코팅(curtain coating), 침지 코팅(dip coating), 슬롯-다이 코팅(slot-die coating), 분무 코팅(spray coating) 및 연속식 노즐 코팅(continuous nozzle coating)을 포함하나 이에 한정되지 않는다. 불연속식 침착 기술은 잉크젯 인쇄(ink jet printing), 그라비어 인쇄(gravure printing) 및 스크린 인쇄(screen printing)를 포함하나 이에 한정되지 않는다.
- [0047] 용어 "N-헤테로사이클"은 방향족 고리 내에 하나 이상의 질소를 갖는 헤테로방향족 화합물 또는 기를 지칭한다.
- [0048] 용어 "O-헤테로사이클"은 방향족 고리 내에 하나 이상의 산소를 갖는 헤테로방향족 화합물 또는 기를 지칭한다.
- [0049] 용어 "N,O,S-헤테로사이클"은 방향족 고리 내에 하나 이상의 헤테로원자를 갖는 헤테로방향족 화합물 또는 기를 지칭하며, 여기서 헤테로원자는 N, O, 또는 S이다. N,O,S-헤테로사이클은 하나 이상의 유형의 헤테로원자를 가질 수 있다.
- [0050] 용어 "유기 전자 소자", 또는 때때로 단지 "전자 소자"는 하나 이상의 유기 반도체 층 또는 재료를 포함하는 소자를 의미하고자 하는 것이다.
- [0051] 용어 "광활성"은 (발광 다이오드 또는 화학 전지에서와 같이) 인가된 전압에 의해 활성화될 때 광을 방출하거나 (광검출기 또는 광전지에서와 같이) 방사 에너지에 응답하여 인가된 바이어스 전압의 존재 또는 부재 하에 신호를 발생시키는 재료 또는 층을 의미하고자 하는 것이다.
- [0052] 용어 "S-헤테로사이클"은 방향족 고리 내에 하나 이상의 황을 갖는 헤테로방향족 화합물 또는 기를 지칭한다.
- [0053] 달리 표시되지 않는다면, 모든 기는 치환되지 않거나 치환될 수 있다. 달리 표시되지 않는다면, 모든 기는 선형, 분지형 또는 환형(가능한 경우)일 수 있다. 일부 실시 형태에서, 치환체는 알킬, 알콕시, 및 아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.
- [0054] 본 명세서에 사용되는 바와 같이, 용어 "함유하다", "함유하는", "포함하다", "포함하는", "갖는다", "갖는" 또는 이들의 임의의 다른 변형은 비배타적인 포함을 망라하고자 하는 것이다. 예를 들어, 요소들의 목록을 포함하는 공정, 방법, 용품, 또는 장치는 반드시 그러한 요소만으로 제한되지는 않고, 명확하게 열거되지 않거나 그러한 공정, 방법, 용품, 또는 장치에 내재적인 다른 요소를 포함할 수도 있다. 본 명세서에 개시된 요지의 대안적 실시 형태는 소정의 특징부 또는 요소로 본질적으로 이루어지는 것으로서 설명되는데, 이 실시 형태에서는 실시 형태의 작동 원리 또는 구별되는 특징을 현저히 변화시키는 특징부 또는 요소가 실시 형태 내에 존재하지 않는다. 본 명세서에 기재된 요지의 추가의 대안적 실시 형태는 소정의 특징부 또는 요소로 구성되는 것으로 기재되며, 이 실시 형태에서, 또는 그의 크기 않은 변형예에서는 구체적으로 기재되거나 설명된 특징부 또는 요소만이 존재한다.
- [0055] 더욱이, 달리 표현되어 언급되지 않는 한, "또는"은 포함적인 의미이고 제한적인 의미가 아니다. 예를 들어, 조건 A 또는 B는 하기 중 어느 하나에 의해 만족된다: A는 참(또는 존재함)이고 B는 거짓(또는 존재하지 않음), A는 거짓(또는 존재하지 않음)이고 B는 참(또는 존재함), A 및 B가 모두가 참(또는 존재함).
- [0056] 또한, 부정관사("a" 또는 "an")의 사용은 본 명세서에서 설명되는 요소들 및 구성요소들을 설명하기 위해 채용된다. 이는 단지 편의상 그리고 본 발명의 범주의 전반적인 의미를 제공하기 위해 행해진다. 이러한 기재는 하나 또는 적어도 하나를 포함하는 것으로 이해되어야 하고, 단수형은 그가 달리 의미하는 것이 명백하지 않으면 복수를 또한 포함한다.
- [0057] 원소의 주기율표 내의 컬럼(column)에 대응하는 족(기) 번호는 문헌[CRC Handbook of Chemistry and Physics,

81st Edition (2000-2001)]에 나타난 바와 같은 "새로운 표기"(New Notation) 규정을 사용한다.

- [0058] 달리 정의되지 않으면, 본 명세서에서 사용되는 모든 기술적 및 과학적 용어는 본 발명이 속하는 기술 분야의 숙련자에 의해 통상적으로 이해되는 바와 동일한 의미를 갖는다. 본 명세서에서 설명되는 것과 유사하거나 등가인 방법 및 재료가 본 발명의 실시 형태의 실시 또는 시험에서 사용될 수 있지만, 적합한 방법 및 재료가 후술된다. 본 명세서에서 언급되는 모든 간행물, 특허 출원, 특허, 및 다른 참조 문헌은 특정 구절이 인용되지 않으면 전체적으로 참고로 본 명세서에 포함된다. 상충되는 경우에는, 정의를 비롯하여 본 명세서가 좌우할 것이다. 게다가, 재료, 방법 및 실시예는 단지 예시적인 것이며, 한정하고자 하는 것이 아니다.
- [0059] 본 명세서에 기술되지 않는 범위까지, 구체적인 재료, 가공 행위 및 회로에 관한 많은 상세 사항은 관용적이며, 유기 발광 다이오드 디스플레이, 광검출기, 광전지 및 반도체 부재 기술 분야의 교재 및 기타 출처에서 확인할 수 있다.

[0060] 2. 피리미딘 화합물

- [0061] 전자 수송 재료는 광활성 층 및 전자 수송 층에 호스트 재료로서 사용되어 왔다. 퀴놀린 리간드의 금속 착물(예를 들어 Al, Ga, 또는 Zr과의) 기체의 전자 수송 재료가 이들 응용에 사용되어 왔다. 그러나, 몇 가지 단점이 존재한다. 호스트로서 사용되는 경우, 착물은 대기중 안정성이 불량할 수 있다. 이러한 금속 착물을 채용하여 제작된 부품은 플라즈마 세척(plasma clean)이 어렵다. 낮은 삼중항 에너지(triplet energy)는 >2.0 eV 에너지의 인광 방출의 켄칭(quenching)을 유발한다. 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 기재된 피리미딘 화합물은 더 높은 삼중항 에너지를 갖는다. 본 명세서에 사용되는 바와 같이, 용어 "피리미딘 화합물"은 화합물 내에 하나 이상의 치환된 피리미딘 기 구조를 갖는 화합물을 의미하고자 하는 것이다.

- [0062] 일부 실시 형태에서, 피리미딘 화합물은 OLED 소자를 위한 용액 가공성 전자 주도형 호스트(electron dominated host)로서, 또는 두꺼운 전자 수송 층을 갖는 OLED 소자에서의 n-도핑에 적합한 전자 수송 재료로서 유용하다. 일부 실시 형태에서, 피리미딘 화합물로 제조된 소자는 더 낮은 작동 전압, 더 높은 효율, 및 더 긴 수명을 가질 수 있다. 일부 실시 형태에서, 본 재료는 광전지 및 TFT를 포함하는 임의의 인쇄 전자 응용에 있어서 유용하다.

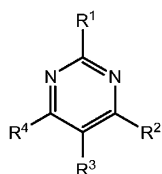
- [0063] 일부 실시 형태에서, 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 화합물은 중수소화된다. 용어 "중수소화된"은 적어도 하나의 수소(H)가 중수소(D)로 대체되었음을 의미하고자 하는 것이다. 용어 "중수소화된 유사체"는, 하나 이상의 이용가능한 수소가 중수소로 대체된 화합물 또는 기의 구조적 유사체를 지칭한다. 중수소화 화합물 또는 중수소화 유사체에서, 중수소는 자연 존재비 수준의 적어도 100 배로 존재한다. 일부 실시 형태에서, 화합물은 적어도 10% 중수소화된다.

- [0064] "중수소화된%" 또는 "중수소화%"란, 양성자+중수소의 합에 대한 중수소의 비를 의미하며, 백분율로서 표현된다. 일부 실시 형태에서, 화합물은 적어도 20% 중수소화되며; 일부 실시 형태에서는, 적어도 30% 중수소화되며; 일부 실시 형태에서는, 적어도 40% 중수소화되고; 일부 실시 형태에서는, 적어도 50% 중수소화되며; 일부 실시 형태에서는, 적어도 60% 중수소화되고; 일부 실시 형태에서는, 적어도 70% 중수소화되며; 일부 실시 형태에서는, 적어도 80% 중수소화되고; 일부 실시 형태에서는, 적어도 90% 중수소화되고; 일부 실시 형태에서는, 100% 중수소화된다.

[0065] a. 화학식 I

- [0066] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 기재된 피리미딘 화합물은 하기 화학식 I을 갖는다:

- [0067] [화학식 I]



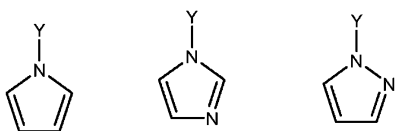
- [0068]
- [0069] (여기서,
- [0070] R¹ 내지 R⁴는 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 R¹ 내지 R⁴ 중 2

개 이상이 아릴 기이며, 아릴 기 중 하나 이상이 N,O,S-헤테로사이클을 포함하고, 다만, R^1 내지 R^4 중 2개가 N-카르바졸릴 기를 포함하는 경우에 R^1 내지 R^4 중 2개는 아릴이 아님).

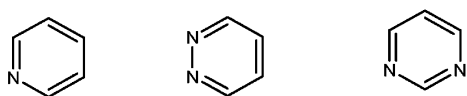
[0071] 본 명세서에 사용되는 바와 같이, N,O,S-헤테로사이클을 포함한다는, N,O,S-헤테로사이클이 피리미딘에 직접 결합될 수 있거나, 피리미딘에 직접 또는 간접 결합된 아릴 기 상의 치환체일 수 있음을 의미하고자 하는 것이다.

[0072] 일부 실시 형태에서, 화학식 I의 화합물은 중수소화된다.

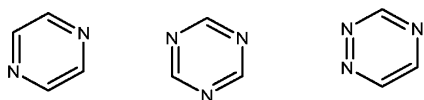
[0073] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 하나 이상이 N-헤테로사이클을 포함한다. N-헤테로사이클의 예는 하기에 나타낸 것들을 포함하나 이에 한정되지 않는다:



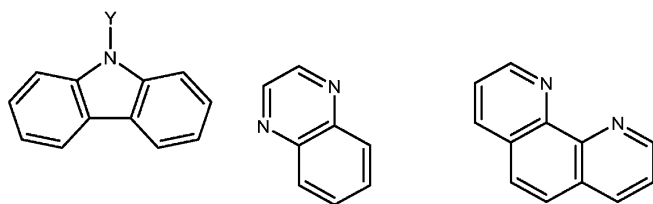
[0074]



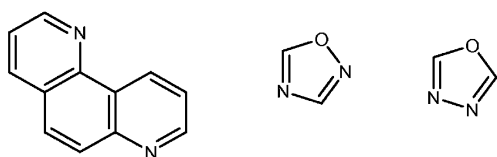
[0075]



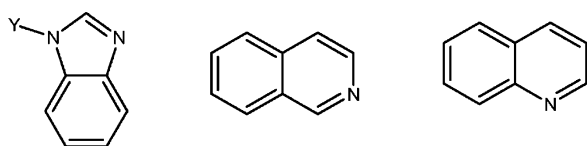
[0076]



[0077]



[0078]



[0079]

[0080] (여기서, Y는 아릴 기 또는 부착점임). 기는 이용가능한 임의의 위치에 결합될 수 있다. 상기 기의 중수소화 유사체 또한 사용할 수 있다.

[0081] 화학식 I의 일부 실시 형태에서, N-헤테로사이클은 피리딘, 피리미딘, 트리아진, N-카르바졸릴, 또는 그의 중수소화 유사체이다.

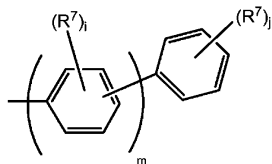
[0082] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 하나 이상이 O-헤테로사이클을 포함한다. 일부 실시 형태에서, O-헤테로사이클은 다이벤조피란, 다이벤조퓨란, 또는 그의 중수소화 유사체이다.

[0083] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 하나 이상이 S-헤테로사이클을 포함한다. 일부 실시 형태에서, S-헤테로사이클은 다이벤조티오펜, 또는 그의 중수소화 유사체이다.

[0084] 화학식 I의 일부 실시 형태에서, N,O,S-헤테로사이클은 피리딘, 피리미딘, 트리아진, N-카르바졸릴, 다이벤조퓨란, 다이벤조티오펜, 또는 그의 중수소화 유사체이다.

[0085] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 하나 이상이 하기 화학식 a를 갖는다:

[0086] [화학식 a]



[0087]

[0088] (여기서,

[0089] R^7 은 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, D, 알킬, 아릴, 실릴, 알콕시, 실록산, 시아노, 또는 N,O,S-헤테로사이클이고, 다만, 하나 이상의 R^7 은 N,O,S-헤테로사이클이며;

[0090] i 는 각각 나타날 때 동일하거나 상이하고, 0 내지 4의 정수이며;

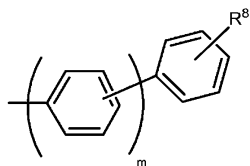
[0091] j 는 0 내지 5의 정수이고;

[0092] m 은 1 내지 5의 정수임).

[0093] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 모두가 화학식 a를 가지며, R^1 내지 R^4 중 하나 이상에서 하나 이상의 R^7 이 N,O,S-헤테로사이클이다.

[0094] 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 하나 이상이 하기 화학식 b를 갖는다:

[0095] [화학식 b]



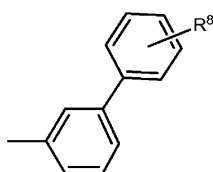
[0096]

[0097] (여기서, R^8 은 N,O,S-헤테로사이클이고, m 은 상기 정의된 바와 같음). 화학식 b를 가진 기는 또한 중수소화될 수 있다.

[0098] 화학식 a 및 화학식 b의 일부 실시 형태에서, m 은 1 내지 2이다.

[0099] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 하나 이상이 하기 화학식 c를 갖는다:

[0100] [화학식 c]



[0101]

[0102] (여기서, R^8 은 상기 정의된 바와 같음). 화학식 c를 가진 기는 또한 중수소화될 수 있다.

[0103] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 하나 이상이 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 또는 그의 중수소화 유사체이다.

[0104] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 2개가 아릴이고, R^1 내지 R^4 중 2개가 H, D, 알킬, 실릴, 알콕

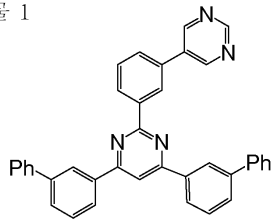
시, 또는 시아노이다. 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 3개가 아틸이고, R^1 내지 R^4 중 하나가 H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 또는 시아노이다. 일부 실시 형태에서, R^1 내지 R^4 는 모두 아틸이다. 일부 실시 형태에서, R^1 및 R^2 는 아틸이고, R^3 및 R^4 는 H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 또는 시아노이다. 일부 실시 형태에서, R^1 및 R^3 은 아틸이고, R^2 및 R^4 는 H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 또는 시아노이다. 일부 실시 형태에서, R^2 및 R^4 는 아틸이고, R^1 및 R^3 은 H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 또는 시아노이다. 일부 실시 형태에서, R^1 , R^2 , 및 R^3 은 아틸이고, R^4 는 H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 또는 시아노이다. 일부 실시 형태에서, R^1 , R^2 , 및 R^4 는 아틸이고, R^3 은 H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 또는 시아노이다. 일부 실시 형태에서, R^2 , R^3 및 R^4 는 아틸이고, R^1 은 H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 또는 시아노이다. 일부 실시 형태에서, R^1 내지 R^4 는 모두 아틸이다. 일부 실시 형태에서, 비아틸 기는 H 또는 D이다. 이들 실시 형태 모두에서, 아틸 기 중 하나 이상이 N,O,S-헤테로사이클을 포함하는 것으로 이해된다.

[0105] 화학식 I의 일부 실시 형태에서는, R^1 내지 R^4 중 2개가 아틸이고, R^1 내지 R^4 중 2개가 알킬 또는 실릴이다. 일부 실시 형태에서, R^2 및 R^4 는 아틸이고, R^3 은 알킬 또는 실릴이다. 일부 실시 형태에서, R^1 은 H, D, 또는 아틸이고, R^2 및 R^4 는 아틸이며, R^3 은 알킬 또는 실릴이다. 일부 실시 형태에서, R^3 은 C1-5 알킬이다.

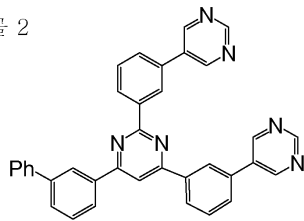
[0106] 화학식 I의 일부 실시 형태에서, 상호 배타적이지 않은, 상기 실시 형태의 임의의 조합이 있을 수 있다.

[0107] 화학식 I을 갖는 화합물의 일부 예를 하기에 나타낸다.

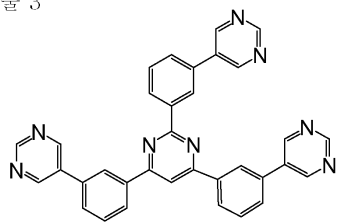
화합물 1



화합물 2

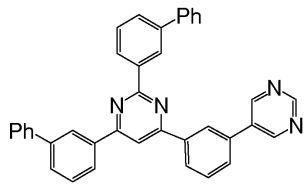


화합물 3

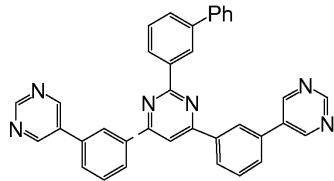


[0108]

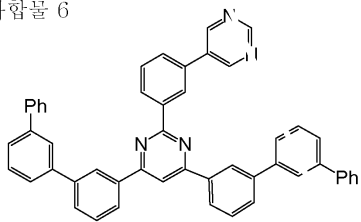
화합물 4



화합물 5

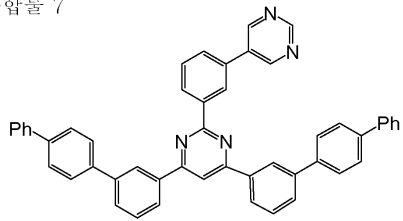


화합물 6

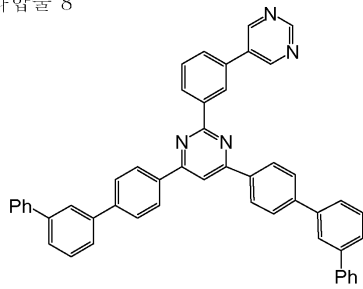


[0109]

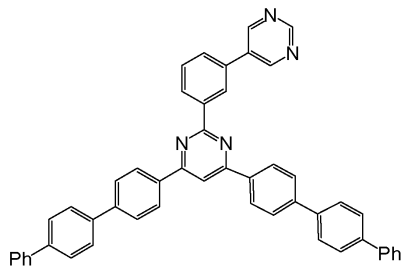
화합물 7



화합물 8



화합물 9

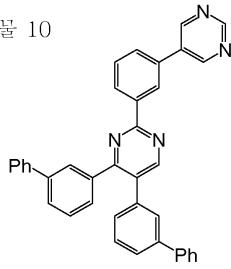


10

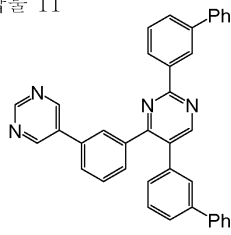
Compound 10

[0110]

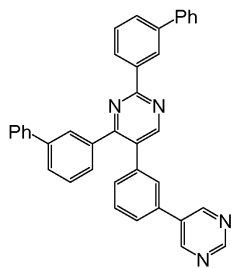
화합물 10



화합물 11

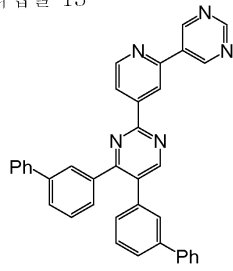


화합물 12

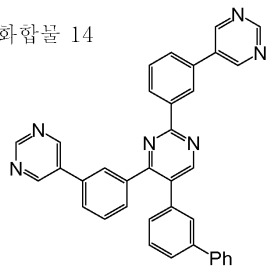


[0111]

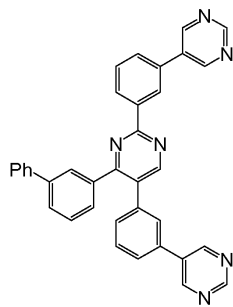
화합물 13



화합물 14

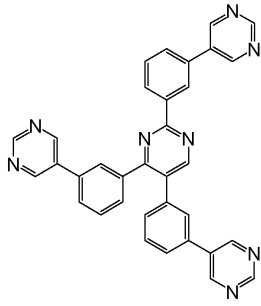


화합물 15

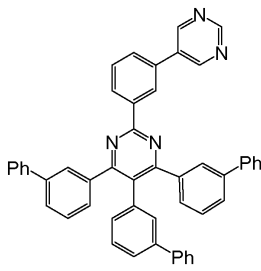


[0112]

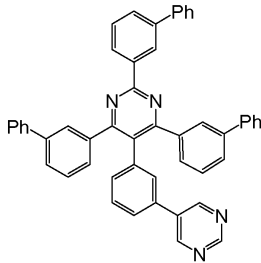
화합물 16



화합물 17

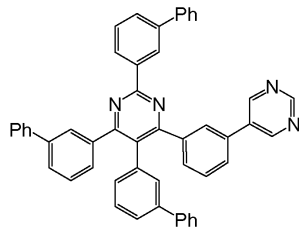


화합물 18

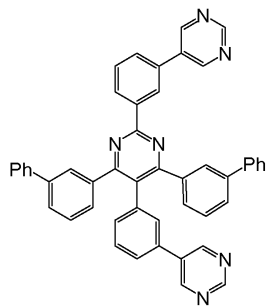


[0113]

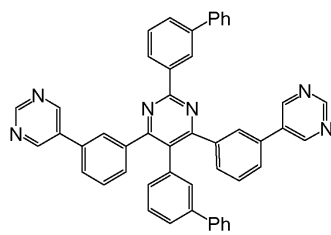
화합물 19



화합물 20

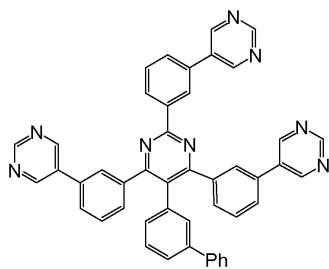


화합물 21

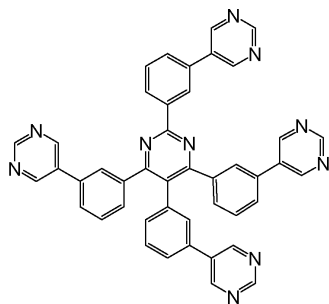


[0114]

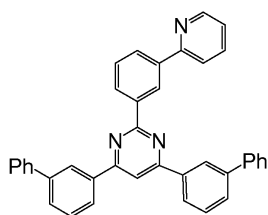
화합물 22



화합물 23

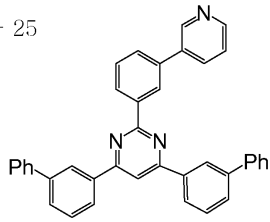


화합물 24

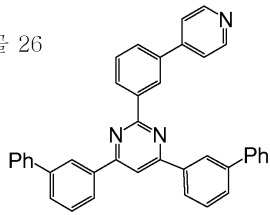


[0115]

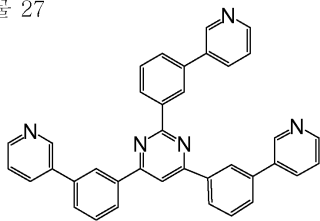
화합물 25



화합물 26

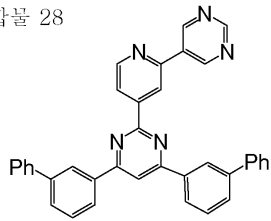


화합물 27

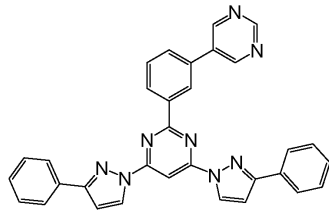


[0116]

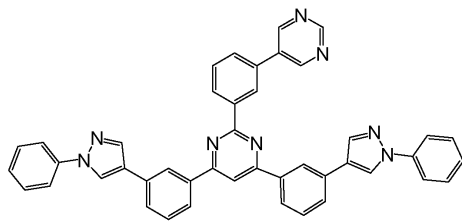
화합물 28



화합물 29

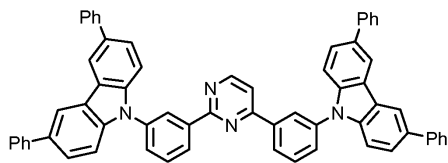


화합물 30

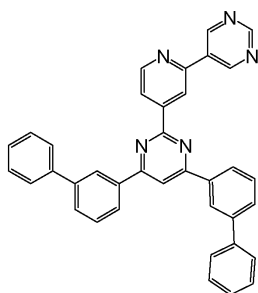


[0117]

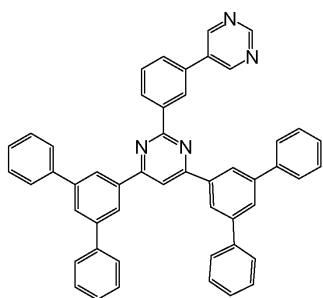
화합물 31



화합물 32

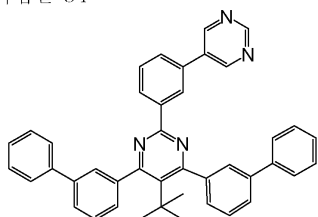


화합물 33



[0118]

화합물 34



[0119]

[0120]

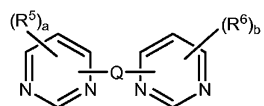
b. 화학식 II

[0121]

일부 실시 형태에서, 본 명세서에 기재된 피리미딘 화합물은 하기 화학식 II를 갖는다:

[0122]

[화학식 II]



[0123]

[0124]

(여기서,

[0125] Q는 단일 결합 또는 탄화수소 아릴이고;

[0126] R^5 및 R^6 은 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, H, D, 알킬, 실릴, 알콕시, 시아노, 또는 아릴이고, 여기서 하나 이상의 R^5 및 하나 이상의 R^6 은 아릴 기이며, 하나 이상의 아릴 기는 N,O,S-헤테로사이클을 포함함).

[0127] 화학식 II의 일부 실시 형태에서, 화합물은 중수소화된다.

[0128] 화학식 II의 일부 실시 형태에서, Q는 페닐렌, 나프틸렌, 바이페닐렌, 바이나프틸렌, 그의 중수소화 유사체이다. 일부 실시 형태에서, Q는 1,4-페닐렌, 2,6-나프틸렌, 4,4'-바이페닐렌, 및 4,4'-(1,1'-바이나프틸렌)으로 구성된 군으로부터 선택된다.

[0129] 화학식 II의 일부 실시 형태에서, N,O,S-헤테로사이클은 피리딘, 피리미딘, 트리아진, N-카르바졸릴, 다이벤조퓨란, 다이벤조티오펜, 또는 그의 중수소화 유사체이다.

[0130] 화학식 II의 일부 실시 형태에서는, R^5 및 R^6 중 하나 이상이 상기와 같이 화학식 a를 갖는다.

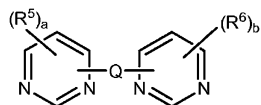
[0131] 화학식 II의 일부 실시 형태에서는, R^5 및 R^6 중 하나 이상이 상기와 같이 화학식 b를 갖는다.

[0132] 화학식 II의 일부 실시 형태에서는, R^5 및 R^6 중 하나 이상이 상기와 같이 화학식 c를 갖는다.

[0133] 화학식 II의 일부 실시 형태에서는, R^5 및 R^6 중 하나가 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 또는 그의 중수소화 유사체이다.

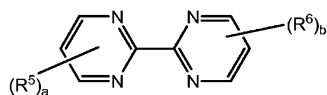
[0134] 화학식 II의 화합물의 일부 실시 형태에서, Q는 단일 결합이고 화합물은 하기 화학식 II(a), 화학식 II(b), 또는 화학식 II(c)를 갖는다:

[0135] [화학식 II(a)]



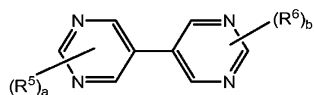
[0136]

[0137] [화학식 II(b)]



[0138]

[0139] [화학식 II(c)]

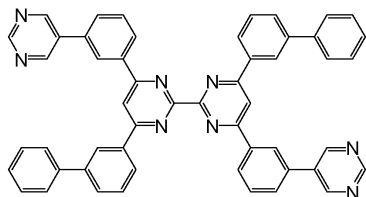


[0140]

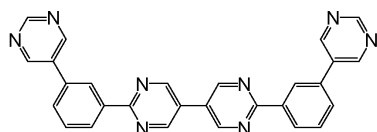
[0141] 화학식 II의 일부 실시 형태에서, 상호 배타적이지 않은, 상기 실시 형태의 임의의 조합이 있을 수 있다.

[0142] 화학식 II를 갖는 재료의 예를 하기에 나타낸다:

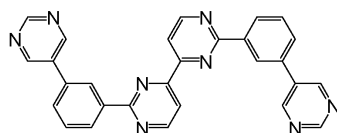
화합물 35



화합물 36



화합물 37



[0143]

[0144] 화학식 I 및 II를 갖는 피리미딘 화합물은 공지의 합성 기술에 의해 제조될 수 있다. 예를 들어, 할로젠화(Cl, Br, 또는 I) 피리미딘과 아릴- 및 헤테로아릴-보론산 또는 스테닐 유사체(stannyl analog) 사이의 전이 금속 촉매화 교차 커플링 반응에 의해 화합물을 제조할 수 있다. 그들은 또한, 아릴- 및 헤테로아릴-니트릴과 엔올화 가능한 케톤 또는 에티닐 방향족의 축합환화(cyclocondensation)에 의해 제조될 수 있다. 추가의 방법은, 우레아 및 티오우레아 유도체와 1,3-다이카르보닐 화합물, 예를 들어 치환된 말론산 유도체의 축합환화를 포함한다. 이는 실시예에 추가로 예시된다.

[0145] 중수소화 전구체 재료를 사용하는 유사한 방식으로, 또는 더욱 일반적으로는, 알루미늄 트리클로라이드 또는 에틸 알루미늄 클로라이드와 같은 루이스 산 H/D 교환 촉매, 또는 CF_3COOD , DCl 등과 같은 산의 존재 하에 비-중수소화 화합물을 d6-벤젠과 같은 중수소화 용매로 처리함으로써, 중수소화 유사체 화합물을 제조할 수 있다. 중수소화 반응은 또한, PCT 출원 제W0 2011-053334호로서 공개된 동시계류중인 출원에 기재되어 있다.

[0146] 3. 전기활성 조성물

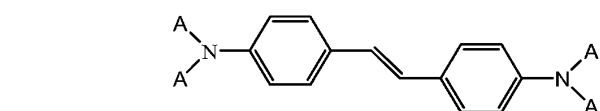
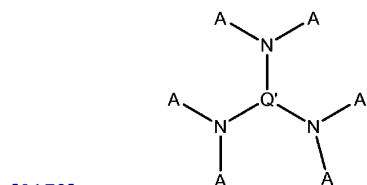
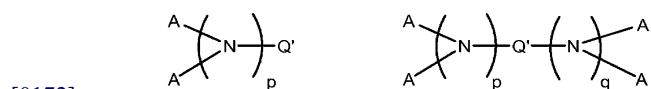
[0147] (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트, 및 (b) 380 내지 750 nm에서 최대 방출을 갖는 전계발광이 가능한 도판트를 포함하는 조성물 또한 제공된다. 화학식 I 및 II의 피리미딘 화합물은 광활성 재료용 호스트 재료로서 유용하다. 화합물은 단독으로, 또는 다른 호스트 재료와 조합하여 사용될 수 있다. 화학식 I 및 II의 화합물은 임의의 방출색을 가진 도판트용 호스트로서 사용할 수 있다. 일부 실시 형태에서, 본 화합물은 유기금속 전계발광 재료용 호스트로서 사용된다.

[0148] 일부 실시 형태에서, 조성물은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트, 및 (b) 380 내지 750 nm에서 최대 방출을 갖는 전계발광이 가능한 광활성 도판트를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 조성물은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트, 및 (b) 380 내지 750 nm에서 최대 방출을 갖는 전계발광이 가능한 광활성 도판트로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 조성물은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트, (b) 380 내지 750 nm에서 최대 방출을 갖는 전계발광이 가능한 광활성 도판트, 및 (c) 제2 호스트 재료를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 조성물은 (a) 화학식 I 또는 화학식

II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트, (b) 380 내지 750 nm에서 최대 방출을 갖는 전계발광이 가능한 광활성 도판트, 및 (c) 제2 호스트 재료를 포함한다.

- [0149] 조성물 중에 존재하는 도판트의 양은 일반적으로, 조성물의 총 중량을 기준으로 3 내지 20 중량%; 일부 실시 형태에서는, 5 내지 15 중량%의 범위이다. 제2 호스트가 존재하는 경우, 화학식 I을 갖는 제1 호스트 대 제2 호스트의 비율은 일반적으로 1:20 내지 20:1; 일부 실시 형태에서는, 5:15 내지 15:5의 범위이다. 일부 실시 형태에서, 화학식 I을 갖는 피리미딘 화합물인 제1 호스트 재료는 총 호스트 재료의 50 중량% 이상이고; 일부 실시 형태에서는, 70 중량% 이상이다.
- [0150] 도판트로서 사용될 수 있는 전계발광("EL") 재료는 소분자 유기 발광 화합물, 발광 금속 착물, 공액 중합체, 및 그의 혼합물을 포함하나 이에 한정되지 않는다. 소분자 발광 유기 화합물의 예는 크라이센, 피렌, 페틸렌, 루브렌, 쿠마린, 안트라센, 티아다리아졸, 그의 유도체, 및 그의 혼합물을 포함하나 이에 한정되지 않는다. 금속 착물의 예는 금속 킬레이트 옥시노이드(metal chelated oxinoid) 화합물, 및 이리듐 및 백금과 같은 금속의 고리금속화 착물을 포함하나 이에 한정되지 않는다. 공액 중합체의 예에는 폴리(페닐렌비닐렌), 폴리플루오렌, 폴리(스피로바이플루오렌), 폴리티오펜, 폴리(p-페닐렌), 그 공중합체, 및 그 혼합물이 포함되지만 이로 한정되지 않는다.
- [0151] 적색 발광 재료의 예는, 페닐퀴놀린 또는 페닐아이소퀴놀린 리간드를 갖는 Ir의 착물, 페리플란텐, 플루오란텐, 및 페틸렌을 포함하나 이에 한정되지 않는다. 적색 발광 재료는, 예를 들어 미국 특허 제6,875,524호 및 미국 출원 공보 제2005-0158577호에 기재되어 있다.
- [0152] 녹색 발광 재료의 예는, 페닐피리딘 리간드를 갖는 Ir의 착물, 비스(다이아릴아미노)안트라센, 및 폴리페닐렌비닐렌 중합체를 포함하나 이에 한정되지 않는다. 녹색 발광 재료는, 예를 들어 공개 PCT 출원 제W0 2007/021117호에 개시되어 있다.
- [0153] 청색 발광 재료의 예는, 페닐피리딘 또는 페닐이미다졸 리간드를 갖는 Ir의 착물, 다이아릴안트라센, 다이아미노크라이센, 다이아미노피렌, 및 폴리플루오렌 중합체를 포함하나 이에 한정되지 않는다. 청색 발광 재료는, 예를 들어 미국 특허 제6,875,524호 및 미국 출원 공보 제2007-0292713호 및 제2007-0063638호에 기재되어 있다.
- [0154] 일부 실시 형태에서, 도판트는 유기금속 착물이다. 일부 실시 형태에서, 유기금속 착물은 고리금속화된다. "고리금속화"란 착물이 적어도 두 지점에서 금속에 결합된 적어도 하나의 리간드를 함유하여 적어도 하나의 탄소-금속 결합을 갖는 적어도 하나의 5- 또는 6-원의 고리를 형성하는 것을 의미한다. 일부 실시 형태에서, 금속은 이리듐 또는 백금이다. 일부 실시 형태에서, 유기금속 착물은 전기적으로 중성이며, 화학식 IrL_3 를 갖는 이리듐의 트리스-고리금속화 착물 또는 화학식 IrL_2Y 를 갖는 이리듐의 비스-고리금속화 착물이다. 일부 실시 형태에서, L은 탄소 원자 및 질소 원자를 통해 배워진 1가 음이온성 2좌 고리금속화 리간드이다. 일부 실시 형태에서, L은 아릴 N-헤테로사이클이며, 여기서, 아릴은 페닐 또는 나프틸이고, N-헤테로사이클은 피리딘, 퀴놀린, 아이소퀴놀린, 다이아진, 피롤, 피라졸 또는 이미다졸이다. 일부 실시 형태에서, Y는 1가 음이온성 2좌 리간드이다. 일부 실시 형태에서, L은 페닐피리딘, 페닐퀴놀린, 또는 페닐아이소퀴놀린이다. 일부 실시 형태에서, Y는 β -다이엔올레이트, 다이케티민, 피콜리네이트, 또는 N-알콕시피라졸이다. 리간드는 F, D, 알킬, 퍼플루오로알킬, 알콕실, 알킬아미노, 아릴아미노, CN, 실릴, 플루오로알콕실 또는 아릴 기로 비치환되거나 치환될 수 있다.
- [0155] 일부 실시 형태에서, 도판트는 이리듐 또는 백금의 고리금속화 착물이다. 이러한 재료는, 예를 들어, 미국 특허 제6,670,645호 및 국제 특허 공개 WO 03/063555호, WO 2004/016710호, 및 WO 03/040257호에 개시되어 있다.
- [0156] 일부 실시 형태에서, 도판트는 화학식 $Ir(L1)a(L2)b(L3)c$ 를 갖는 착물이고; 여기서,
- [0157] L1은 탄소 및 질소를 통해 배워진 1가 음이온성 2좌 배위 사이클로금속화 리간드이며;
- [0158] L2는 탄소를 통해 배워지지 않은 1가 음이온성 2좌 배위 리간드이고;
- [0159] L3은 단좌 배위 리간드이며;
- [0160] a는 1 내지 3이고;
- [0161] b 및 c는 독립적으로 0 내지 2이며;

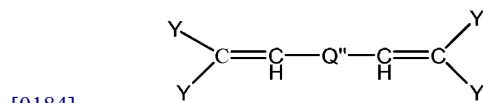
- [0162] a, b, 및 c는 이리듬이 6좌 배위되고 착물이 전기적으로 중성이 되도록 선택된다.
- [0163] 화학식의 일부 예는 $\text{Ir}(\text{L1})_3$; $\text{Ir}(\text{L1})_2(\text{L2})$; 및 $\text{Ir}(\text{L1})_2(\text{L3})(\text{L3}')$ 을 포함하나 이에 한정되지 않으며, 여기서 L3은 음이온성이고 L3'은 비이온성이다.
- [0164] L1 리간드의 예는 페닐피리딘, 페닐퀴놀린, 페닐피리미딘, 페닐피라졸, 티에닐피리딘, 티에닐퀴놀린, 및 티에닐피리미딘을 포함하지만, 이로 한정되지 않는다. 본 명세서에 사용되는 바와 같이, 용어 "퀴놀린"은 달리 명시되지 않는다면 "아이소퀴놀린"을 포함한다. 플루오르화 유도체는 하나 이상의 불소 치환체를 가질 수 있다. 일부 실시 형태에서, 리간드의 비-질소 고리 상에 1 내지 3개의 불소 치환체가 있다.
- [0165] 1가 음이온성 2좌 배위 리간드 L2는 금속 배위 화학 분야에 주지되어 있다. 일반적으로, 이들 리간드는 배위 원자로서 N, O, P, 또는 S를 가지며, 이리듬에 배위될 때 5- 또는 6-원 고리를 형성한다. 적합한 배위 기는 아미노, 이미노, 아미도, 알콕사이드, 카르복실레이트, 포스피노, 티올레이트 등을 포함한다. 이들 리간드를 위한 적합한 모 화합물의 예는, β -다이카르보닐(β -엔올레이트 리간드), 및 그의 N 및 S 유사체; 아미노 카르복실산(아미노카르복실레이트 리간드); 피리딘 카르복실산(이미노카르복실레이트 리간드); 살리실산 유도체(살리실레이트 리간드); 하이드록시퀴놀린(하이드록시퀴놀리네이트 리간드) 및 그의 S 유사체; 및 포스피노알칸올(포스피노알콕사이드 리간드)을 포함한다.
- [0166] 단좌 배위 리간드 L3는 음이온성이거나 비이온성일 수 있다. 음이온성 리간드는 H-(하이드라이드), 및 배위 원자로서 C, O 또는 S를 갖는 리간드를 포함하나 이에 한정되지 않는다. 배위 기는 알콕사이드, 카르복실레이트, 티오카르복실레이트, 다이티오카르복실레이트, 설포네이트, 티올레이트, 카르바메이트, 다이티오카르바메이트, 티오카르바존 음이온, 설펜아미드 음이온 등을 포함하지만, 이로 한정되지 않는다. 일부 경우에는, β -엔올레이트 및 포스피노알콕사이드와 같이 L2로서 상기 열거된 리간드가 단좌 배위 리간드로서 작용할 수 있다. 단좌 배위 리간드는 또한 할라이드, 시아나이드, 아이소시아나이드, 니트레이트, 설페이트, 핵사할로안티모네이트 등과 같은 배위 음이온일 수 있다. 이들 리간드는 일반적으로 구매가능하다.
- [0167] 단좌 배위 L3 리간드는 또한 CO 또는 단좌 배위 포스핀 리간드와 같은 비-이온성 리간드일 수 있다.
- [0168] 일부 실시 형태에서는, 하나 이상의 리간드가 F 및 플루오르화 알킬로 구성된 군으로부터 선택된 적어도 하나의 치환체를 갖는다.
- [0169] 예를 들어 미국 특허 제6,670,645호에 기재된 바와 같은 표준 합성 기술을 사용하여 이리듬 착물 도판트를 제조할 수 있다.
- [0170] 일부 실시 형태에서, 도판트는 작은 유기 발광 화합물이다. 일부 실시 형태에서, 도판트는 비-중합체성 스피로 바이플루오렌 화합물 및 플루오란텐 화합물로 구성된 군으로부터 선택된다.
- [0171] 일부 실시 형태에서, 도판트는 아릴 아민기를 갖는 화합물이다. 일부 실시 형태에서, 광활성 도판트는 하기 화학식으로부터 선택된다:



[0175] (여기서,

[0176] A는 각각 나타날 때 동일하거나 상이하고, 3 내지 60개의 탄소 원자를 갖는 방향족 기이고;

- [0177] Q'은 단일 결합 또는 3 내지 6개의 탄소 원자를 갖는 방향족 기이며;
- [0178] p 및 q는 독립적으로 1 내지 6의 정수임).
- [0179] 상기 화학식의 일부 실시 형태에서, 각각의 화학식 내의 A 및 Q' 중 적어도 하나는 적어도 3개의 축합 고리를 갖는다. 일부 실시 형태에서, p 및 q는 1과 동일하다.
- [0180] 일부 실시 형태에서, Q 은 스티릴 또는 스티릴페닐 기이다.
- [0181] 일부 실시 형태에서, Q'은 적어도 2개의 축합 고리를 갖는 방향족 기이다. 일부 실시 형태에서, Q는 나프탈렌, 안트라센, 크라이센, 피렌, 테트라센, 잔텐, 페릴렌, 쿠마린, 로다민, 퀴나크리돈, 및 루브렌으로 이루어진 군 으로부터 선택된다.
- [0182] 일부 실시 형태에서, A는 페닐, 바이페닐, 톨릴, 나프틸, 나프틸페닐, 및 안트라센일기로 이루어진 군 으로부터 선택된다.
- [0183] 일부 실시 형태에서, 도판트는 하기 화학식을 갖는다:



- [0185] (여기서,
- [0186] Y는 각각 나타날 때 동일하거나 상이하며, 3 내지 6개의 탄소 원자를 갖는 방향족 기이고;
- [0187] Q'은 방향족 기, 2가 트라이페닐아민 잔기, 또는 단일 결합이다.
- [0188] 일부 실시 형태에서, 도판트는 아릴 아센이다. 일부 실시 형태에서, 도판트는 비-대칭성 아릴 아센이다.
- [0189] 일부 실시 형태에서, 광활성 도판트는 크라이센 유도체이다. 용어 "크라이센"은 1,2-벤조페난트렌을 의미하고 자 한다. 일부 실시 형태에서, 광활성 도판트는 아릴 치환체를 갖는 크라이센이다. 일부 실시 형태에서, 광활 성 도판트는 아릴아미노 치환체를 갖는 크라이센이다. 일부 실시 형태에서, 광활성 도판트는 2개의 상이한 아 릴아미노 치환체를 갖는 크라이센이다. 일부 실시 형태에서, 크라이센 유도체는 진청색 방출을 갖는다.
- [0190] 일부 실시 형태에서, 피리미딘 화합물은 부가적인 호스트 재료와 함께 사용된다. 일부 실시 형태에서, 피리미 딴 화합물은 광활성 층에서 호스트로서 사용되지 않는다. 단독으로, 또는 피리미딘 화합물과 조합하여 사용될 수 있는 다른 유형의 호스트의 예는, 인돌로카르바졸, 크라이센, 페난트렌, 트라이페닐렌, 페난트롤린, 트라이 아진, 나프탈렌, 안트라센, 퀴놀린, 아이소퀴놀린, 퀴녹살린, 페닐피리딘, 벤조다이퓨란, 및 금속 퀴놀리네이트 착물, 및 그의 중수소화 유사체를 포함하나 이에 한정되지 않는다.

[0191] 4. 유기 전자 소자

- [0192] 본 명세서에 기재된 중수소화 재료를 포함하는 하나 이상의 층을 갖는 것으로부터 이익을 얻을 수 있는 유기 전 자 소자는 (1) 전기 에너지를 방사로 변환하는 소자(예를 들어, 발광 다이오드, 발광 다이오드 디스플레이, 발 광 조명 기기(luminaire), 또는 다이오드 레이저), (2) 전자공학적인 공정을 통해 신호를 검출하는 소자(예를 들 어, 광검출기, 광전도성 전지, 포토레지스터, 광스위치, 광트랜지스터, 광전관, IR 검출기), (3) 방사를 전기 에너지로 변환하는 소자(예를 들어, 광기전 소자 또는 태양 전지), 및 (4) 하나 이상의 유기 반도체 층을 포함 하는 하나 이상의 전자 구성요소를 포함하는 소자(예를 들어, 박막 트랜지스터 또는 다이오드)를 포함하나 이에 한정되지 않는다. 본 발명의 화합물은 흔히 생물검정(bioassay)에서의 산소 감응 지시약 및 발광 지시약과 같 은 응용에 유용할 수 있다.
- [0193] 일 실시 형태에서, 유기 전자 소자는 상기 논의된 바와 같은 화학식 I 을 갖는 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 포함한다.
- [0194] a. 제1 예시적 소자
- [0195] 특히 유용한 유형의 트랜지스터인 박막 트랜지스터(TFT)는 일반적으로 게이트 전극, 게이트 전극 상의 게이트 유전체, 게이트 유전체에 인접한 소스 전극 및 드레인 전극, 및 게이트 유전체에 인접하고 소스 전극 및 드레인 전극에 인접한 반도체 층을 포함한다(예를 들어, 문헌[S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, 2nd

edition, John Wiley and Sons, page 492] 참조). 이들 구성요소는 다양한 구성으로 조립될 수 있다. 유기 박막 트랜지스터(OTFT)는 유기 반도체 층을 갖는 것으로 특성화된다.

- [0196] 일 실시 형태에서, OTFT는,
- [0197] 기재
- [0198] 절연 층;
- [0199] 게이트 전극;
- [0200] 소스 전극;
- [0201] 드레인 전극; 및
- [0202] 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물을 포함하는 유기 반도체 층을 포함하며;
- [0203] 여기서, 게이트 전극 및 반도체 층 양자 모두가 절연 층에 접촉되고, 소스 전극 및 드레인 전극 양자 모두가 반도체 층에 접촉되며, 전극들이 서로에 접촉되지 않는다면, 절연 층, 게이트 전극, 반도체 층, 소스 전극, 및 드레인 전극은 임의의 순서로 배열될 수 있다.
- [0204] 도 1a에는, 하부 접촉 모드 에서 이러한 소자의 전기활성 층의 상대 위치를 나타내는 유기 전계 효과 트랜지스터(OTFT)가 개략적으로 예시되어 있다. (OTFT의 하부 접촉 모드 에서는, 드레인 전극 및 소스 전극이 게이트 유전체 층 상에 침착된 후에 전기활성 유기 반도체 층을 소스 전극 및 드레인 전극 및 임의의 잔류하는 노출된 게이트 유전체 층 상에 침착시킨다.) 기재(112)는 게이트 전극(102) 및 절연 층(104)과 접촉되며 그 상부에는 소스 전극(106) 및 드레인 전극(108)이 침착된다. 소스 전극 및 드레인 전극의 위에, 그리고 그 사이에는 화학식 I 또는 화학식 II의 피리미딘 화합물을 포함하는 유기 반도체 층(110)이 있다.
- [0205] 도 1b는, 상부 접촉 모드에서 이러한 소자의 전기활성 층의 상대 위치를 나타내는 OTFT의 개략도이다. (상부 접촉 모드 에서는, OTFT의 드레인 전극 및 소스 전극은 전기활성 유기 반도체 층의 상부에 침착된다.)
- [0206] 도 1c는, 상부에 게이트를 가진 하부 접촉 모드에서 이러한 소자의 전기활성 층의 상대 위치를 나타내는 OTFT의 개략도이다.
- [0207] 도 1d는, 상부에 게이트를 가진 상부 접촉 모드에서 이러한 소자의 전기활성 층의 상대 위치를 나타내는 OTFT의 개략도이다.
- [0208] 기재는 무기 유리, 세라믹 포일, 중합체성 재료(예를 들어, 아크릴, 에폭시, 폴리아미드, 폴리카르보네이트, 폴리이미드, 폴리케톤, 폴리(옥시-1, 4-페닐렌옥시-1,4-페닐렌카르보닐-1,4-페닐렌)(간혹 폴리(에테르 에테르 케톤) 또는 PEEK라고 지칭됨), 폴리노르보렌, 폴리페닐렌옥사이드, 폴리(에틸렌 나프탈렌다이카르복실레이트)(PEN), 폴리(에틸렌 테레프탈레이트)(PET), 폴리(페닐렌 설파이드)(PPS)), 충전된 중합체성 재료(예를 들어, 섬유-강화 플라스틱(FRP)), 및/또는 코팅된 금속 포일을 포함할 수 있다. 기재의 두께는 약 10 마이크로미터 내지 10 밀리미터 초과; 예를 들어, 가요성 플라스틱 기재의 경우에는 약 50 내지 약 100 마이크로미터; 유리 또는 규소와 같은 경성 기재의 경우에는 약 1 내지 약 10 밀리미터일 수 있다. 전형적으로, 기재는 제조, 시험, 및/또는 사용 중에 OTFT를 지지한다. 임의로, 기재는 OTFT를 위한 소스, 드레인, 및 전극 및 회로에 버스 라인 연결(bus line connection)과 같은 전기적 작용을 제공할 수 있다.
- [0209] 게이트 전극은 금속 박막, 전도성 중합체 필름, 전도성 잉크 또는 페이스트로 제조된 전도성 필름 또는 기재 자체, 예를 들어 도핑이 많이 된 규소일 수 있다. 적합한 게이트 전극 재료의 예는, 알루미늄, 금, 크롬, 인듐 주석 산화물, 폴리스티렌 설포네이트-도핑된 폴리(3,4-에틸렌다이옥시티오펜)(PSS-PEDOT)과 같은 전도성 중합체, 중합체 바인더 중의 카본 블랙/흑연 또는 콜로이드성 은 분산액으로 이루어진 전도성 잉크/페이스트를 포함한다. 일부 OTFT에서는, 동일한 재료가 게이트 전극 작용을 제공하면서, 또한 기재의 지지 작용을 제공할 수 있다. 예를 들어, 도핑된 규소는 게이트 전극으로서 작용하면서, OTFT를 지지할 수 있다.
- [0210] 게이트 전극은, 진공 증발, 금속 또는 전도성 금속 산화물의 스퍼터링, 스핀 코팅, 캐스팅, 또는 인쇄에 의한 전도성 중합체 용액 또는 전도성 잉크로부터의 코팅에 의해 제조될 수 있다. 게이트 전극의 두께는, 예를 들어, 금속 필름의 경우에 약 10 내지 약 200 나노미터, 및 중합체 전도체의 경우에 약 1 내지 약 10 마이크로미터일 수 있다.
- [0211] 소스 전극 및 드레인 전극은, 반도체 층과 소스 전극 및 드레인 전극 사이의 접촉의 저항이 반도체 층의 저항

미만이도록, 반도체 층에 저저항 옴 접촉(low resistance ohmic contact)을 제공하는 재료로 제작될 수 있다. 채널 저항은 반도체 층의 전도도이다. 전형적으로, 저항은 채널 저항 미만이어야 한다. 소스 전극 및 드레인 전극으로서 사용하기에 적합한 전형적인 재료는, 알루미늄, 바륨, 칼슘, 크롬, 금, 은, 니켈, 팔라듐, 백금, 티타늄, 및 그의 합금; 탄소 나노튜브; 폴리아닐린 및 폴리(3,4-에틸렌다이옥시티오펜)/폴리-(스티렌 설포네이트)(PEDOT:PSS)와 같은 전도성 중합체; 전도성 중합체 층의 탄소 나노튜브의 분산액; 전도성 중합체 층의 금속의 분산액; 및 그의 다층을 포함한다. 당업자에게 공지된 바와 같이, 이들 재료 중 일부는 n-형 반도체 재료와 함께 사용하기에 적절하고, 다른 것들은 p-형 반도체 재료와 함께 사용하기에 적절하다. 소스 전극 및 드레인 전극의 전형적인 두께는, 예를 들어 약 40 나노미터 내지 약 1 마이크로미터이다. 일부 실시 형태에서, 두께는 약 100 내지 약 400 나노미터이다.

[0212] 절연 층은 무기 재료 필름 또는 유기 중합체 필름을 포함한다. 절연 층으로서 적합한 무기 재료의 예시적인 예는, 알루미늄 산화물, 규소 산화물, 탄탈륨 산화물, 티타늄 산화물, 질화 규소, 티탄산 바륨, 티탄산 바륨 스트론튬, 지르콘산 티탄산 바륨, 셀렌화 아연, 및 황화 아연을 포함한다. 부가적으로, 전술한 재료의 합금, 조합, 및 다층을 절연 층으로서 사용할 수 있다. 절연 층을 위한 유기 중합체의 예시적인 예는, 폴리에스테르, 폴리카르보네이트, 폴리(비닐 페놀), 폴리아미드, 폴리스티렌, 폴리(메타크릴레이트), 폴리(아크릴레이트), 에폭시 수지, 및 그의 블렌드 및 다층을 포함한다. 절연 층의 두께는, 사용된 유전체 재료의 유전율에 따라, 예를 들어 약 10 나노미터 내지 약 500 나노미터이다. 예를 들어, 절연 층의 두께는 약 100 나노미터 내지 약 500 나노미터일 수 있다. 절연 층의 전도도는, 예를 들어, 약 10^{-12} S/cm(여기서 S = 지멘스 = 1/옴) 미만일 수 있다.

[0213] 게이트 전극 및 반도체 층 양자 모두가 절연 층에 접촉되고, 소스 전극 및 드레인 전극 양자 모두가 반도체 층에 접촉되는 한, 절연 층, 게이트 전극, 반도체 층, 소스 전극, 및 드레인 전극은 임의의 순서로 형성된다. 구문 "임의의 순서로"는 순차적 형성 및 동시 형성을 포함한다. 예를 들어, 소스 전극 및 드레인 전극은 동시에, 또는 순차적으로 형성될 수 있다. 물리 증착(예를 들어, 열증발 또는 스퍼터링) 또는 잉크젯 인쇄와 같은 공지 방법을 사용하여 게이트 전극, 소스 전극, 및 드레인 전극을 제공할 수 있다. 새도우 마스크, 첨가 사진평판(additive photolithography), 삭제 사진평판(subtractive photolithography), 인쇄, 미세접촉 인쇄, 및 패턴 코팅과 같은 공지 방법에 의해 전극의 패턴화를 수행할 수 있다.

[0214] 하부 접촉 모드 OTFT(도 1a)에 있어서, 각각 소스 및 드레인을 위한 채널을 형성하는 전극(106 및 108)은, 사진 평판 공정을 사용하여 이산화규소 층 상에 생성시킬 수 있다. 이어서, 반도체 층(110)을 전극(106 및 108) 및 층(104)의 표면 위에 침착시킨다.

[0215] 일 실시 형태에서, 반도체 층(110)은 화학식 I 또는 화학식 II에 의해 나타내어지는 하나 이상의 화합물을 포함한다. 반도체 층(110)은 당업계에 공지된 다양한 기술에 의해 침착될 수 있다. 이들 기술은, 열증발, 화학 증착, 열전사, 잉크젯 인쇄, 및 스크린-인쇄를 포함한다. 침착을 위한 분산액 박막 코팅 기술은 스핀 코팅, 닥터 블레이드 코팅(doctor blade coating), 드롭 캐스팅(drop casting), 및 다른 공지 기술을 포함한다.

[0216] 상부 접촉 모드 OTFT(도 1b)에 있어서, 전극(106 및 108)의 제작 전에 층(110)을 층(104) 상에 침착시킨다.

[0217] b. 제2 예시적 소자

[0218] 본 발명은 또한, 2개의 전기 접촉 층 사이에 위치하는 하나 이상의 전기활성 층을 포함하는 전자 소자에 관한 것으로서, 여기서 소자의 하나 이상의 전기활성 층은 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물을 포함한다.

[0219] 유기 전자 소자 구조의 다른 예를 도 2에 나타낸다. 소자(200)는 제1 전기 접촉 층인 애노드 층(210)과 제2 전기 접촉 층인 캐소드 층(260), 및 그들 사이의 광활성 층(240)을 갖는다. 애노드에 인접하여 정공 주입 층(220)이 존재할 수 있다. 정공 주입 층에 인접하여, 정공 수송 재료를 포함하는 정공 수송 층(230)이 존재할 수 있다. 캐소드에 인접하여, 전자 수송 재료를 포함하는 전자 수송 층(250)이 있을 수 있다. 소자는 애노드(210) 옆의 하나 이상의 부가적인 정공 주입 또는 정공 수송 층(도시하지 않음) 및/또는 캐소드(260) 옆의 하나 이상의 부가적인 전자 주입 또는 전자 수송 층(도시하지 않음)을 사용할 수 있다.

[0220] 층(220 내지 250)을 개별적으로 그리고 집합적으로 전기활성 층이라고 지칭한다.

[0221] 일부 실시 형태에서는, 도 3에 나타난 바와 같이 광활성 층(240)이 픽셀화된다. 층(240)은 층 전반에서 반복되는 픽셀 또는 서브픽셀 단위(241, 242, 및 243)로 나누어진다. 각각의 픽셀 또는 서브픽셀 단위는 상이한 색을 나타낸다. 일부 실시 형태에서, 서브픽셀 단위는 적색, 녹색, 및 청색을 위한 것이다. 도면에는 3종의 서브픽

셀 단위가 도시되어 있지만, 2종의 또는 3종 초과 단위 사용될 수 있다.

- [0222] 일 실시 형태에서, 상이한 층은 하기 범위의 두께를 가진다: 애노드(210)는 500 내지 5000 Å이며, 일 실시 형태에서는 1000 내지 2000 Å이고; 정공 주입 층(220)은 50 내지 2000 Å이며, 일 실시 형태에서는 200 내지 1000 Å이고; 정공 수송 층(230)은 50 내지 2000 Å이며, 일 실시 형태에서는 200 내지 1000 Å이고; 전기활성 층(240)은 10 내지 2000 Å이며, 일 실시 형태에서는 100 내지 1000 Å이고; 층(250)은 50 내지 2000 Å이며, 일 실시 형태에서는 100 내지 1000 Å이고; 캐소드(260)는 200 내지 10000 Å이며, 일 실시 형태에서는 300 내지 5000 Å이다. 소자 내의 전자-정공 재조합 구역의 위치, 및 이에 따른 소자의 방출 스펙트럼은, 각 층의 상대적인 두께에 의해 영향을 받을 수 있다. 층 두께의 목적하는 비율은 사용되는 재료의 정확한 성질에 따라 달라질 것이다. 일부 실시 형태에서, 소자는 가공을 보조하거나 작용성을 개선하기 위한 부가적인 층을 갖는다.
- [0223] 소자(200)의 응용에 따라, 광활성 층(240)은 (발광 다이오드 또는 발광 전기화학 전지에서와 같이) 인가된 전압에 의해 활성화되는 발광층, 또는 (광검출기에서와 같이) 방사 에너지에 응답하여 인가된 바이어스 전압에 의해 또는 인가된 바이어스 전압 없이 신호를 발생시키는 재료의 층일 수 있다. 광검출기의 예는 광전도성 전지, 광저항기, 광스위치, 광트랜지스터 및 광전관, 및 광전지를 포함하며, 이들 용어는 문헌[Markus, John, *Electronics and Nucleonics Dictionary*, 470 and 476 (McGraw-Hill, Inc. 1966)]에 기술되어 있다. 백색광 조명 기기와 같은 조명 응용을 위해, 또는 디스플레이를 형성시키기 위하여, 발광 층을 가진 소자를 사용할 수 있다.
- [0224] 본 명세서에 기재된 하나 이상의 신규 전기활성 화합물이 소자의 하나 이상의 전기활성 층 내에 존재할 수 있다.
- [0225] 일부 실시 형태에서, 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 신규 전기활성 화합물은 광활성 층(240) 내의 광활성 도판트 재료용 호스트 재료로서 유용하다. 이들 화합물을 단독으로 사용하거나, 다른 코호스트와 함께 사용할 경우, 그들은 OLED 소자에 개선된 효율 및 수명을 제공할 수 있는 것으로 밝혀졌다. 이들 화합물은 높은 삼중항 에너지, 및 전하 수송에 적절한 HOMO 및 LUMO 수준을 가짐으로써 그들을 유기금속 방출체를 위한 우수한 호스트 재료로 만든다는 것이 계산을 통해 발견되었다.
- [0226] 일부 실시 형태에서, 신규 전기활성 화합물은 층(250)에서 전자 수송 재료로서 유용하다.
- [0227] 광활성 층
- [0228] 일부 실시 형태에서, 광활성 층(240)은 상기의 전기활성 조성물을 포함한다.
- [0229] 일부 실시 형태에서, 도판트는 유기금속 재료이다. 일부 실시 형태에서, 유기금속 재료는 Ir 또는 Pt의 착물이다. 일부 실시 형태에서, 유기금속 재료는 Ir의 고리금속화 착물이다.
- [0230] 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, 및 (b) 하나 이상의 도판트를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, 및 (b) 유기금속 전계발광 도판트를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, (b) 광활성 도판트, 및 (c) 제2 호스트 재료를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, (b) Ir 또는 Pt의 유기금속 착물, 및 (c) 제2 호스트 재료를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, (b) Ir의 고리금속화 착물, 및 (c) 제2 호스트 재료를 포함한다.
- [0231] 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, 및 (b) 하나 이상의 도판트로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 화합물인 호스트 재료, 및 (b) 유기금속 전계발광 도판트로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, (b) 광활성 도판트, 및 (c) 제2 호스트 재료로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, (b) Ir 또는 Pt의 유기금속 착물, 및 (c) 제2 호스트 재료로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료, (b) Ir의 고리금속화 착물, 및 (c) 제2 호스트 재료로 본질적으로 구성된다.
- [0232] 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료(여기서, 화합물은 중수소화됨), 및 (b) 하나 이상의 도판트로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은

화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료(여기서, 화합물은 중수소화됨), 및 (b) 유기금속 전계발광 도판트로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 (a) 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료(여기서, 화합물은 중수소화됨), (b) 광활성 도판트, 및 (c) 제2 호스트 재료로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 광활성 층은 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물인 호스트 재료(여기서, 화합물은 중수소화됨), (b) Ir 또는 Pt의 유기금속 착물, 및 (c) 제2 호스트 재료로 본질적으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 화학식 I 또는 화학식 II의 중수소화 화합물은 10% 이상 중수소화되고; 일부 실시 형태에서는, 50% 이상 중수소화된다. 일부 실시 형태에서, 제2 호스트 재료는 중수소화된다. 일부 실시 형태에서, 제2 호스트 재료는 10% 이상 중수소화되고; 일부 실시 형태에서는, 50% 이상 중수소화된다.

[0233] 전자 수송 층

[0234] 화학식 I 및 II의 피리미딘 화합물은 층(250)에서 전자 수송 재료로서 유용하다. 화합물은 단독으로, 또는 다른 전자 수송 재료와 조합하여 사용될 수 있다. 일부 실시 형태에서, 전자 수송 층은 화학식 I 또는 II의 피리미딘 화합물로 본질적으로 구성된다.

[0235] 단독으로, 또는 피리미딘 화합물과 조합하여 사용될 수 있는 다른 전자 수송 재료의 예는, 금속 퀴놀레이트 유도체, 예를 들어 트리스(8-하이드록시퀴놀레이토)알루미늄(AIQ), 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)(p-페닐페놀레이토)알루미늄(BAlq), 테트라키스-(8-하이드록시퀴놀레이토)hafnium(HfQ), 및 테트라키스-(8-하이드록시퀴놀레이토)지르코늄(ZrQ); 및 아졸 화합물, 예를 들어 2-(4-바이페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사다리아졸(PBD), 3-(4-바이페닐릴)-4-페닐-5-(4-t-부틸페닐)-1,2,4-트리아자졸(TAZ) 및 1,3,5-트라이(페닐-2-벤즈이미다졸)벤젠(TPBI); 퀴놀살린 유도체, 예를 들어 2,3-비스(4-플루오로페닐)퀴놀살린; 페난트롤린, 예를 들어 4,7-다이페닐-1,10-페난트롤린(DPA) 및 2,9-다이메틸-4,7-다이페닐-1,10-페난트롤린(DDPA) 및 그의 혼합물을 포함하는 금속 킬레이트 옥시노이드 화합물을 포함하나 이에 한정되지 않는다. 일부 실시 형태에서, 전자 수송 재료는 금속 퀴놀레이트와 페난트롤린 유도체로 이루어진 군으로부터 선택된다. 일부 실시 형태에서, 전자 수송 층은 n-도판트를 추가로 포함한다. N-도판트 재료는 주지되어 있다. n-도판트는, 1족 및 2족 금속; 1족 및 2족 금속 염, 예를 들어 LiF, CsF, 및 Cs₂CO₃; 1족 및 2족 금속 유기 화합물, 예를 들어 Li 퀴놀레이트; 및 분자 n-도판트, 예를 들어 류코 염료, 금속 착물, 예를 들어 W₂(hpp)₄(여기서 hpp=1,3,4,6,7,8-헥사하이드로-2H-피리미도-[1,2-a]-피리미딘임) 및 코발토센, 테트라티아나프타센, 비스(에틸렌다이티오)테트라티아폴발렌, 헤테로사이클릭 라디칼 또는 다이라디칼, 및 이량체, 올리고머, 중합체, 헤테로사이클릭 라디칼 또는 다이라디칼의 폴리사이클 및 다이스포로 화합물을 포함하나 이에 한정되지 않는다.

[0236] 기타 소자 층

[0237] 소자 내의 기타 층은 그러한 층에 유용한 것으로 공지된 임의의 재료로 제조될 수 있다.

[0238] 애노드(210)는 양전하 캐리어를 주입하는 데 있어서 특히 효율적인 전극이다. 이는, 예를 들어 금속, 혼합 금속, 합금, 금속 산화물 또는 혼합-금속 산화물을 포함하는 재료로 제조되거나, 전도성 중합체, 또는 그의 혼합물일 수 있다. 적합한 금속은 11족 금속, 4 내지 6족 내의 금속, 및 8 내지 10족 전이 금속을 포함한다. 애노드가 광투과성이라면, 12, 13 및 14족 금속의 혼합-금속 산화물, 예를 들어 인듐-주석-산화물이 일반적으로 사용된다. 애노드(210)는 또한, 문헌 ["Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer," *Nature* vol. 357, pp 477-479 (11 June 1992)]에 기재된 바와 같이 폴리아닐린과 같은 유기 재료를 포함할 수 있다. 애노드 및 캐소드 중 하나 이상은 바람직하게는, 발생하는 빛이 관찰되도록 적어도 부분적으로 투명하다.

[0239] 정공 주입 층(220)은 정공 주입 재료를 포함하며, 유기 전자 소자에서 기저 층의 평탄화, 전하 수송 및/또는 전하 주입 특성, 산소 또는 금속 이온과 같은 불순물의 제거, 및 유기 전자 소자의 성능을 증진 또는 개선하는 다른 측면들을 포함하지만 이에 한정되지 않는 하나 이상의 작용을 가질 수 있다. 정공 주입 재료는 중합체, 올리고머, 또는 소분자일 수 있다. 정공 주입 재료는 중착되거나, 또는 용액, 분산액, 현탁액, 에멀전, 콜로이드 혼합물 또는 다른 조성물의 형태일 수 있는 액체로부터 침착될 수 있다.

[0240] 정공 주입 층은 양성자성 산(protonic acid)으로 종종 도핑되는, 폴리아닐린(PANI) 또는 폴리에틸렌다이옥시티오펜(PEDOT)과 같은 중합체성 재료로 형성될 수 있다. 양성자성 산은 예를 들어 폴리(스티렌설포산), 폴리(2-아크릴아미도-2-메틸-1-프로판설포산) 등일 수 있다.

- [0241] 정공 주입 층은 구리 프탈로시아닌 및 테트라티아폴발렌-테트라시아노퀴노다이메탄 시스템(TTF-TCNQ)과 같은, 전하 전달 화합물 등을 포함할 수 있다.
- [0242] 일부 실시 형태에서, 정공 주입 층은 적어도 하나의 전기 전도성 중합체 및 적어도 하나의 플루오르화 산 중합체를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 정공 주입 층은 플루오르화 산 중합체로 도핑된 전기 전도성 중합체를 포함한다. 재료는 예를 들어, 공개 미국 특허 출원 제US 2004/0102577호, 제US 2004/0127637호, 제US 2005/0205860호, 및 공개 PCT 출원 제WO 2009/018009호에 기재되었다.
- [0243] 층(230)을 위한 정공 수송 재료의 예는, 예를 들어, 문헌[Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, Fourth Edition, Vol. 18, p. 837-860, 1996, by Y. Wang]에 요약되어 있다. 정공 수송 분자 및 중합체 둘 모두가 사용될 수 있다. 통상적으로 사용되는 정공 수송 분자는, N,N'-다이페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-[1,1'-바이페닐]-4,4'-다이아민(TPD), 1,1-비스[(다이-4-톨릴아미노) 페닐]사이클로헥산(TAPC), N,N'-비스(4-메틸페닐)-N,N'-비스(4-에틸페닐)-[1,1'-(3,3'-다이메틸)바이페닐]-4,4'-다이아민(ETPD), 테트라키스-(3-메틸페닐)-N,N,N',N'-2,5-페닐렌다이아민(PDA), a-페닐-4-N,N-다이페닐아미노스티렌(TPS), p-(다이에틸아미노)벤즈알데하이드 다이페닐하이드라존(DEH), 트라이페닐아민(TPA), 비스[4-(N,N-다이에틸아미노)-2-메틸페닐](4-메틸페닐)메탄(MPMP), 1-페닐-3-[p-(다이에틸아미노)스티릴]-5-[p-(다이에틸아미노)페닐] 피라졸린(PPR 또는 DEASP), 1,2-트랜스-비스(9H-카바졸-9-일)사이클로부탄(DCZB), N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)-(1,1'-바이페닐)-4,4'-다이아민(TTB), N,N -비스(나프탈렌-1-일)-N,N -비스-(페닐)벤지딘 (α -NPB), 및 포르피린계 화합물, 예를 들어, 구리 프탈로시아닌이다. 통상적으로 사용되는 정공 수송 중합체는 폴리비닐카르바졸, (페닐메틸)-폴리실란, 및 폴리아닐린이다. 전술된 것과 같은 정공 수송 분자를 폴리스티렌 및 폴리카르보네이트와 같은 중합체 내로 도핑함으로써 정공 수송 중합체를 또한 얻을 수 있다. 일부 경우에는, 트리아릴아민 중합체, 특히 트리아릴아민-플루오렌 공중합체를 사용한다. 일부 경우에, 중합체 및 공중합체는 가교결합성이다. 일부 실시 형태에서, 정공 수송 층은 p-도판트를 추가로 포함한다. 일부 실시 형태에서, 정공 수송 층은 p-도판트로 도핑된다. p-도판트의 예는, 테트라플루오로테트라시아노퀴노다이메탄(F4-TCNQ: tetrafluorotetracyanoquinodimethane) 및 페릴렌-3,4,9,10-테트라카르복실릭-3,4,9,10-다이엔하이드라이드(PTCDA: perylene-3,4,9,10-tetracarboxylic-3,4,9,10-dianhydride)를 포함하나 이에 한정되지 않는다.
- [0244] 캐소드(260)는 전자 또는 음전하 캐리어를 주입하는 데 있어서 특히 효율적인 전극이다. 캐소드는 애노드보다 낮은 일 함수를 갖는 임의의 금속 또는 비금속일 수 있다. 캐소드를 위한 재료는 1족의 알칼리 금속(예를 들어, Li, Cs), 2족(알칼리 토류) 금속, 12족 금속(희토류 원소 및 란타늄 및 악티늄족 원소 포함)으로부터 선택될 수 있다. 알루미늄, 인듐, 칼슘, 바륨, 사마륨 및 마그네슘과 같은 재료와 더불어 그의 조합을 사용할 수 있다. Li- 또는 Cs-함유 유기금속 화합물, LiF, CsF, 및 Li₂O는 또한, 유기층 및 캐소드층 간에 침착되어, 작동 전압을 저하시킬 수 있다.
- [0245] 유기 전자 소자 내에 다른 층을 갖는 것이 알려져 있다. 예를 들어, 주입되는 양전하의 양을 제어하고/하거나 층의 밴드갭 매칭(band-gap matching)을 제공하거나, 보호층으로서 작용하는 층(도시되지 않음)이 애노드(210)와 정공 주입 층(220) 사이에 존재할 수 있다. 당업계에 공지된 층, 예를 들어, 구리 프탈로시아닌, 산화질화 규소, 불화탄소, 실란, 또는 Pt와 같은 금속의 초박층을 사용할 수 있다. 대안적으로, 애노드 층(210), 전기활성 층(220, 230, 240, 및 250), 또는 캐소드층(260)의 일부 또는 전부를 표면 처리하여 전하 캐리어 수송 효율을 증가시킬 수 있다. 각각의 성분 층의 재료의 선정은 바람직하게는, 방출체 층 내의 양전하 및 음전하의 균형을 맞추어 높은 전계발광 효율을 갖는 소자를 제공하도록 결정한다.
- [0246] 각각의 기능 층은 하나 초과층의 층으로 이루어질 수 있는 것으로 이해된다.
- [0247] 소자는 적합한 기판 상에 개별 층을 순차적으로 증착하는 것을 포함하는 다양한 기술에 의해 제조될 수 있다. 유리, 플라스틱 및 금속과 같은 기체가 사용될 수 있다. 열증발, 화학 증착 등과 같은 종래의 증착 기술이 사용될 수 있다. 대안적으로, 스핀 코팅, 딥 코팅, 롤-투-롤 기술, 잉크젯 인쇄, 스크린 인쇄, 그라비아 인쇄 등을 포함하나 이에 한정되지 않는 관용적인 코팅 또는 인쇄 기술을 사용하여 적합한 용매 중의 용액 또는 분산액으로부터 유기 층을 적용할 수 있다.
- [0248] 일부 실시 형태에서, 소자는 완충층 층, 정공 수송 층 및 광활성 층의 액체 침착, 및 애노드, 전자 수송 층, 전자 주입 층 및 캐소드의 증착에 의해서 제작된다.
- [0249] 고효율 LED를 달성하기 위해, 정공 수송 재료의 HOMO(최고 점유 분자 궤도함수)는 바람직하게는 애노드의 일 함수와 정렬되며, 전자 수송 재료의 LUMO(최저 비점유 분자 궤도함수)는 바람직하게는 캐소드의 일 함수와 정렬된

다. 재료들의 화학적 상용성(compatibility) 및 승화 온도 또한 전자 및 정공 수송 재료를 선택하는데 있어서 고려사항일 수 있다.

[0250] 본 명세서에 기재된 피리미딘 화합물로 제조된 소자의 효율은 소자 내의 다른 층들을 최적화함으로써 추가로 개선될 수 있는 것으로 이해된다. 예를 들어, Ca, Ba 또는 LiF와 같은 더 효율적인 캐소드가 사용될 수 있다. 작동 전압의 감소로 이어지거나 또는 양자 효율을 증가시키는 형상화된 기관 및 신규 정공 수송 재료가 또한 적용가능하다. 추가층이 또한 부가되어 다양한 층의 에너지 레벨을 맞추고 전계발광을 용이하게 할 수 있다.

[0251] 일부 실시 형태에서는, 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물이 소자의 광활성 층 내에 존재한다. 일부 실시 형태에서는, 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물이 소자의 전자 수송 층 내에 존재한다. 일부 실시 형태에서는, 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물이 소자의 광활성 층 내에 존재하고, 화학식 I 또는 화학식 II를 갖는 피리미딘 화합물이 전자 수송 층 내에 존재하며, 여기서 피리미딘 화합물은 동일하거나 상이할 수 있다.

[0252] 상기 소자 실시 형태의 임의의 조합이, 그들이 상호 배타적이지 않는 한, 존재할 수 있다.

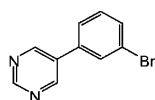
[0253] 실시예

[0254] 본 명세서에 기재된 개념을 하기 실시예에 추가로 설명할 것인데, 하기 실시예는 특허청구범위에 기재된 본 발명의 범주를 한정하지 않는다.

[0255] 합성예 1

[0256] 본 실시예는 화합물 1, 5-[3-(4,6-비스-(3-바이페닐)-2-피리미디닐)페닐]피리미딘의 합성을 예시한다.

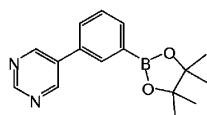
[0257] (1a) 5-(3-브로모페닐)피리미딘



[0258]

[0259] 응축기, 온도계, 및 사이드암 마개가 장착된 1000 mL 3-구 둥근 바닥 플라스크에 현탁액 3-브로모요오도벤젠 (19.80 g, 70.0 mmol), 1,2-다이메톡시에탄(315 mL) 중의 피리미딘-5-보론산(8.67 g, 70.0 mmol), 및 탈이온수 (105 mL) 중의 소듐 카르보네이트(22.26 g, 210.0 mmol)를 투입하였다. 혼합물을 30 분 동안 질소로 스파지한 후, 팔라듐 아세테이트(393 mg, 1.75 mmol) 및 트라이페닐포스핀(918 mg, 3.50 mmol)을 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 18 h 동안 환류 중에 가열하고, 이어서 UPLC에 의해 그것이 완결된 것으로 결정된 후에 실온으로 냉각시켰다. 2상 반응 혼합물을 EtOAc(3 x 150 mL)로 추출하였다. 유기 층을 합하여 물 및 염수(각각 2 x 150 mL)로 세척한 후, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과 및 농축하여 미색(off-white) 고체를 얻고, 이를 MPLC(헥산/CHCl₃)로 정제한 후, 무수 에탄올(대략 200 mL)로부터 결정화하여 목적 산물, 5-(3-브로모페닐)피리미딘(8.62 g, 63% 수율)을 수득하였다. 이 재료의 UPLC 분석은 그것이 97.8%의 순도를 갖는 것으로 나타났다.

[0260] (1b) 5-[3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보롤란-2-일)페닐]피리미딘

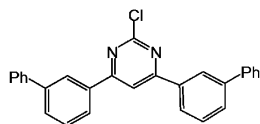


[0261]

[0262] 자석 교반 막대, 내부 온도계, 및 사이드암을 통하여 1회용 피펫을 통해 도입된 질소 라인이 장착된 250 mL 3-구 둥근 바닥 플라스크에서, 건조 1,4-다이옥산(70 mL) 중의 단계 (1a)로부터의 5-(3-브로모페닐)피리미딘(3.30 g, 14.04 mmol) 및 비스(피나콜레이트)다이보론(4.28 g, 16.25 mmol)의 용액에 포타슘 아세테이트(4.13 g, 42.1 mmol)를 첨가하였다. 교반 중인 현탁액을 15 분 동안 질소로 스파지하였다. [1,1-비스(다이페닐포스피노)페로센]팔라듐(II) 클로라이드, 다이클로로메탄을 가진 착물(1:1)(344 mg, 0.42 mmol)을 추가의 1,4-다이옥산(10 mL)과 함께 첨가하고 추가로 10 분 동안 질소 스파지를 계속하였다. 이어서, 상부에 질소 버블러를 가진 환류 응축기를 플라스크에 설치하고 나머지 사이드암을 마개로 막았다. 반응 혼합물을 환류 중에 3.5 h 동안 가열하였으며, 이 지점에서 UPLC에 의한 분취물의 분석은 산물로의 완전한 전환을 나타냈다. 조(crude) 반응 혼합물을 실리카 겔(43 g)의 패드를 통해 붓고, 이를 톨루엔(2 x 100 mL)으로 세척

하였다. 여액을 합하고 농축하여 암갈색 오일(5.0 g)을 얻었다. 50% EtOAc/헥산(2 x 100 mL)으로 실리카 겔 패드를 추가로 용출시키고, 용출액을 농축한 후에, UPLC 분석에 의한 조성이 톨루엔 용출로부터의 갈색 오일과 동일한 황색 오일(1.2 g)을 수득하였다. 2가지의 조 산물을 다이클로로메탄(총 100 mL)에 용해시켜 합하고, MPLC(EtOAc/헥산)로 정제하여 목적 산물, 5-[3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보롤란-2-일)페닐]피리미딘 (3.56 g, 90% 수율)을, 정치시에 고형화되는 연황색 오일로서 수득하였다.

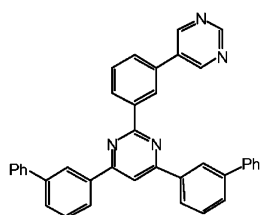
[0263] (1c) 2-클로로-4,6-비스([1,1'-바이페닐]-3-일)피리미딘



[0264]

[0265] 자석 교반 막대, 온도계, 환류 응축기, 및 질소 버블러가 장착된 1000 mL 3-구 둥근 바닥 플라스크에 2,4,6-트라이클로로피리미딘(9.17 g, 50.0 mmol), 3-바이페닐보론산(21.78 g, 110.0 mmol), 트라이페닐포스핀(656 mg, 2.50 mmol), 1,2-다이메톡시에탄(375 mL), 및 탈이온수(105 mL) 중의 소듐 카르보네이트(26.50 g, 250.0 mmol)를 투입하였다. 혼합물을 1 h 동안 질소(N₂)로 스파지하였다. 팔라듐 아세테이트(281 mg, 1.25 mmol)를 첨가하고, 추가로 30 분 동안 N₂ 스파지를 계속하고, 스파징 피펫을 제거하고, 사이드암을 마개로 막고, 혼합물을 환류 중에 21 h 동안 가열하였다. 반응물을 실온으로 냉각시키고 여과하였다. 여액을 분별 깔때기에 이전하고 2상 혼합물의 층을 분리하였다. 수성 층을 톨루엔(3 x 100 mL)으로 추출하였다. 필터를 CHCl₃(200 mL)로 세척하였다. 합한 톨루엔 추출액 및 여과한 반응 혼합물로부터의 1,2-다이메톡시에탄 층에 CHCl₃ 여액을 첨가하고, 이러한 총 유기상을 물, 10% 수성 HCl, 및 염수(각각 2 x 100 mL)로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, CHCl₃(200 mL)로 세척하면서 실리카 겔(50 g)의 패드를 통해 여과하였다. 여액을 합하고 회전식 증발기로 농축하여 포말성 베이지색 오일로서 조 산물(24 g)을 수득하였다. 다이클로로메탄/헥산으로 용출시키는 실리카 겔 MPLC로 조 산물을 정제하였다. 하기의 용출 순서로 2개의 주 분획을 단리하였다. 제1 단리 재료는 50% 다이클로로메탄/헥산에서 용출된 백색 고체(4.37 g)였으며, 삼중치환된 부산물인 2,4,6-트리스(3'-바이페닐)피리미딘과 일치하는 ¹H NMR 스펙트럼을 가지고 있었다. 제2 단리 재료는 80% 다이클로로메탄/헥산에서 용출된 백색 고체(16.0 g, 76%)였으며, 목적 산물인 2-클로로-4,6-비스(3'-바이페닐)피리미딘과 일치하는 ¹H NMR 스펙트럼을 가지고 있었다. 이 재료의 UPLC 분석은 그것이 >99%의 순도를 갖는 것으로 나타났다.

[0266] (d) 화합물 1



[0267]

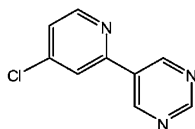
[0268] 자석 교반 중인 100 mL 2-구 둥근 바닥 플라스크에서, 1,2-다이메톡시에탄(1,2-DME; 30 mL) 중의 단계 (1b)로부터의 5-[3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보롤란-2-일)페닐]피리미딘(2.82 g, 10.0 mmol) 및 트라이페닐포스핀(131 mg, 0.5 mmol)의 용액을 단계 (1c)로부터의 2-클로로-4,6-비스([1,1'-바이페닐]-3-일)피리미딘(4.19 g, 10.0 mmol)에 첨가하였다. 추가의 1,2-DME(8 mL)를 첨가하고 질소 하에 온화한 가열(Ti = 60°C)로 혼합물을 용해시켰다. 탈이온수(15 mL) 중의 소듐 카르보네이트(3.18 g, 30.0 mmol, 300 몰%)의 용액을 첨가하고 혼합물을 25 분 동안 질소로 스파지하였다. 팔라듐(II) 아세테이트(56 mg, 0.25 mmol)를 첨가하고 질소 스파지를 10 분 동안 계속하였다. 반응 혼합물을 5 분에 걸쳐 환류에 이르게 하고 6 h 동안 가열을 계속하였다. 반응 혼합물을 냉각시키고, 톨루엔(75 mL), 물(100 mL), 및 EtOAc(100 mL)를 첨가하였다. 실리카 겔(37 g)의 2.5 cm 패드를 통해 전체 혼합물을 여과하였다. SiO₂ 패드를 EtOAc(200 mL)로 세척하고 전체 여액(수성 및 유기)을 분별 깔때기에 이전하였다. 상을 분리하였다. 수성 층을 EtOAc(25 mL)로 추출하고, 유기 상을 합하여 염수(100 mL)로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과 및 농축하여 미색 고체를 수득하였으며, 이를 ~1/1 THF/헥산(~100 mL)으로부터 결정화하여 여과에 의해 수집된 백색 세침형 클러스터를 수득하였다. THF/헥산(80 mL/50

mL)으로부터의 제2 재결정으로 목적 산물인 E2590을 백색의 섬유-유사 고체(2.34 g, 43% 수율)로서 수득하였으며, UPLC에 의한 그의 순도는 >99.7%였다. 진공 승화에 의한 후속의 정제는 소자 내의 시험을 위한 99.97%의 순도를 가진 재료를 제공하였다.

[0269] 합성예 2

[0270] 본 실시예는 화합물 28, 2-[2'-(5'-피리미딜)-4'-피리딜]-4,6-비스-(3-바이페닐)피리미딘의 합성을 예시한다.

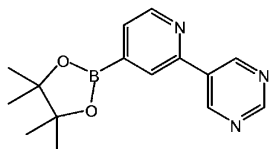
[0271] (2a) 5-(4-클로로-2-피리딜)피리미딘



[0272]

[0273] 응축기, 온도계, 및 질소 버블러가 장착된 500 mL 3-구 둥근 바닥 플라스크에 1,2-다이메톡시에탄(160 mL) 및 물(160 mL) 중의 포타슘 카르보네이트(13.8 g)의 혼합물을 투입하였다. 혼합물을 30 분 동안 N₂로 스파지하고, 2,4-다이클로로피리딘(5.92 g, 40.0 mmol), 피리미딘-5-보론산(4.96 g, 40.0 mmol), 및 테트라키스(트라이페닐 포스핀)팔라듐(1.39 g, 1.20 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 환류(T_i = 75°C)로 가열하였다. 17 h의 환류 후에 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고 에틸 아세테이트(3 × 150 mL)로 추출하였다. 유기 층을 합하여 물 및 염수(각각 2×150 mL)로 세척하고, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축하여 조 산물(7.30 g)을 수득하였고, 헥산 중의 0 내지 100% 에틸 아세테이트로 용출시키는 중압 액체 크로마토그래피(MPLC: medium pressure liquid chromatography)로 이를 정제하여, 백색 분말성 고체(5.30 g, 69% 수율)를 수득하였으며, UPLC 분석에 의해 결정할 때 그의 순도는 99.21%였다. 이 재료의 ¹H NMR 스펙트럼(CD₂Cl₂)(LIMS#: 904855)은 목적 산물의 구조를 입증하였다.

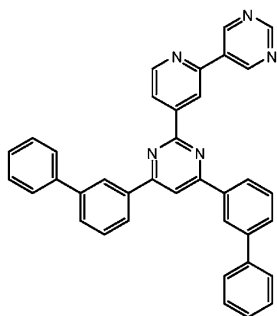
[0274] (2b) 5-[2-(4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보롤란-2-일))피리딜]피리미딘



[0275]

[0276] 응축기, 온도계, 및 질소 버블러가 장착된 25 mL 3-구 둥근 바닥 플라스크에 1,4-다이옥산(10 mL)을 투입하였다. 용매를 30 분 동안 N₂로 스파지하고, 포타슘 아세테이트(1.47 g, 15.0 mmol), 단계 (2a)로부터의 5-(4-클로로-2-피리딜)피리미딘(0.96 g, 5.00 mmol), 비스(피나콜레이트)다이보론(1.52 g, 6.00 mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0)(0.09 g, 0.10 mmol), 및 2-다이사이클로헥실포스포노-2',4',6'-트라이아이소프로필-1,1'-바이페닐(0.19 g, 0.40 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 환류(T_i = 75°C)로 가열하였다. 반응물을 실온으로 냉각시키고, 여과하여 에틸 아세테이트(100 mL)로 세척하였다. 용출액을 농축하여 진한 갈색 고체(1.92 g, 조)를 얻었으며, 추가의 정제 없이 이를 다음 반응 단계에 직접 사용하였다.

[0277] (2c) 화합물 28



[0278]

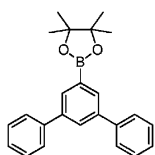
[0279] 응축기, 온도계, 및 질소 버블러가 장착된 250 mL 3-구 둥근 바닥 플라스크에 톨루엔(130 mL) 및 수성 소듐 카

트보네이트(65 mL, 2.0 M)의 혼합물을 투입하였다. 혼합물을 30 분 동안 N_2 로 스파지한 후, 단계 (1c)로부터의 2-클로로-4,6-비스([1,1'-바이페닐]-3-일)피리미딘(4.19 g, 10.0 mmol), 단계 (2b)로부터의 조 5-[2-(4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보롤란-2-일))피리디]피리미딘(6.80 g, 24.0 mmol), 4차 암모늄 화합물(0.81 g, 2.00 mmol), 및 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(0.58 g, 0.5 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 환류($T_i = 85^\circ C$)로 가열하였다. 18 h의 환류 후에 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고 여과하였다. 에틸 아세테이트(150 mL)로 세척한 후에 침전을 폐기하였다. 여액을 에틸 아세테이트(3×100 mL)로 추출하고, 유기 상을 합하여 염수(2×150 mL)로 세척하고, $MgSO_4$ 상에서 건조시켜, 여과 및 농축하였다. 조 산물(4.0 g)을 헥산 중의 0 내지 100% 에틸 아세테이트로 용출시키는 실리카 겔 중압 액체 크로마토그래피(MPLC)로 정제하였다. MPLC로 정제한 산물을 톨루엔/헥산(1/5)(120 mL)으로부터 결정화하였다. 이어서, 용액을 실온으로 냉각시키고 밤새 정치시켰다. 이어서, 결정화된 산물을 여과를 통해 수집하고, 헥산 및 메탄올(각각 40 mL)로 세척하고, 고진공 하에 건조시켜, 목적 산물인 E2643을 백색 분말성 고체(1.50 g, 28% 수율)로서 수득하였으며, UPLC 분석(BEH C18 1.7 μm , 2.1×50 mm; 20:80 ACN:포르메이트)에 의해 결정할 때 그의 순도는 99.75%였다. 진공 승화에 의한 후속의 정제는 소자 내의 시험을 위한 99.81%의 순도를 가진 재료를 제공하였다.

[0280] 합성예 3

[0281] 본 실시예는 화합물 33, 4,6-다이([1,1':3',1''-터페닐]-5'-일)-2-(3-(피리미딘-5-일)페닐)피리미딘의 합성을 예시한다.

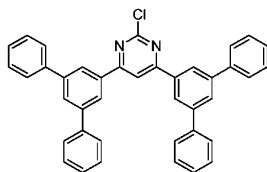
[0282] (3a) 4,4,5,5-테트라메틸-2-[1,1':3',1''-터페닐]-5'-일-1,3,2-다이옥사보롤란



[0283]

[0284] 자석 교반기 및 질소 라인에 부착된 응축기가 장착된 1 L RB 플라스크에 3,5-다이페닐페닐 트라이플루오로메탄 설포네이트(18.92 g, 50.0 mmol), 4,4,4',4'',5,5,5',5''-옥타메틸-2,2'-바이(1,3,2-다이옥사보롤란)(29.20, 115.0 mmol), 포타슘 아세테이트(39.5 g, 300.0 mmol), 및 건조 다이옥산(350 mL)을 첨가하였다. 15분 동안 시스템을 질소로 퍼지하는 중에 혼합물을 질소로 버블링하였다. 이어서, $Pd(dppf)_2Cl_2$ (2.45 g, 3.0 mmol)를 첨가하고, 추가로 15 분 동안 질소 퍼징을 계속한 후에, 질소 하에 $80^\circ C$ (오일조)에서 혼합물을 밤새 교반 및 가열하였다. 원래의 밝은 갈색이 10 분의 반응 이내에 어둡게 변했다. 주위 온도로 냉각시킨 후에, 물(200 mL)을 첨가하고, 혼합물을 30 분 동안 교반하고, 이어서 주위 온도에서 3 시간 동안 정치시켰다. 유기 층을 분리하고, 수성 상을 톨루엔(2×150 mL)으로 추출하였다. 유기 추출액을 합하고, 물, 수성 10% HCl, 및 염수(각각 150 mL)로 세척하고, $MgSO_4$ (20 g) 상에서 건조시켰다. 여과 후에, 회전 증발에 의해 용매를 제거하였다. 밝은 오렌지색 고체 재료를 다이클로로메탄/헥산(1/1, 150 mL)에 용해시키고, 용액을 짧은 실리카 겔 컬럼에 통과시키고, 다이클로로메탄/헥산 구배(1/1, 2/1, 및 1/0)로 용출시켰다. 산물 함유 분획을 수집하고, 회전 증발에 의해 용매를 제거하였다. 잔류물을 다이클로로메탄/ CH_3CN 으로부터 결정화하여 백색 결정질 재료로서의 산물(13.6 g, 76.4% 수율)을 HPLC 분석에 의한 95%의 순도로 수득하였다.

[0285] (3b) 4,6-다이([1,1':3',1''-터페닐]-5'-일)-2-클로로피리미딘

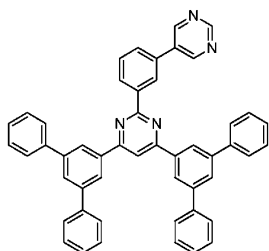


[0286]

[0287] 자석 교반 막대, 온도계, 환류 응축기, 및 질소 버블러가 장착된 250 mL 3-구 둥근 바닥 플라스크에 2,4,6-트라이클로로피리미딘(2.20 g, 12.0 mmol), 단계 (3a)로부터의 4,4,5,5-테트라메틸-2-[1,1':3',1''-터페닐]-5'-일-1,3,2-다이옥사보롤란(8.56 g, 24.0 mmol), 트라이페닐포스핀(157 mg, 0.60 mmol), 1,2-다이메톡시에탄(80 mL), 및 소듐 카르보네이트(2 M, 24 mL, 48.0 mmol)를 투입하였다. 교반 중에, 시스템을 질소로 20 분 동안 퍼

지하였다(N_2 가 응축기의 상부로부터 유입되어 사이드암을 통해 용액 내로 버블링됨). 팔라듐 아세테이트(67 mg, 0.3 mmol)를 첨가하고 추가로 15 분 동안 시스템을 퍼지하였다. 이어서, 반응 혼합물을 18시간 동안 질소 하에 80℃(가열 블록)에서 교반 및 환류시켰다. 그 시간 동안 일부 고체가 형성되었다. 주위 온도로 냉각시킨 후에, 추가의 고체가 형성되었다. 고체를 여과하고 물로 세척하였다. 조 산물을 다이클로로메탄(200 mL)에 용해시키고, 용액을 물, 염수로 세척하고, 마그네슘 설페이트 상에서 건조시켰다. 이어서, 용액을 짧은 알루미나(염기성) 컬럼에 통과시키고 다이클로로메탄으로 용출시켰다. 산물 함유 분획(UV 램프 하에서 청색 형광을 나타냄)을 수집하였다. 회전 증발에 의해 용매를 제거하고 잔류물을 다이클로로메탄/아세토니트릴로부터 결정화하여 백색 섬유질 재료로서의 산물(4.3 g, 63%)을 UPLC에 의한 97% 순도로 수득하였다.

[0288] (3c) 화합물 33



자석 교반 중인 250 mL 2-구 둥근 바닥 플라스크에서, 1,2-다이메톡시에탄(1,2-DME; 180 mL) 중의 단계 (1b)로부터의 5-(3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보롤란-2-일)페닐)피리미딘(1.69 g, 6.0 mmol) 및 트라이페닐 포스핀(79 mg, 0.3 mmol)의 용액을 단계 (3b)로부터의 4,6-다이([1,1':3',1''-터페닐]-5'-일)-2-클로로피리미딘(97%, 3.53 g, 6.0 mmol)에 첨가하였다. 시스템을 질소로 20 분 동안 퍼지한 후, 팔라듐 아세테이트(34 mg, 0.15 mmol)를 첨가하였다. 반응을 18 시간 동안 질소 하에 105℃(가열 블록)에서 교반 및 환류시켰다. 그 시간 동안, 반응물은 불균질하게 남아 있었다. 주위 온도로 냉각시킨 후에 고체 재료를 여과하고 물로 세척하였다. 조 산물을 다이클로로메탄(200 mL)에 용해시키고, 물(100 mL)로 세척하고, 마그네슘 설페이트 상에서 건조시켰다. 용액을 짧은 알루미나(염기성) 컬럼(5x10 cm)에 통과시키고, 먼저 다이클로로메탄으로 용출시킨 후에 다이클로로메탄/iPrOH(3/1)로 용출시켰으며, 분획은 TLC(다이클로로메탄/iPrOH 9/1)로 모니터하였다. 산물 함유 분획을 수집하고 회전 증발에 의해 용매를 제거하였다. 잔류물을 THF/아세토니트릴로부터 결정화하여 백색 섬유-유사 고체로서의 산물을 수득하였다(UPLC 분석에 의한 99.50% 순도로 0.2 g 및 99.70% 순도로 2.8 g). 진공 승화에 의한 후속의 정제는 소자 내의 시험을 위한 99.59%의 순도를 가진 재료를 제공하였다.

[0291] 소자 실시예

[0292] (a) 재료

[0293] HIJ-1은 전기 전도성 중합체 및 중합체성 플루오르화 설폰산의 수성 분산액으로부터 침착된 정공 주입 재료이다. 이러한 재료는, 예를 들어, 공개 미국 특허 출원 제US 2004/0102577호, 제US 2004/0127637호, 및 제US 2005/0205860호, 및 공개 PCT 출원 제WO 2009/018009호에 기재되어 있다.

[0294] HT-1은 트리아릴아민 중합체인 정공 수송 재료이다. 이러한 재료는, 예를 들어, 국제 특허 공개 WO 2009/067419호에 기재되어 있다.

[0295] H1은 중수소화 다이아릴안트라센 호스트이다. 이러한 재료의 비-중수소화된 유사체는 예를 들어, 미국 특허 출원 공개 제2007-0088185호에 청색 호스트 재료로서 이미 개시되어 있다.

[0296] E1은 비스(다이아릴아미노)크라이센 도판트이다. 이러한 재료는 공개 PCT 출원 제W02010035364호에 기재되어 있다.

[0297] ZrQ4는 테트라키스 (8-하이드록시퀴놀린)지르코늄이다.

[0298] (b) 소자 제작

[0299] 용액 가공 및 열증발 기술의 조합에 의해서 OLED 소자를 제작하였다. 썬 필름 디바이시즈, 인코포레이티드(Thin Film Devices, Inc)로부터의 패터화된 인듐 주석 산화물(ITO) 코팅 유리 기재를 사용하였다. 이들 ITO 기재는 시트 저항이 30옴/스퀘어(ohm/square)이고 광투과율이 80%인 ITO로 코팅된 코닝(Corning) 1737 유리를 기반으로 한다. 패터화된 ITO 기재를 수성 세제 용액 내에서 초음파로 세정하였고 증류수로 행구었다. 그 후, 패터화된

ITO를 아세톤 중에서 초음파로 세정하고, 아이소프로판올로 헹구어 질소 스트림에서 건조시켰다.

소자 제작 직전에, 세정되고 패턴화된 ITO 기재를 UV 오존으로 10분 동안 처리하였다. 냉각 직후에, HIJ-1의 수성 분산액을 ITO 표면 위에 스핀 코팅하고 가열하여 용매를 제거하였다. 냉각 후, 이어서 기재를 HT-1의 톨루엔 용액으로 스핀 코팅한 후, 가열하여 용매를 제거하였다. 냉각 후에 기재를 호스트(들) 및 도판트의 메틸 벤조에이트 용액으로 스핀 코팅하고, 가열하여 용매를 제거하였다. 기재를 마스크하고, 진공 챔버에 넣었다. 전자 수송층을 열증발에 의해 침착시키고, 이어서 CsF 층으로 침착시켰다. 이어서, 진공 상태에서 마스크를 바꾸고 열증발에 의해 Al의 층을 침착시켰다. 챔버를 배기시키고, 유리 덮개, 건조제, 및 UV 경화성 에폭시를 사용하여 소자를 캡슐화하였다.

(c) 소자 특성화

OLED 샘플을 그의 (1) 전류-전압 (I-V) 곡선, (2) 전계발광 방사휘도(electroluminescence radiance) 대(vs) 전압, 및 (3) 전계발광 스펙트럼 대 전압을 측정함으로써 특성화하였다. 3 가지 측정 모두를 동시에 수행하고 컴퓨터로 제어하였다. 소정 전압에서의 소자의 전류 효율(current efficiency)은, 소자를 작동시키는 데 필요한 전류 밀도(current density)로 LED의 전계발광 방사휘도를 나눔으로써 결정한다. 단위는 cd/A이다. 미놀타 (Minolta) CS-100 미터 또는 포토리서치(Photoresearch) PR-705 미터를 사용하여 색상 좌표를 결정하였다.

소자 실시예 1 및 비교예 A

본 실시예는 본 명세서에 기재된 피리미딘 화합물이 전자 수송 층으로서 존재하는 소자의 성능을 예시한다.

실시예 1에서, 전자 수송 층은 화합물 1이었다.

비교예 A에서, 전자 수송 층은 ZrQ4였다.

소자 층은 하기의 두께를 가지고 있었다:

애노드 = ITO = 50 nm

정공 주입 층 = HIJ-1 = 50 nm

정공 수송 층 = HT-1 = 20 nm

광활성 층 = H1:E1(13:1 중량비) = 40 nm

전자 수송 층(상기 논의됨) = 10 nm

전자 주입 층/캐소드 = CsF/Al = 1 nm/100 nm

결과를 표 1에 제공한다.

표 1

소자 결과

실시예	CIE (x,y)	전압 (V)	C.E. (cd/A)	E.Q.E. (%)	P.E. (lm/W)	예상 수명(Projected Lifetime) T70
비교예 A	0.135, 0.132	4.9	6.1	5.7	4.0	12031
실시예 1	0.135, 0.132	4.2	7.1	6.6	5.3	14464

모든 데이터는 1000 니트에서의 데이터이며, CE = 전류 효율이고; CIEx 및 CIEy는 C.I.E. 색도 스케일(Commission Internationale de L'Eclairage, 1931)에 따른 x 및 y 색상 좌표이다. 예상 T70은, 1.7의 가속 인자를 사용하여 계산한, 1000 니트에서 소자가 초기 휘도의 70%에 도달하는 시간 단위의 시간이다.

화합물 1을 가진 소자는 ZrQ4를 가진 소자에 대해 균등하거나 우월함 성능을 가짐을 알 수 있다.

소자 실시예 2 및 3

소자 실시예 2에서는, 소자 실시예 1을 반복하였다.

- [0319] 소자 실시예 3에서는, 전자 수송 재료가 화합물 33인 점을 제외하고는, 소자 실시예 1을 반복하였다.
- [0320] 결과를 하기 표 2에 제공한다.

표 2

소자 결과

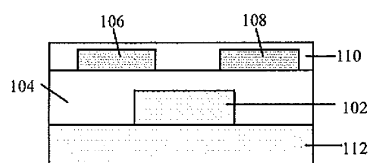
실시예	CIE (x,y)	전압 (V)	C.E. (cd/A)	E.Q.E. (%)	P.E. (lm/W)	예상 수명 T70
실시예 2	0.137, 0.127	4.6	5.7	5.5	3.9	15905
실시예 3	0.136, 0.128	5.4	5.2	4.9	3.0	19932

모든 데이터는 1000 니트에서의 데이터이며, CE = 전류 효율이고; CIE_x 및 CIE_y는 C.I.E. 색도 스케일(Commission Internationale de L'Eclairage, 1931)에 따른 x 및 y 색상 좌표이다. 예상 T70은, 1.7의 가속 인자를 사용하여 계산한, 1000 니트에서 소자가 초기 휘도의 70%에 도달하는 시간 단위의 시간이다.

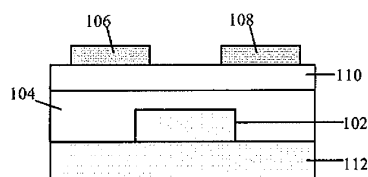
- [0321]
- [0322] 전반적인 설명 또는 실시예에서 전술된 모든 작용이 요구되지는 않으며, 특정 작용의 일부가 요구되지 않을 수 있고, 설명된 것에 더하여 하나 이상의 추가의 작용이 수행될 수 있음을 알아야 한다. 또한, 작용들이 나열된 순서는 반드시 그들이 수행되는 순서는 아니다.
- [0323] 상기 명세서에서, 개념들이 특정 실시 형태를 참조하여 설명되었다. 그러나, 당업자는 이하의 특허청구범위에서 설명되는 바와 같은 본 발명의 범주로부터 벗어남이 없이 다양한 변형 및 변경이 이루어질 수 있음을 이해한다. 따라서, 명세서 및 도면은 제한적이라기보다 예시적인 의미로 간주되어야 하며, 그러한 모든 변형은 본 발명의 범주 내에 포함시키고자 한다.
- [0324] 이득, 다른 이점, 및 문제에 대한 해결책이 특정 실시 형태에 관해 전술되었다. 그러나, 이득, 이점, 문제에 대한 해결책, 그리고 임의의 이득, 이점, 또는 해결책을 발생시키거나 더 명확해지게 할 수 있는 임의의 특징부(들)는 임의의 또는 모든 특허청구범위의 매우 중요하거나, 요구되거나, 필수적인 특징부로서 해석되어서는 안 된다.
- [0325] 소정 특징부가 명확함을 위해 별개의 실시 형태들과 관련하여 본 명세서에서 설명되고, 단일 실시 형태와 조합하여 또한 제공될 수 있다는 것을 이해하여야 한다. 역으로, 간략함을 위해 단일 실시 형태와 관련하여 설명된 여러 특징부들은 별개로 또는 임의의 하위 조합으로 또한 제공될 수 있다. 아울러, 범위로 기재된 값의 참조는 그 범위 내의 각각의 모든 값을 포함한다.

도면

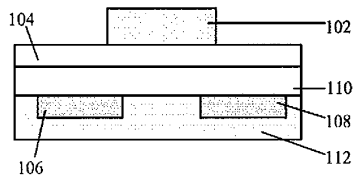
도면1a



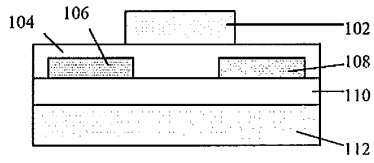
도면1b



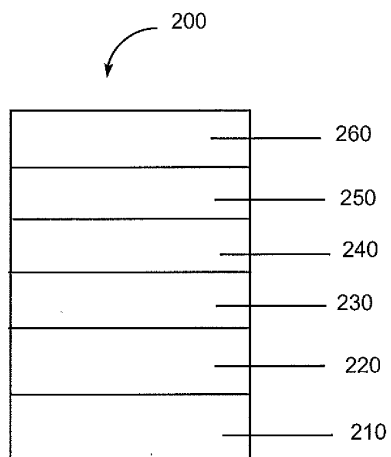
도면1c



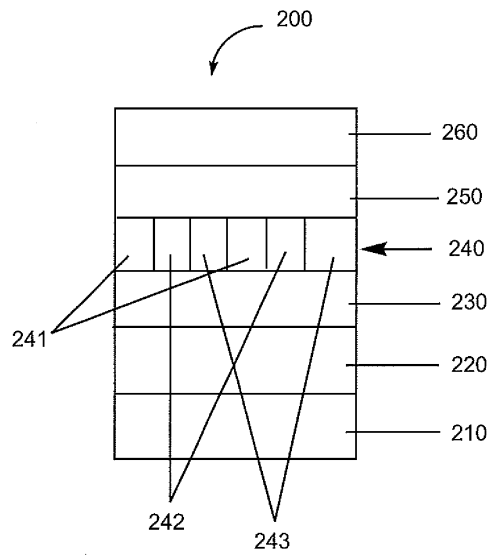
도면1d



도면2



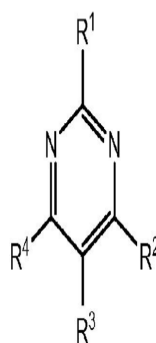
도면3



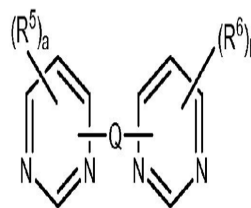
专利名称(译)	标题：包含嘧啶化合物的电子器件		
公开(公告)号	KR1020130130789A	公开(公告)日	2013-12-02
申请号	KR1020137019094	申请日	2011-12-20
[标]申请(专利权)人(译)	纳幕尔杜邦公司		
申请(专利权)人(译)	杜邦德四个孩子在一起，你和公司		
当前申请(专利权)人(译)	杜邦德四个孩子在一起，你和公司		
[标]发明人	FENNIMORE ADAM 페니모어아담 HOWARD MICHAEL HENRY JR 하워드마이클헨리주니어		
发明人	페니모어,아담 하워드,마이클,헨리,주니어		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07D403/10		
CPC分类号	C07D239/26 H01L51/0067 C07D401/14 C07D401/10 H01L51/0541 H01L2924/1307 C09K11/06		
代理人(译)	Yangyoungjun Yangyoungwhan 金荣		
优先权	61/425556 2010-12-21 US		
其他公开文献	KR101802008B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供具有式(I)或(II)的嘧啶化合物：其中：(其中，R至R相同或不同，为H，D，烷基，甲硅烷基，烷氧基，氰基或芳基，4 1 4 1 4 至少一个芳基含有N，O，S-杂环，但R至R中的两个是N-1 4 其中当包含咪唑基时，R 1至R 2中的两个不是芳基；(其中，Q为单键或烃芳基；R和R各自相同或不同，为H，D，烷基，甲硅烷基，烷氧基，氰基或芳基，6 5 6 至少一个R和至少一个R是芳基，并且至少一个芳基包括N，O，S-杂环。(a)主体，其为具有式I或式II的嘧啶化合物，和(b)具有380至750nm的最大发射的电致发光掺杂剂。还提供了包含至少一个包含式(I)或(II)化合物的层的电子器件。上市 绝缘层；栅电极；源电极；漏电极；和包含有机半导体层的薄膜晶体管，所述有机半导体层包含具有式(I)或(II)的嘧啶化合物；在此，栅电极和半导体层均是在与所述绝缘层接触，以及源电极和漏电极均与半导体层接触，该电极不相互接触，绝缘层，栅电极，半导体层，源电极，并且漏电极可以以任何顺序布置。还提供了一种电子器件，其包括位于两个电接触层之间的至少一个电活性层，其中所述器件的至少一个电活性层包含具有式I或式II的嘧啶化合物。包括阳极，空穴注入层，光活性层，电子传输层和阴极的有机电子器件，还提供，并且其中的一个或多个光活性层和所述电子传输层包括具有式I的化合物或式II。前面的一般性描述和以下的详细描述仅是示例性和说明性的，并不是对由所附权利要求限定的本发明的限制。



화합물 I



화합물 II