



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년06월05일

(11) 등록번호 10-1986469

(24) 등록일자 2019년05월30일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*H01L 51/00* (2006.01) *C07F 15/00* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)
- (52) CPC특허분류  
*H01L 51/0085* (2013.01)  
*C07F 15/0033* (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2018-7006336(분할)
- (22) 출원일자(국제) 2010년10월28일  
 심사청구일자 2018년04월04일
- (85) 번역문제출일자 2018년03월05일
- (65) 공개번호 10-2018-0026583
- (43) 공개일자 2018년03월12일
- (62) 원출원 특허 10-2012-7012849  
 원출원일자(국제) 2010년10월28일  
 심사청구일자 2015년10월28일
- (86) 국제출원번호 PCT/EP2010/066400
- (87) 국제공개번호 WO 2011/051404  
 국제공개일자 2011년05월05일
- (30) 우선권주장  
 61/255,499 2009년10월28일 미국(US)
- (56) 선행기술조사문헌  
 JP2009057505 A\*  
 KR1020080007570 A\*  
 KR1020090104044 A\*  
 WO2009008100 A1\*  
 \*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

- (73) 특허권자  
 유디씨 아일랜드 리미티드  
 아일랜드 더블린 15 발리쿨린 블랜차타운 코퍼  
 레이트 파크 2  
 오엘이디웍스 게엠베하  
 독일 52068 아헨 필립스스트라세 8
- (72) 발명자  
 후스 에블린  
 독일 68199 만하임 탄회저링 75  
 랑거 니콜  
 독일 64646 헤펜하임 레벤슈트라세 20  
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인  
 김진희, 김태홍

전체 청구항 수 : 총 15 항

심사관 : 김효욱

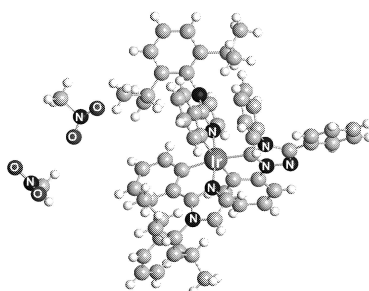
(54) 발명의 명칭 이중 리간드 카르벤 착체 및 유기 전자장치에서의 이의 용도

### (57) 요약

본 발명은 카르벤 결합을 통해 중심 금속 원자에 결합된 페닐이미다졸 또는 페닐트리아졸 단위, 및 질소-금속 결합을 통해 중심 원자에 결합된 페닐이미다졸 리간드를 포함하는 이중 리간드 착체, 그러한 이중 리간드 착체를 포함하는 OLED; 하나 이상의 그러한 이중 리간드 착체를 포함하는 발광층; 그러한 OLED를 포함하는, 조명 소자,

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



정지형 시각 표시 장치 및 이동형 시각 표시 장치로 이루어진 군으로부터 선택되는 장치; 및 그러한 이중 리간드 착체의 OLED 내, 예를 들어 에미터, 매트릭스 물질, 전하 수송 물질 및/또는 전하 차단제로서의 용도에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

**C07F 15/0086** (2013.01)

**H01L 51/0072** (2013.01)

**H01L 51/009** (2013.01)

**H01L 51/0094** (2013.01)

**H01L 51/5012** (2013.01)

**H01L 51/5048** (2013.01)

(72) 발명자

**몰트 올리버**

독일 69469 바인하임 빈터가쎄 46

**도르만 코리나**

독일 67098 바트 뒤르크하임 포르투기저 슈트라쎄 21

**게스너 토마스**

독일 69120 하이델베르크 군돌프슈트라쎄 1

**웬나르츠 크리스티안**

독일 67105 쉬퍼슈타트 한스-푸르만-슈트라쎄 24

**와타나베 소이치**

독일 68165 만하임 베르더슈트라쎄 17

**쉴드크네흐트 크리스티안**

독일 68307 만하임 잔드호퍼 슈트라쎄 283아

**바겐블라스트 게르하르트**

독일 67157 바헨하임 암 유테나커 8

**쑤 지안창**

중국 200240 상하이 창위안 루 880 농 넘버 77 룸 502

**윈스터 인고**

독일 67459 빌-잉겔하임 암 뢰텔파트 10

**슈미트 귄터**

독일 91334 험호펜 랑거 슈트라쎄 13

**비르너 헤르버트 프리드리히**

독일 52076 아헨 마르백 7

**반 엘스버겐 볼커**

독일 52080 아헨 외프 데르 월트 94베

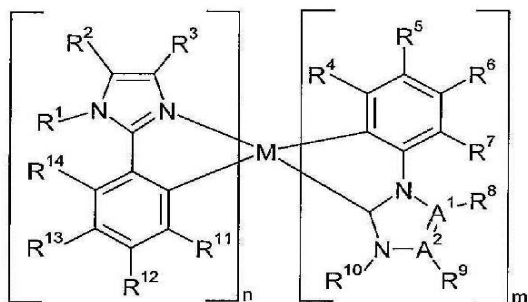
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

하기 화학식 (I)의 이중 리간드 착체:

[화학식 I]



[식 중, M, A<sup>1</sup>, A<sup>2</sup>, n, m, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup>, R<sup>10</sup>, R<sup>11</sup>, R<sup>12</sup>, R<sup>13</sup> 및 R<sup>14</sup>는 각각 하기와 같이 정의된다:

M은 Ir이고,

A<sup>1</sup> 및 A<sup>2</sup>는 C이고,

n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2이며, 여기서 n과 m의 합은 3이며,

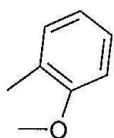
R<sup>1</sup>은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이며,

R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이며,

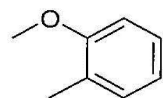
R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup> 및 R<sup>7</sup>은 각각 수소이거나,

R<sup>4</sup>와 R<sup>5</sup> 또는 R<sup>5</sup>와 R<sup>6</sup> 또는 R<sup>6</sup>과 R<sup>7</sup>은 함께, 하기 화학식 (IIa) 또는 (IIb)의 고리를 형성하며:

[화학식 IIa]



[화학식 IIb]



R<sup>8</sup> 및 R<sup>9</sup>는 각각 수소이며,

$R^{10}$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 또는 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼이고,

$R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소; 또는 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이고,

$R^1$ 과  $R^{14}$ 는 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 또는 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 또는 탄소 원자와 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성하거나,

$R^7$ 과  $R^8$ 은 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 또는 1개 내지 30개의 탄소 원자와 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 또는 탄소 원자와 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성한다].

## 청구항 2

제1항에 있어서,  $R^1$ 은 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지고, 각각의 경우 1개 내지 10개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼로 오르토, 오르토' 위치에서 치환된 아릴 라디칼인 이중 리간드 착체.

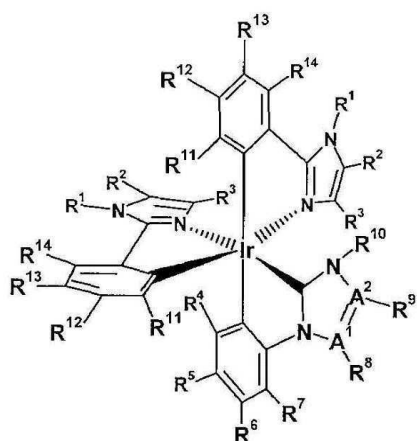
## 청구항 3

제1항에 있어서,  $R^1$ 과  $R^{14}$ 는 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 또는 1개 내지 30개의 탄소 원자와 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 또는 탄소 원자와 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성하는 것인 이중 리간드 착체.

## 청구항 4

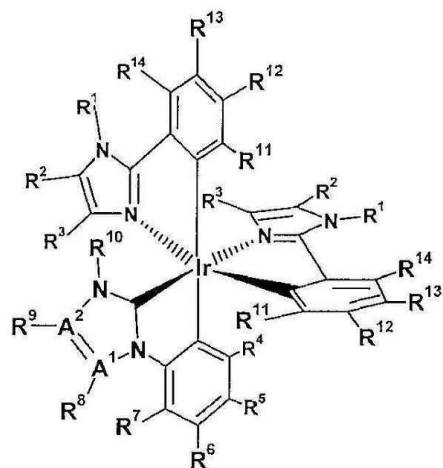
제1항에 있어서, 하기 배열 IIIa, IIIb, IVa 또는 IVb 중 하나를 가지는, M,  $A^1$ ,  $A^2$ , n, m,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 의 기재된 정의를 가지는 것인 이중 리간드 착체:

[화학식 IIIa]

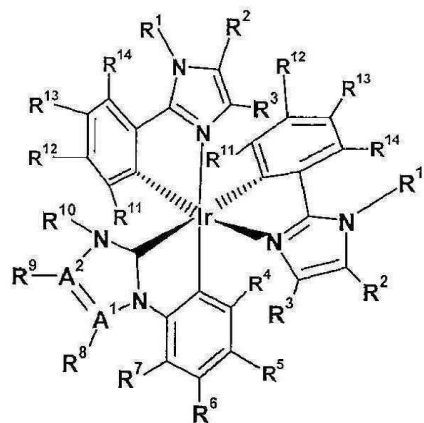




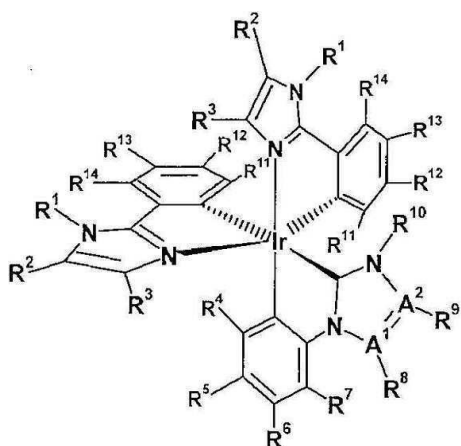
[화학식 IIIb]



[화학식 IVa]



[화학식 IVb]



## 청구항 5

금속 M, 및 화학식 (I)의 착체에서 비카르벤 결합을 통해 M에 부착된 1개 이상의 리간드를 포함하는 1종 이상의 전구체 화합물을, 화학식 (I)의 착체에서 1개 이상의 카르벤 결합을 통해 M에 부착된 1개 이상의 리간드, 또는 이의 리간드 전구체와 접촉시키거나,

금속 M, 및 화학식 (I)의 착체에서 1개 이상의 카르벤 결합을 통해 M에 부착된 리간드를 포함하는 1종 이상의 전구체 화합물을, 화학식 (I)의 착체에서 비카르벤 결합을 통해 M에 부착된 1개 이상의 리간드와 접촉시킴으로

써,

제1항에 따른 이중 리간드 착체를 제조하는 방법.

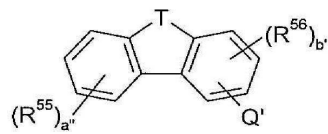
## 청구항 6

제1항에 따른 1종 이상의 이중 리간드 착체를 포함하는 OLED.

## 청구항 7

제1항에 따른 이중 리간드 착체와, 1종 이상의 하기 화학식 (X)의 화합물 또는 화학식 (X)의 2개의 단위가 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재된 선형 또는 분지형, 포화 또는 불포화 브릿지; 결합; 또는 0에 의해, 브릿지된 1종 이상의 화합물을 포함하는 OLED:

[화학식 X]



[식 중,

T는  $\text{NR}^{57}$ , S, O 또는  $\text{PR}^{57}$  이고;

$\text{R}^{57}$  은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며;

$\text{Q}'$  은  $-\text{NR}^{58, 59}$ ,  $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{60, 61}$ ,  $-\text{PR}^{62, 63}$ ,  $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{64}$ ,  $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{65}$ ,  $-\text{SR}^{66}$  또는  $-\text{OR}^{67}$  이고;

$\text{R}^{55}$  및  $\text{R}^{56}$  은 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴,  $\text{SiR}^{70, 71, 72}$ ,  $\text{Q}'$  기, 또는 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기이고;

$a''$ 는 0, 1, 2, 3 또는 4이며;

$b'$ 는 0, 1, 2 또는 3이고;

$\text{R}^{58}$  과  $\text{R}^{59}$ 는, 질소 원자와 함께, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지는 환식 라디칼을 형성하고, 환식 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있거나, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지는 1개 이상의 추가의 환식 라디칼에 축합될 수 있으며, 여기서 축합 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며;

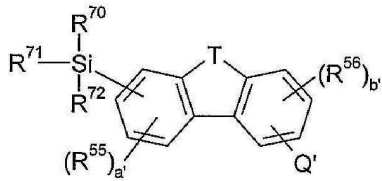
$\text{R}^{70}$ ,  $\text{R}^{71}$ ,  $\text{R}^{72}$ ,  $\text{R}^{60}$ ,  $\text{R}^{61}$ ,  $\text{R}^{62}$ ,  $\text{R}^{63}$ ,  $\text{R}^{64}$ ,  $\text{R}^{65}$ ,  $\text{R}^{66}$  및  $\text{R}^{67}$ 은 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이다].

## 청구항 8

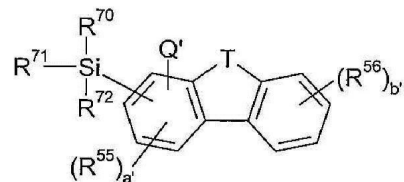
제7항에 있어서, 1종 이상의 하기 화학식 (XI) 또는 (XI\*)의 화합물 또는

화학식 (XI)와 (XI\*), (XI)와 (XI), 또는 (XI\*)와 (XI\*)의 2개의 단위가, 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재된 선형 또는 분지형, 포화 또는 불포화 브릿지; 또는 0에 의해 브릿지되고, 여기서 상기 브릿지는 화학식 (XI), (XI\*) 또는 (XI)와 (XI\*)에서 각각의 경우  $\text{R}^{71}$  대신에 Si 원자에 결합된, 1종 이상의 화합물을 포함하는 OLED:

[화학식 XI]



[화학식 XI\*]



[식 중,

T는  $\text{NR}^{57}$ , S, O 또는  $\text{PR}^{57}$  이고;

$\text{R}^{57}$ 은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며;

$\text{Q}'$ 은  $-\text{NR}^{58, 59}$ ,  $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{60, 61}$ ,  $-\text{PR}^{62, 63}$ ,  $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{64}$ ,  $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{65}$ ,  $-\text{SR}^{66}$  또는  $-\text{OR}^{67}$  이며;

$\text{R}^{70}$ ,  $\text{R}^{71}$  및  $\text{R}^{72}$ 는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이고, 여기서  $\text{R}^{70}$ ,  $\text{R}^{71}$  및  $\text{R}^{72}$  라디칼 중 1개 이상은 2개 이상의 탄소 원자 또는  $\text{OR}^{73}$ 를 포함하고,

$\text{R}^{55}$  및  $\text{R}^{56}$ 은 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, Q 기, 또는 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기이고;

$a'$  및  $b'$ 는 화학식 (XI)의 화합물의 경우는 각각 독립적으로 0, 1, 2 또는 3이고; 화학식 (XI\*)의 화합물의 경우는,  $a'$ 는 0, 1, 또는 2이고,  $b'$ 는 0, 1, 2, 3 또는 4이며;

$\text{R}^{58}$ 과  $\text{R}^{59}$ 는, 질소 원자와 함께, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지는 환식 라디칼을 형성하고, 환식 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있거나, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지는 1개 이상의 추가의 환식 라디칼에 축합될 수 있으며, 여기서 축합 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며;

$\text{R}^{73}$ 은 독립적으로  $\text{OR}^{77}$  기로 임의로 치환된,  $\text{SiR}^{74, 75, 76}$ , 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이고,

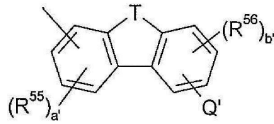
$\text{R}^{77}$ 은 독립적으로  $\text{SiR}^{74, 75, 76}$ , 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며,

$\text{R}^{60}$ ,  $\text{R}^{61}$ ,  $\text{R}^{62}$ ,  $\text{R}^{63}$ ,  $\text{R}^{64}$ ,  $\text{R}^{65}$ ,  $\text{R}^{66}$ ,  $\text{R}^{67}$ ,  $\text{R}^{74}$ ,  $\text{R}^{75}$  및  $\text{R}^{76}$ 은 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이다].

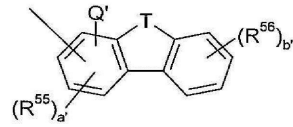
## 청구항 9

제8항에 있어서, 화학식 (XI) 또는 (XI\*)의 화합물에서,  $\text{R}^{70}$ ,  $\text{R}^{71}$  및  $\text{R}^{72}$  중 1 이상은 하기 화학식 (XIi) 또는 (XIi\*)의 방향족 단위인 OLED:

[화학식 XIi]



[화학식 XIi\*]



[식 중,  $R^{55}$ ,  $R^{56}$ ,  $Q'$ ,  $T$ ,  $a'$  및  $b'$ 는 제8항에서와 동일한 의미를 가짐].

#### 청구항 10

제1항에 따른 1종 이상의 이중 리간드 착체를 포함하는 발광층.

#### 청구항 11

제10항에 따른 발광층을 포함하는 OLED.

#### 청구항 12

제6항에 있어서, 2종 이상의 상이한 물질을 포함하고, 이중 1종 이상의 물질이 전자 전도성이어야 하는 전자 수송층을 포함하는 OLED.

#### 청구항 13

제12항에 있어서, 전자 수송층은 1종 이상의 페난트롤린 유도체를 포함하는 것인 OLED.

#### 청구항 14

제13항에 있어서, 전자 수송층은 1종 이상의 페난트롤린 유도체 및 1종 이상의 알칼리 금속 히드록시퀴놀레이트 착체를 포함하는 것인 OLED.

#### 청구항 15

제1항에 따른 1종 이상의 이중 리간드 착체 또는 이를 포함하는 발광층을 포함하는 하나 이상의 OLED를 포함하는, 조명 소자, 정지형 시각 표시 장치 및 이동형 시각 표시 장치로 이루어진 군으로부터 선택되는 장치.

#### 청구항 16

삭제

#### 청구항 17

삭제

### 발명의 설명

### 기술 분야

[0001]

본 발명은 카르벤 결합을 통해 중심 금속 원자에 결합된 페닐이미다졸 또는 페닐트리아졸 단위 및 질소-금속 결합을 통해 중심 원자에 부착된 페닐이미다졸 리간드를 포함하는 이중 리간드 착체; 상기 이중 리간드 착체를 포함하는 OLED; 하나 이상의 상기 이중 리간드 착체를 포함하는 발광층; 상기 OLED를 포함하는, 조명 소자, 정지형 시각 표시 장치 및 이동형 시각 표시 장치로 이루어진 군으로부터 선택되는 장치; 및 상기 이중 리간드 착체의 OLED 내, 예를 들어 에미터, 매트릭스 물질, 전하 수송 물질 및/또는 전하 차단제로서의 용도에 관한

것이다.

## 배경 기술

- [0002] 유기 발광 다이오드(OLED)는 전류에 의해 여기될 때 발광하는 물질의 성질을 이용한다. OLED는 특히 플랫 시각 표시 장치의 생산을 위한 음극관 및 액정 표시 장치에 대한 대체물로서 주목된다. 매우 콤팩트한 디자인 및 고유의 낮은 전력 소모로 인해, OLED를 포함하는 장치는 특히 이동장치 용도, 예를 들어 휴대폰, 랩탑 등에서의 용도에서 적당하다. 또한, 백색 OLED는 지금까지 알려진 조명 기술에 비해 상당한 이점을 가지며, 특히 매우 높은 효율을 가진다.
- [0003] 종래 기술은 전류에 의해 여기될 때 발광하는 중심 금속 원자로서 이리듐을 갖는 이중 리간드 착체를 예로서 포함하는 다수의 물질들을 제안한다.
- [0004] WO 2006/121811 A1은 카르벤 리간드를 포함하는 인광 이중 리간드 금속 착체를 개시한다. WO 2006/121811 A1에 기재된 착체, 예를 들어 이리듐 착체는 모두 카르벤 리간드로서 벤즈이미다졸로카르벤(벤즈이미다졸릴리덴)을 가진다. 리간드로서 이미다졸로카르벤(이미다졸릴리덴) 또는 트리아졸로카르벤(트리아졸릴리덴)을 가지는 화합물은 WO 2006/121811 A1에 개시되어 있지 않다.
- [0005] WO 2006/067074 A1도 마찬가지로 카르벤 리간드를 갖는 전계발광 이중 리간드 금속 착체를 개시한다. 사용되는 비카르벤 리간드에는 아릴피리딘, 아릴피라졸 및 아릴트리아졸이 포함된다. 비카르벤 리간드로서의 2-페닐-1H-이미다졸의 용도는 WO 2006/067074 A1에 개시되어 있지 않다.
- [0006] WO 2007/115981은 카르벤 리간드 및 복소환 비카르벤 리간드를 모두 포함하는 이중 리간드 금속 착체, 이의 제조 방법, 및 OLED 내 상기 화합물의 용도를 개시한다. WO 2007/115981에 예로서 개시된 화합물은 2-페닐-1H-이미다졸 리간드와 이미다졸로카르벤(이미다졸릴리덴) 리간드 또는 트리아졸로카르벤(트리아졸릴리덴) 리간드의 조합은 포함하지 않는다.
- [0007] JP 2009057505는 가변 방출 파장, 높은 발광 효율 및 긴 수명을 가지는 화합물을 포함하는 광전자 성분을 개시한다. 본 문헌에 따른 성분은 상호 임의로 연결된 2개의 리간드뿐만 아니라, 첫 번째로 카르벤 결합을 통해 또한 두 번째로는 비카르벤 결합을 통해 금속 원자에 부착된 1개 이상의 리간드를 포함하는 금속 착체를 포함한다. 2-페닐-1H-이미다졸 리간드의 이미다졸로카르벤(이미다졸릴리덴) 리간드 또는 트리아졸로카르벤(트리아졸릴리덴) 리간드와의 조합은 개시되어 있지 않다.

## 발명의 내용

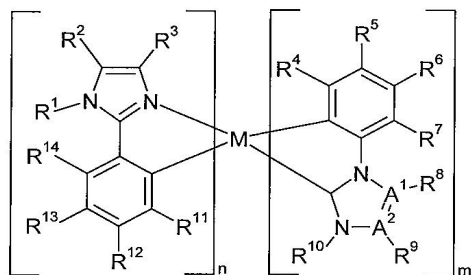
### 해결하려는 과제

- [0008] 전자기 스펙트럼의 가시광 영역, 더욱 특히 적색, 녹색, 특히 청색 영역에서 전계발광을 나타내는 화합물, 예를 들어 이리듐 착체가 이미 공지되어 있으나, 높은 양자 수율을 가지고 높은 다이오드 수명을 나타내는 대체 화합물의 제공이 바람직하다. 본 발명의 맥락에서, 전계발광은 전계형광 및 전계인광을 모두 의미하는 것으로 이해된다.
- [0009] 그러므로, 본 발명의 목적은 전색 표시 장치 및 백색 OLED의 생산을 가능하게 하는, 전자기 스펙트럼의 가시광 영역, 더욱 특히 적색, 녹색, 특히 청색 영역에서의 전계발광에 적당한, 대체 이리듐 및 백금 착체를 제공하는 것이다. 본 발명의 다른 목적은 숙주 화합물(매트릭스 물질)과의 혼합물로서 또는 고유하게, 즉 숙주 화합물의 부재 하에, OLED 내 발광층으로서 사용될 수 있는 상응하는 착체를 제공하는 것이다. 본 발명의 또 다른 목적은 다이오드에서의 높은 양자 수율 및 높은 안정성을 가지는 상응하는 착체를 제공하는 것이다. 착체는 OLED에서 에미터, 매트릭스 물질, 전하 수송 물질, 특히 정공 수송 물질 또는 전하 차단체로서 사용가능해야 한다.

### 과제의 해결 수단

- [0010] 상기 목적들은 본 발명에 따라 화학식 (I)의 이중 리간드 착체에 의해 달성된다:

[0011] [화학식 I]



[0012]

[0013] (식 중, M, A<sup>1</sup>, A<sup>2</sup>, n, m, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup>, R<sup>10</sup>, R<sup>11</sup>, R<sup>12</sup>, R<sup>13</sup> 및 R<sup>14</sup>는 각각 하기와 같이 정의된다:

[0014] M은 Ir 및 Pt로 이루어진 군으로부터 선택된 금속 원자이고,

[0015] A<sup>1</sup> 및 A<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 N 또는 C이고,

[0016] n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2이며, 여기서 M이 Pt인 경우, n과 m의 합은 2이거나, M이 Ir인 경우, n과 m의 합은 3이며,

[0017] R<sup>1</sup>은 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 3개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 시클로알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이며,

[0018] R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 수소; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 3개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 시클로알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이며,

[0019] R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup> 및 R<sup>7</sup>은 각각 독립적으로 수소; 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 치환기; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 3개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 시클로알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이거나,

[0020] R<sup>4</sup>와 R<sup>5</sup> 또는 R<sup>5</sup>와 R<sup>6</sup> 및/또는 R<sup>6</sup>과 R<sup>7</sup>은 함께, 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 총 5개 내지 30개의 탄소 원자 또는 이중 원자를 가지는 포화, 불포화 또는 방향족 탄소 고리를 형성하고,

[0021] R<sup>8</sup> 및 R<sup>9</sup>는 각각 독립적으로, A<sup>1</sup> 또는 A<sup>2</sup>가 N이거나, A<sup>1</sup> 또는 A<sup>2</sup>가 C인 경우 자유 전자쌍; 수소; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 3개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 시클로알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이며,

- [0022]  $R^{10}$ 은 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 3개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 시클로알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이고,
- [0023]  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소; 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 치환기; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 3개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 시클로알킬 라디칼; 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 임의로 1개 이상의 작용기를 가지며 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이거나,
- [0024]  $R^{11}$ 과  $R^{12}$  또는  $R^{12}$ 와  $R^{13}$  및/또는  $R^{13}$ 과  $R^{14}$ 는 함께, 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 총 5개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 포화, 불포화 또는 방향족 탄소 고리를 형성하고/하거나,
- [0025]  $R^1$ 과  $R^{14}$ 는 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성하고/하거나,
- [0026]  $A^1$ 이 C인 경우,  $R^7$ 과  $R^8$ 이 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성함).
- [0027] 본 발명의 맥락에서, 아릴 라디칼, 단위 또는 기, 헤테로아릴 라디칼, 단위 또는 기, 알킬 라디칼, 단위 또는 기 및 시클로알킬 라디칼, 단위 또는 기라는 용어들은 다른 의미가 언급되지 않는 한, 각각 하기와 같이 정의된다.
- [0028] 아릴 라디칼 또는 기는 방향족 고리 또는 복수개의 축합 방향족 고리로부터 형성되는, 6개 내지 30개의 탄소 원자, 바람직하게는 6 내지 18개의 탄소 원자를 가지는 기본 골격을 가지는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 적당한 기본 골격은, 예를 들어 페닐, 벤질, 나프틸, 안트라세닐 또는 페난트레닐이다. 이 기본 골격은 비치환될 수 있는데 이는 치환 가능한 모든 탄소 원자들이 수소 원자를 가지거나, 기본 골격의 1개, 1개 초과 또는 모든 치환 가능한 위치에서 치환될 수 있음을 의미한다. 적당한 치환기는, 예를 들어 알킬 라디칼, 바람직하게는 1 내지 8개의 탄소 원자를 가지는 알킬 라디칼, 더 바람직하게는 메틸, 에틸, i-프로필 또는 t-부틸, 아릴 라디칼, 바람직하게는  $C_6$ -아릴 라디칼이고, 이도 다시 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼, 바람직하게는 하나 이상의 질소 원자를 포함하는 헤테로아릴 라디칼, 더 바람직하게는 피리딜 라디칼, 알케닐 라디칼, 바람직하게는 하나의 이중 결합을 가지는 알케닐 라디칼, 더 바람직하게는 하나의 이중 결합 및 1 내지 8개의 탄소 원자를 가지는 알케닐 라디칼, 또는 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기일 수 있다. 도너 작용을 가지는 기는 +I 및/또는 +M 효과를 가지는 기를 의미하는 것으로 이해되고, 어셉터 작용을 가지는 기는 -I 및/또는 -M 효과를 가지는 기를 의미하는 것으로 이해된다. 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 적당한 기는 할로젠 라디칼, 바람직하게는 F, Cl 또는 Br, 더 바람직하게는 F, 알킬 라디칼, 알콕시 라디칼, 아릴옥시 라디칼, 카르보닐 라디칼, 에스테르 라디칼, 아민 라디칼, 아마이드 라디칼,  $CHF$  기,  $CHF_2$  기,  $CF_3$  기, CN 기, 티오 기 또는 SCN 기이다. 아릴 라디칼은 가장 바람직하게 메틸, 에틸, iso-프로필, n-프로필, n-부틸, iso-부틸, tert-부틸, F, Cl, 아릴옥시, 아민, 티오 기 및 알콕시로 이루어진 군으로부터 선택되는 치환기를 가지거나, 아릴 라디칼은 비치환이다. 아릴 라디칼 또는 아릴 기는 바람직하게 상기 치환기들 중 하나 이상에 의해 임의로 치환된  $C_6$ -아릴 라디칼이다.  $C_6$ -아릴 라디칼은 더 바람직하게는 상기 치환기들 중 어느 것도 가지지 않거나 1개, 2개 또는 3개를 가진다.
- [0029] 헤테로아릴 라디칼 또는 헤테로아릴 기는 5개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 라디칼을 의



미하는 것으로 이해되고, 이는 아릴 라디칼의 기본 골격 내 하나 이상의 탄소 원자가 이중 원자에 의해 치환된 점에서 상기 아릴 라디칼과 상이하다. 바람직한 이중 원자는 N, O 및 S이다. 가장 바람직하게, 아릴 라디칼의 기본 골격의 1 또는 2개의 탄소 원자는 이중 원자에 의해 치환된다. 기본 골격은 특히 바람직하게 피리딜, 피리미딜, 피라질 및 트리아졸릴과 같은 결전자계(electron-poor system), 및 피롤, 푸란, 티오펜, 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 옥사졸 및 티아졸과 같은 5-원 이중방향족물로부터 선택된다. 기본 골격은 기본 골격의 1개, 1개 초과 또는 모든 치환 가능한 위치에서 치환될 수 있다. 적당한 치환기는 아릴 기에 대해 이미 상기 기재된 것과 동일하다.

[0030] 알킬 라디칼 또는 알킬 기는 1개 내지 20개의 탄소 원자, 바람직하게는 1개 내지 10개의 탄소 원자, 더 바람직하게는 1 내지 8개의 탄소 원자를 가지는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 이 알킬 라디칼은 분지형 또는 비분지형일 수 있고, 임의로 1개 이상의 이중 원자, 바람직하게는 N, O 또는 S가 개재될 수 있다. 또한, 이 알킬 라디칼은 아릴 기에 대해 이미 기재된 치환기들 중 하나 이상에 의해 치환될 수 있다. 마찬가지로, 알킬 라디칼은 하나 이상의 아릴 기를 가지는 것도 가능하다. 상기 열거된 모든 아릴 기가 적당하다. 메틸, 에틸, i-프로필, n-프로필, i-부틸, n-부틸, t부틸, sec-부틸, i-펜틸, n-펜틸, sec-펜틸, 네오펜틸, n-헥실, i-헥실 및 sec-헥실로 이루어진 군으로부터 선택되는 알킬 라디칼이 특히 바람직하다. 메틸, i-프로필, tert-부틸이 매우 특히 바람직하다.

[0031] 시클로알킬 라디칼 또는 시클로알킬 기는 3개 내지 20개의 탄소 원자, 바람직하게는 3개 내지 10개의 탄소 원자, 더 바람직하게는 3 내지 8개의 탄소 원자를 가지는 환식 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 이 시클로알킬 라디칼은 1개 이상의 이중 원자, 바람직하게는 N, O 또는 S가 임의로 개입될 수 있다. 또한, 이 시클로알킬 라디칼은 비치환 또는 치환될 수 있는데, 즉 아릴 기에 대해 이미 기재된 치환기들 중 하나 이상에 의해 치환될 수 있다. 마찬가지로, 시클로알킬 라디칼이 하나 이상의 아릴 기를 가지는 것도 가능하다. 상기 열거된 모든 아릴 기들이 적당하다.

[0032] 아릴, 헤테로아릴, 알킬 및 시클로알킬 라디칼에 대한 언급은 본 발명에 따라, 본원에 언급된 라디칼, 특히  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$  라디칼(여기서,  $R^8$  및  $R^9$ 는  $A^1$  및/또는  $A^2$ 가 N인 경우, 유리 전자쌍이고, 이는 상기 군으로부터 선택되는 어느 치환기도 이 고리 질소 원자 상에 존재하지 않음을 의미함)에 독립적으로 적용된다.  $A^1$  및/또는  $A^2$ 가 C인 경우,  $R^8$  및  $R^9$ 는 각각 독립적으로 수소 및/또는 기재된 치환기이다.

[0033] 바람직한 실시양태에서, M,  $A^1$ ,  $A^2$ , n, m,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는 각각 하기와 같이 정의된다:

[0034] 본 발명에 따라, M은 Ir 또는 Pt, 바람직하게는 Ir이다. Ir은 +3 산화 상태로 본 발명의 이중 리간드 착체 내에 존재한다. Pt는 +2 산화 상태로 본 발명의 이중 리간드 착체 내에 존재한다.

[0035] 본 발명에 따라,  $A^1$  및  $A^2$ 는 각각 독립적으로 C 또는 N이다. 본 발명에 따라 하기 실시양태들이 바람직하다:

[0036] 1.  $A^1$  및  $A^2$  모두가 C이고, 즉 본 발명의 이중 리간드 착체는 금속-카르벤 결합을 통해 부착된 하나 이상의 페닐 이미다졸 단위를 포함한다.

[0037] 2. 추가의 바람직한 실시양태에서,  $A^1$  및  $A^2$ 는 각각 N 또는 C이고, 여기서  $A^2=C$ 인 경우,  $A^1=N$ 이거나,  $A^2$ 가 N인 경우,  $A^1=C$ 이며, 즉  $A^1$  및  $A^2$  중 하나가 N이고 다른 하나는 C이다. 이 실시양태에서, 본 발명의 이중 리간드 착체는 금속-카르벤 결합을 통해 부착된 하나 이상의 페닐트리아졸 단위를 포함한다.

[0038] n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2이고, 여기서 M이 Pt인 경우, n과 m의 합은 2이거나, M이 Ir인 경우, n과 m의 합은 3이다. 따라서, M이 Pt인 경우, n 및 m은 각각 1이다. M이 Ir인 경우, 바람직하게는 n=2 및 m=1이다.

[0039] 바람직한 실시양태에서,  $R^1$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이다.

[0040]  $R^1$ 은 더 바람직하게는 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼, 가장 바람직하게는 치환, 특히 오르토, 오르토'- 또는 오르토,오르토', 파라-치환, 또는 비치환 페닐 라디칼이다. 치환기는 바람직



하계 1개 내지 10개, 특히 1 내지 6개의 탄소 원자를 가지는 알킬 라디칼, 예를 들어 메틸, 에틸, 프로필 또는 부틸이다. 매우 특히 바람직한  $R^1$  라디칼은 페닐, 2,6-디메틸페닐, 2,6-디-iso-프로필페닐 또는 2,4,6-트리메틸페닐, 즉 메시틸이다.

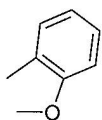
[0041] 따라서, 본 발명은 더욱 특히  $R^1$ 이 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지고 각각의 경우 1개 내지 10개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼로 오르토,오르토' 위치에서 치환된 아릴 라디칼인 본 발명의 이중 리간드 착체에 관한 것이다.

[0042] 바람직한 실시양태에서,  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 독립적으로 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이다.

[0043] 바람직한 실시양태에서,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$  및  $R^7$ 은 각각 수소이거나,  $R^4$ 와  $R^5$  또는  $R^5$ 와  $R^6$  또는  $R^6$ 과  $R^7$ , 특히  $R^5$ 와  $R^6$  또는  $R^6$ 과  $R^7$ 이 함께, 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 총 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 포화, 불포화 또는 방향족 탄소 고리를 형성한다.

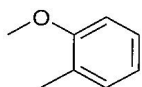
[0044] 본 발명의 이중 리간드 착체의 매우 특히 바람직한 실시양태에서,  $R^4$ 와  $R^5$  또는  $R^5$ 와  $R^8$  또는  $R^8$ 과  $R^7$ 은 함께, 화학식 (IIa) 또는 (IIb)의 고리를 형성한다:

[0045] [화학식 IIa]



[0046]

[0047] [화학식 IIb]



[0048]

[0049] 추가의 바람직한 실시양태에서,  $R^8$  및  $R^9$ 은 각각 독립적으로,  $A^1$  또는  $A^2$ 가 N이거나  $A^1$  또는  $A^2$ 가 C인 경우 유리 전자쌍; 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼, 가장 바람직하게는 페닐 라디칼이다.

[0050] 바람직한 실시양태에서,  $R^{10}$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자, 더 바람직하게는 1 내지 6개의 탄소 원자 또는 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼, 더 바람직하게는 6 내지 10개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼이다.  $R^{10}$ 에 대해 특히 바람직한 알킬 라디칼의 예는 메틸, 에틸, 프로필, 특히 이소프로필, 부틸, 특히 tert-부틸, 또는 펜틸이다.  $R^{10}$ 에 대해 특히 바람직한 아릴 라디칼의 예는 비치환 페닐 또는 치환 페닐, 바람직하게는 오르토 위치에서, 예를 들어 1 내지 6개의 탄소 원자를 가지는 알킬 라디칼, 예를 들어 메틸, 에틸 또는 프로필, 특히 이소프로필에 의해 치환 페닐이다.

[0051] 바람직한 실시양태에서,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 또는 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼, 더 바람직하게는 수소이다.

[0052] 본 발명의 이중 리간드 착체의 추가의 실시양태에서,  $R^1$ 과  $R^{14}$ 가 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성한다. 가장 바람직하게는,  $R^1$ 과  $R^{14}$ 가, 2개의 탄소 원자를 가지고, 1 내지 6개의 탄소 원자를 가지는 1 또는 2개의 알킬 라디칼, 예를 들어 메틸 또는 에틸에 의해 치환되거나 비치환된 6원 방향족 고리가 축합된 불포화 브릿지를 형성한다.

- [0053] 본 발명의 이중 리간드 착체의 추가의 실시양태에서,  $A^1$ 이 C인 경우,  $R^7$ 과  $R^8$ 은 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성한다. 가장 바람직하게는,  $R^1$ 과  $R^{14}$ 가, 2개의 탄소 원자를 가지고, 1 내지 6개의 탄소 원자를 가지는 1 또는 2개의 알킬 라디칼, 예를 들어 메틸 또는 에틸에 의해 치환되거나 비치환된 6원 방향족 고리가 축합된 불포화 브릿지를 형성한다. 가장 바람직하게는,  $R^7$ 과  $R^8$ 이, 2개의 탄소 원자를 가지고, 1 내지 6개의 탄소 원자를 가지는 1 또는 2개의 알킬 라디칼, 예를 들어 메틸 또는 에틸에 의해 치환되거나 비치환된 6원 방향족 고리가 축합된 불포화 브릿지를 형성한다.
- [0054] 본 발명은 더 바람직하게 M,  $A^1$ ,  $A^2$ , n, m,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는 각각 하기와 같이 정의되는 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체에 관한 것이다:
- [0055] M은 Ir이고,
- [0056]  $A^1$  및  $A^2$ 는 C이고,
- [0057] n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2이고, 여기서 n과 m의 합은 3이며; 바람직하게는 n=2 및 m=1이고,
- [0058]  $R^1$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이고; 바람직하게는  $R^1$ 은 비치환 또는 치환된 아릴 라디칼이며,
- [0059]  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 독립적으로 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이고; 바람직하게는  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 수소이고,
- [0060]  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$  및  $R^7$ 은 각각 수소이거나,
- [0061]  $R^4$ 와  $R^5$  또는  $R^5$ 와  $R^6$  또는  $R^6$ 과  $R^7$ 은 함께, 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 총 5개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 포화, 불포화 또는 방향족 고리를 형성하고,
- [0062]  $R^8$  및  $R^9$ 는 각각 수소이며,
- [0063]  $R^{10}$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 또는 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼이며,
- [0064]  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 또는 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이고/이거나,
- [0065]  $R^1$ 과  $R^{14}$ 는 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성하고/하거나,
- [0066]  $R^7$ 과  $R^8$ 은 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성한다.
- [0067] 상기 바람직한 실시양태 및 특히 바람직한 실시양태가 상응하게 적용된다
- [0068] 본 발명은 바람직하게 추가로 M,  $A^1$ ,  $A^2$ , n, m,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는

각각 하기와 같이 정의되는 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체에 관한 것이다:

- [0069] M은 Ir이고,
- [0070]  $A^1$  및  $A^2$ 는 각각 N 또는 C이며, 여기서  $A^2=C$ 일 때  $A^1=N$ 이고,  $A^2=N$ 일 때  $A^1=C$ 이며,
- [0071] n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2이고, 여기서 n과 m의 합은 3이며; 바람직하게는 n=2 및 m=1이고,
- [0072]  $R^1$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이고; 바람직하게는  $R^1$ 은 치환 또는 비치환 아릴 라디칼이며,
- [0073]  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 독립적으로 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이고; 바람직하게는  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 수소이며,
- [0074]  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$  및  $R^7$ 은 각각 수소이거나,
- [0075]  $R^4$ 와  $R^5$  또는  $R^5$ 와  $R^6$  또는  $R^6$ 과  $R^7$ 은 함께, 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재되고 총 5개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 포화, 불포화 또는 방향족 고리를 형성하고,
- [0076]  $R^8$  및  $R^9$ 는 각각 독립적으로,  $A^1$  또는  $A^2$ 가 N이거나,  $A^1$  또는  $A^2$ 가 C인 경우 자유 전자쌍; 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이며,
- [0077]  $R^{10}$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 또는 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼이고,
- [0078]  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는 수소, 또는 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이거나,
- [0079]  $R^1$ 과  $R^{14}$ 는 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성하고/하거나,
- [0080]  $R^7$ 과  $R^8$ 은 함께, 임의로 이중 원자, 방향족 단위, 이중방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성한다.
- [0081] 상기 바람직한 실시양태 및 특히 바람직한 실시양태가 상응하게 적용된다
- [0082] 본 발명은 바람직하게 또한,  $A^1$ ,  $A^2$ , n, m,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 는 각각 하기와 같이 정의되는 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체에 관한 것이다:
- [0083] M은 Ir이고,
- [0084]  $A^1$ 은 C이며,
- [0085]  $A^2$ 는 N 또는 C이고,
- [0086] n 및 m은 각각 독립적으로 1 또는 2이고, 여기서 n과 m의 합은 3이며; 바람직하게는 n=2 및 m=1이고,
- [0087]  $R^1$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이중 원자를 가지는 치환 또는 비치환

헤테로아릴 라디칼이고; 바람직하게는  $R^1$ 은 치환 또는 비치환 아릴 라디칼이며,

[0088]  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 독립적으로 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이종 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이고; 바람직하게는  $R^2$  및  $R^3$ 은 각각 수소이며,

[0089]  $R^4$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 또는 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼이고,

[0090]  $R^7$ 과  $R^8$ 은 함께, 탄소 원자 및/또는 이종 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리가 축합될 수 있는 불포화  $C_2$  브릿지를 형성하고,

[0091]  $R^9$ 는,  $A^2$ 가 N이거나  $A^2$ 가 C인 경우 유리 전자쌍; 수소; 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼; 또는 5개 내지 18개의 탄소 원자 및/또는 이종 원자를 가지는 치환 또는 비치환 헤테로아릴 라디칼이며,

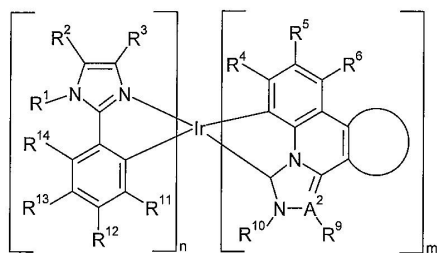
[0092]  $R^{10}$ 은 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼; 또는 6개 내지 30개의 탄소 원자를 가지는 치환 또는 비치환 아릴 라디칼이고,

[0093]  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 은 각각 독립적으로 수소, 또는 1개 내지 20개의 탄소 원자를 가지는 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이고/이거나,

[0094]  $R^1$ 과  $R^{14}$ 은 함께, 임의로 이종 원자, 방향족 단위, 이종방향족 단위 및/또는 작용기를 포함하고, 총 1개 내지 30개의 탄소 원자 및/또는 이종 원자를 가지며, 탄소 원자 및/또는 이종 원자를 포함하는 치환 또는 비치환 5원 내지 8원 고리, 바람직하게는 6원 방향족 고리가 임의로 축합된, 포화 또는 불포화, 선형 또는 분지형 브릿지를 형성한다.

[0095] 후자의 실시양태는 하기 화학식 (Ib)에 상응한다:

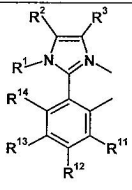
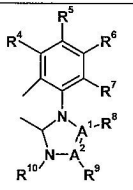
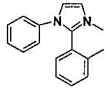
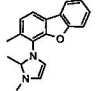
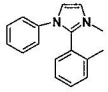
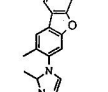
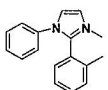
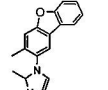
[0096] [화학식 Ib]



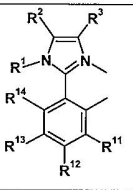
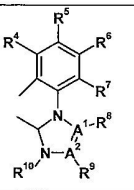
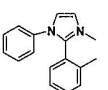
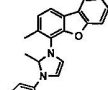
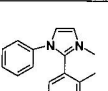
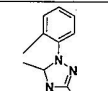
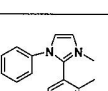
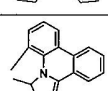
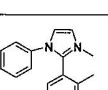
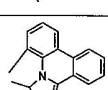
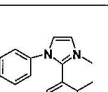
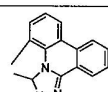
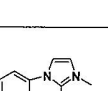
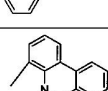
[0097]

[0098] 화학식 (I)의 매우 특히 바람직한 본 발명의 이종 리간드 착체는 표 1에 나타낸 리간드를 가지고, 특히 바람직하게 나타낸 조합의 리간드들을 가진다:

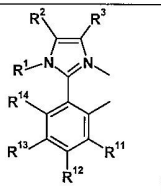
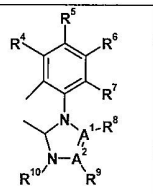
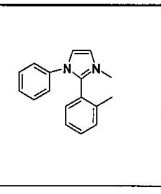
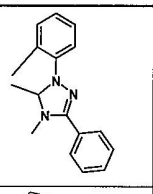
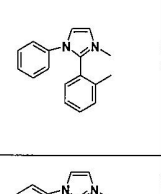
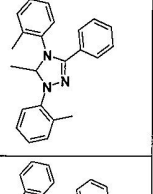
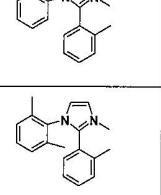
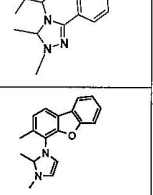
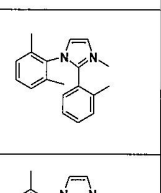
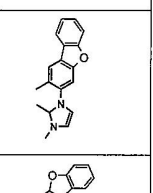
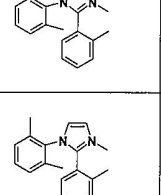
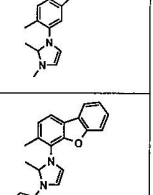
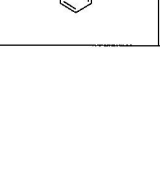
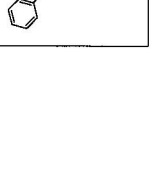


표 1

리간드		
K1		
K2		
K3		

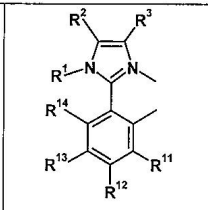
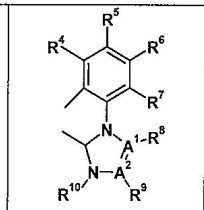
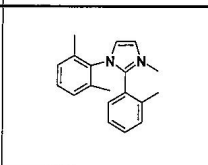
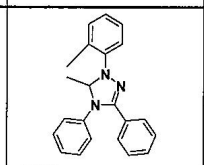
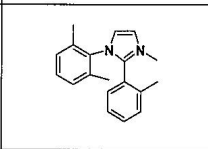
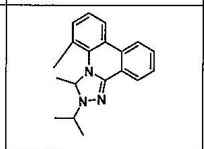
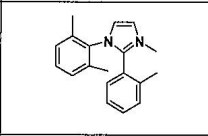
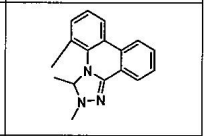
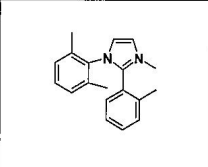
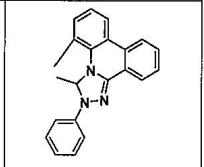
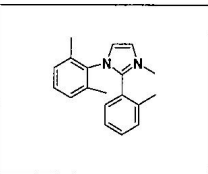
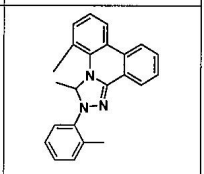
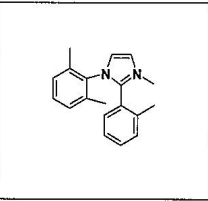
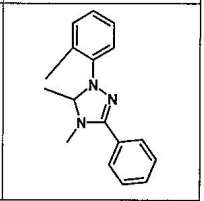
[0099]

리간드		
K4		
K5		
K6		
K7		
K8		
K9		

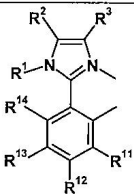
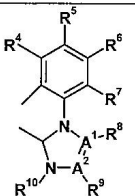
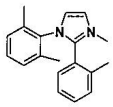
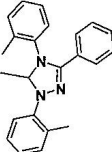
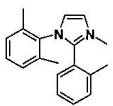
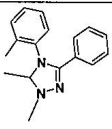
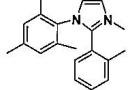
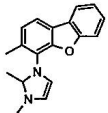
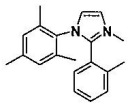
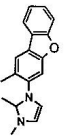
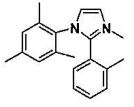
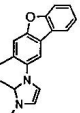
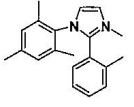
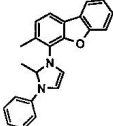
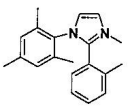
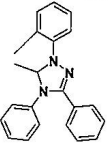
[0100]

리간드		
K10		
K11		
K12		
K13		
K14		
K15		
K16		

[0101]

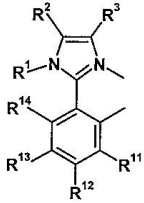
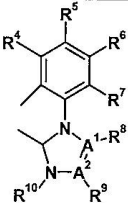
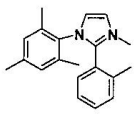
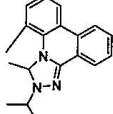
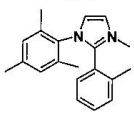
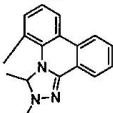
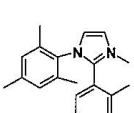
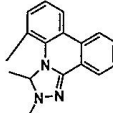
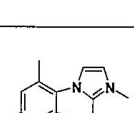
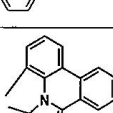
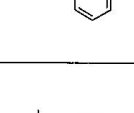
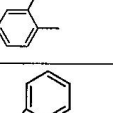
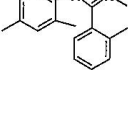
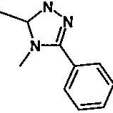
리간드		
K17		
K18		
K19		
K20		
K21		
K22		

[0102]

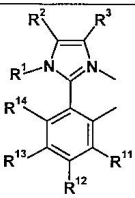
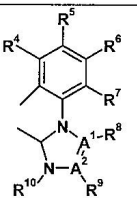
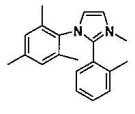
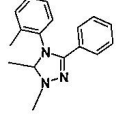
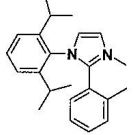
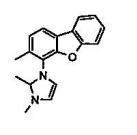
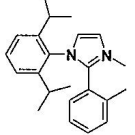
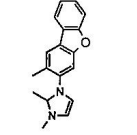
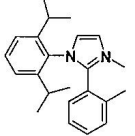
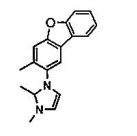
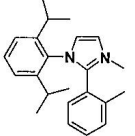
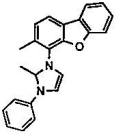
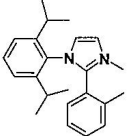
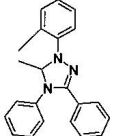
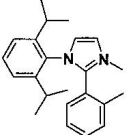
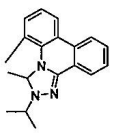
리간드		
K23		
K24		
K25		
K26		
K27		
K28		
K29		

[0103]

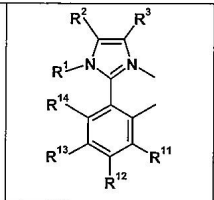
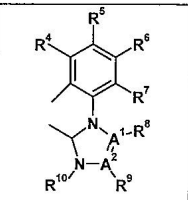
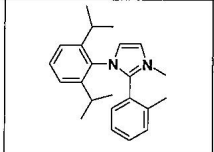
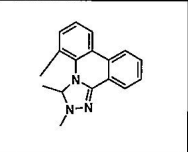
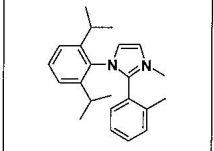
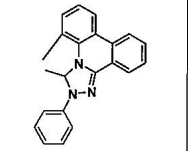
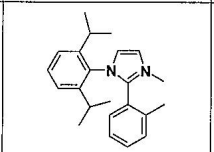
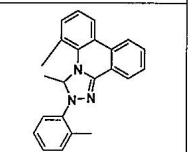
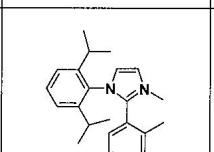
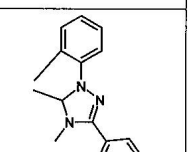
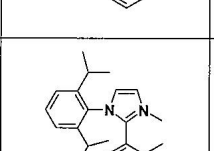
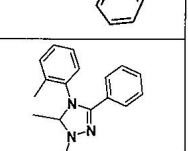
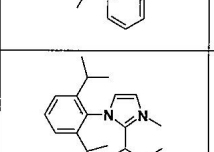
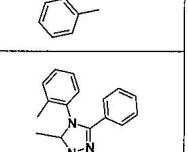


리간드		
K30		
K31		
K32		
K33		
K34		
K35		

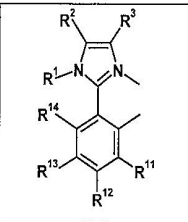
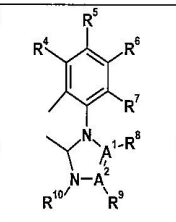
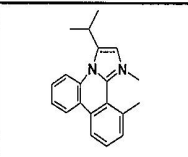
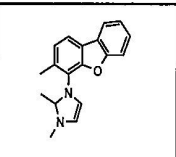
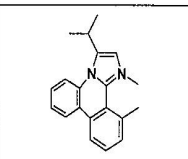
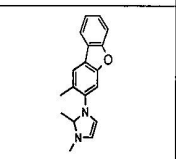
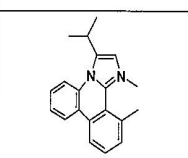
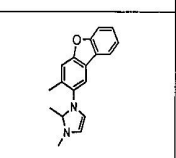
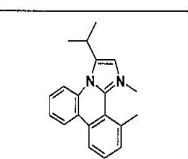
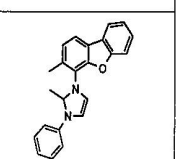
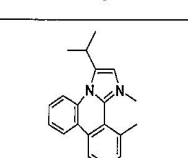
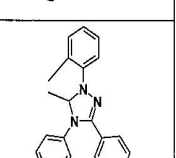
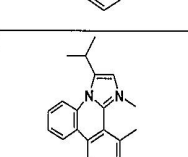
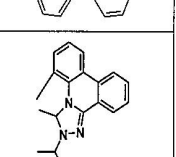
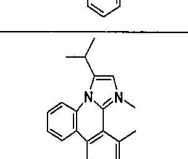
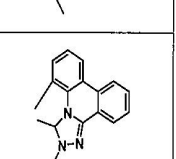
[0104]

리간드		
K36		
K37		
K38		
K39		
K40		
K41		
K42		

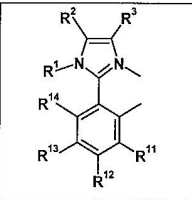
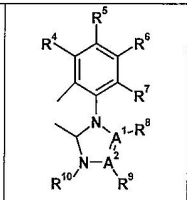
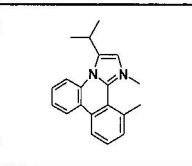
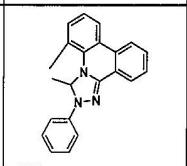
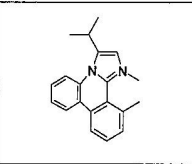
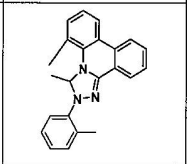
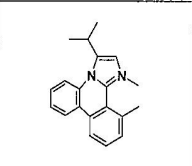
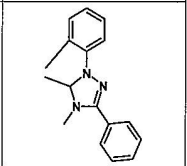
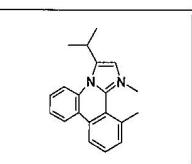
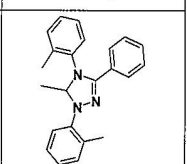
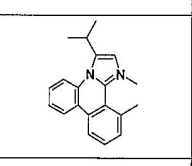
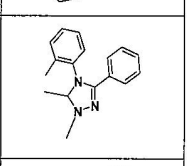
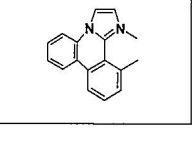
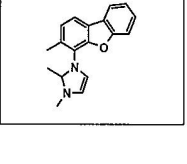
[0105]

리간드		
K43		
K44		
K45		
K46		
K47		
K48		

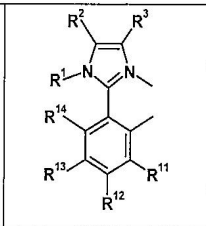
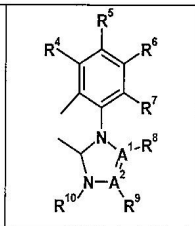
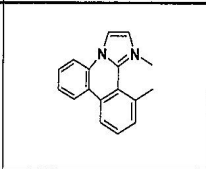
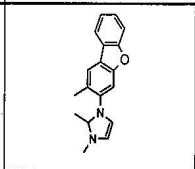
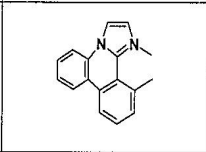
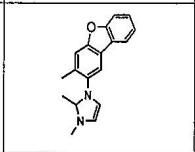
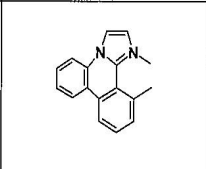
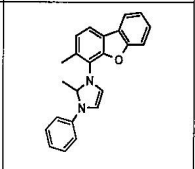
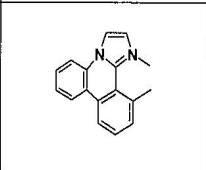
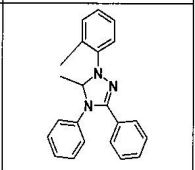
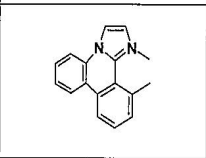
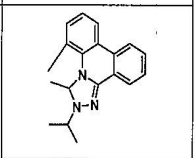
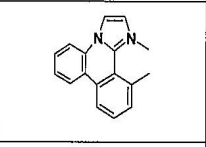
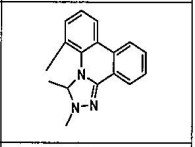
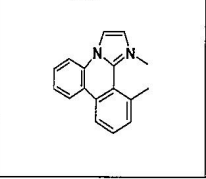
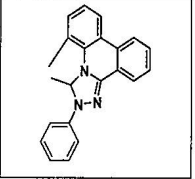
[0106]

리간드		
K49		
K50		
K51		
K52		
K53		
K54		
K55		

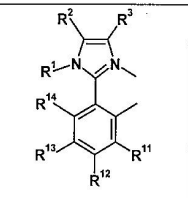
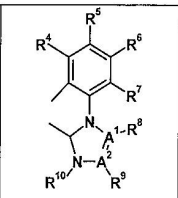
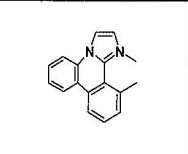
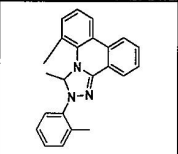
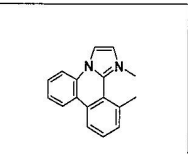
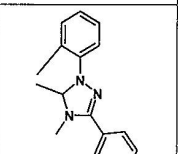
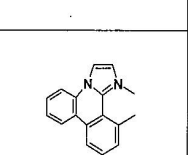
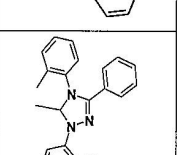
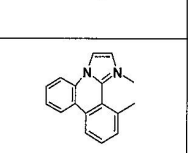
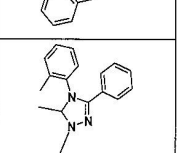
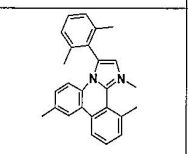
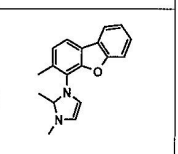
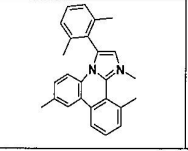
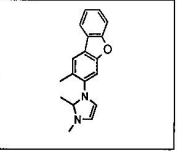
[0107]

리간드		
K56		
K57		
K58		
K59		
K60		
K61		

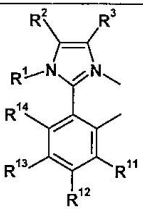
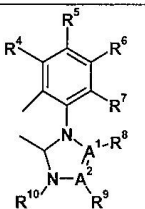
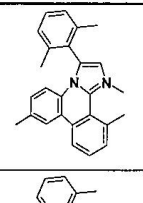
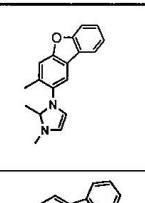
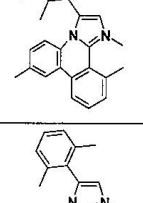
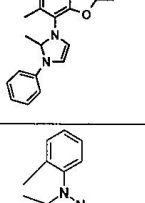
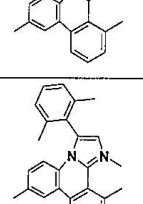
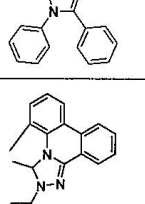
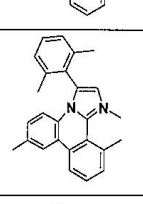
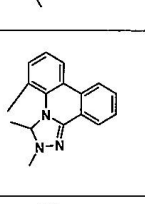
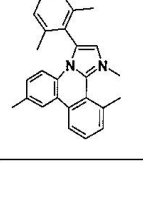
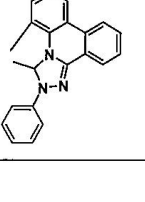


[0108]

리간드		
K62		
K63		
K64		
K65		
K66		
K67		
K68		

[0109]

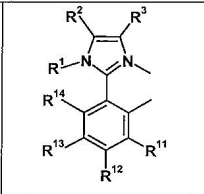
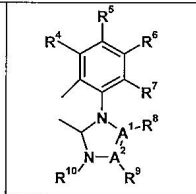
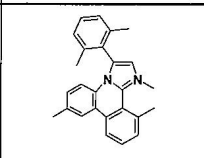
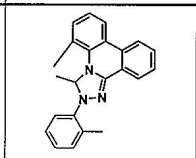
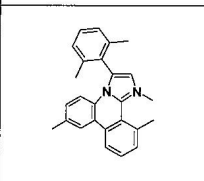
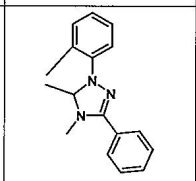
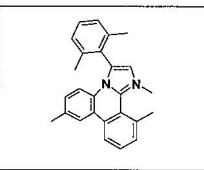
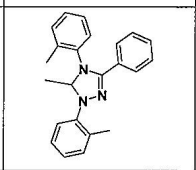
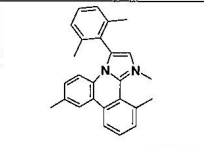
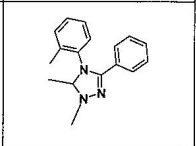
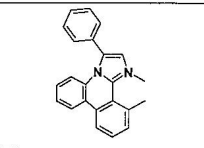
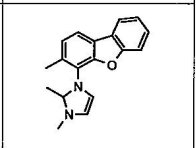
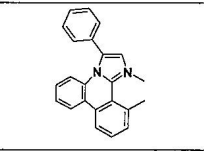
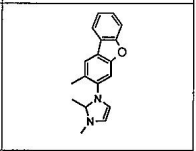
리간드		
K69		
K70		
K71		
K72		
K73		
K74		

[0110]

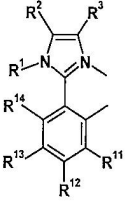
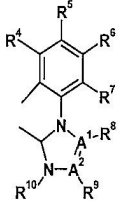
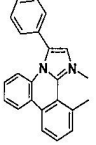
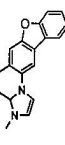
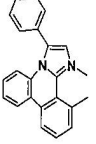
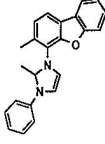
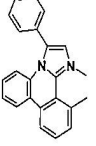
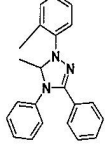
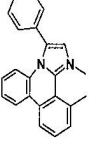
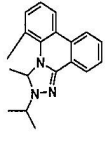
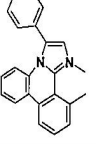
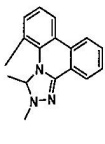
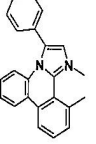
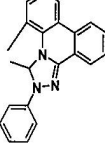
리간드		
K75		
K76		
K77		
K78		
K79		
K80		

[0111]



리간드		
K81		
K82		
K83		
K84		
K85		
K86		

[0112]

리간드		
K87		
K88		
K89		
K90		
K91		
K92		

[0113]

리간드		
K93		
K94		
K95		
K96		

[0114]

[0115]

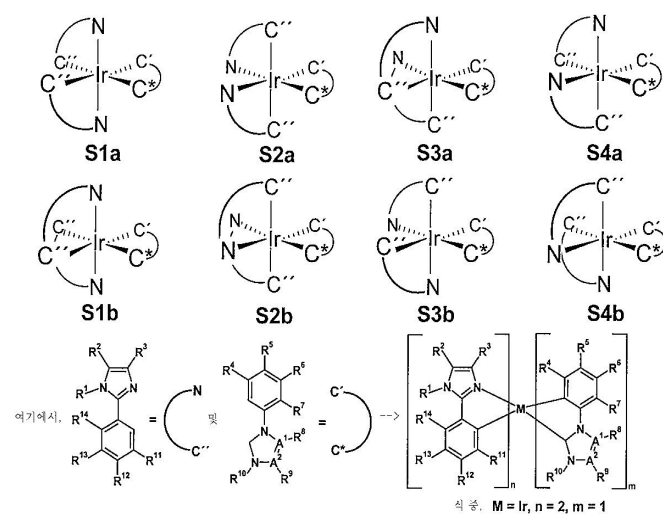
각각의 경우, M=Ir, n= 2 및 m=1이다.

[0116]

화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체 내에 존재하는 금속 M의 배위수, 및 사용된 카르벤 리간드 및 비카르벤 리간드의 수에 따라, 동일한 금속 M 및 사용된 카르벤 리간드 및 비카르벤 리간드의 동일한 성질을 가지는 상응하는 이중 리간드 금속 착체의 상이한 이성질체가 존재할 수 있다.

[0117]

예를 들어, 2개의 비카르벤 리간드 및 1개의 카르벤 리간드를 가지는 8면체 이리듐(III) 착체에 대해, 하기 이성질체 S1 내지 S4가 가능하고, 이들 각각은 2개의 거울이성질체(a 및 b)의 형태로 존재할 수 있다:



[0118]

[0119]

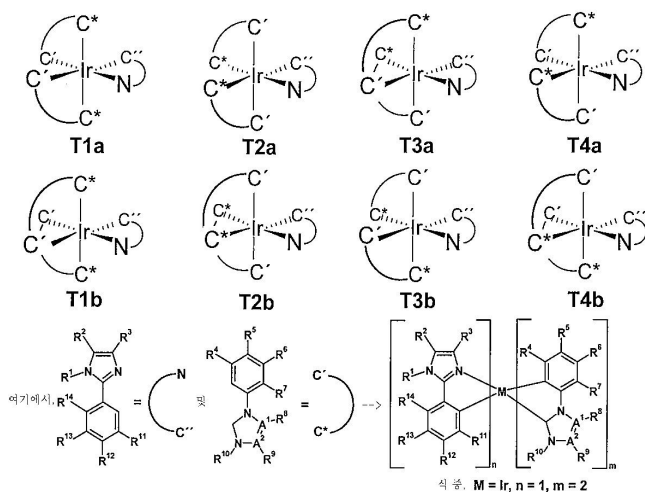
본원에서, 2개의 2-페닐-1H-이미다졸 리간드의 배치로 인해, S1a/S1b 및 S2a/S2b 이성질체는 유사-자오선 이성질체로 칭해지고, S3a/S3b 및 S4a/S4b 이성질체는 유사-면 이성질체로 칭해진다.

[0120]

본 발명에 따라, 놀랍게도 OLED에 사용될 때의 S3 및 S4 이성질체는 다이오드에 사용될 때 효율 및 수명에 대해 특히 양호한 결과를 제공하는 것으로 밝혀졌다. 따라서, S3a/S3b 및 S4a/S4b 이성질체, 즉 유사-면 이성질체는

본 발명에 따라 특히 바람직하다. 더 바람직하게는, 2개의 비카르벤 리간드 및 1개의 카르벤 리간드를 포함하는 화학식 (I)의 본 발명의 착체는 유사-면 이성질체로서 존재한다.

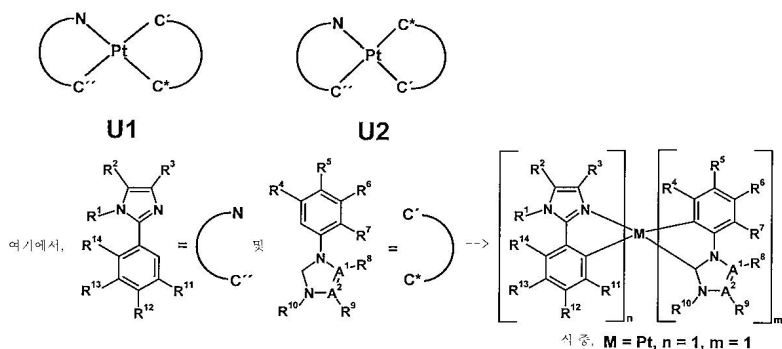
[0121] 1개의 비카르벤 리간드 및 2개의 카르벤 리간드를 가지는 이리듐(III) 착체의 경우, 하기 이성질체 T1 내지 T4가 가능하고, 이들 각각은 2가지 거울이성질체(a 및 b)의 형태로 존재할 수 있다:



[0122] 본원에서, 2개의 페닐카르벤 리간드의 배치로 인해, T1a/T1b 및 T2a/T2b 이성질체는 유사-자오선 이성질체로 칭해지고, T3a/T3b 및 T4a/T4b 이성질체는 유사-면 이성질체로 칭해진다.

[0124] 본 발명에 따라, 놀랍게도 OLED에 사용될 때의 T3 및 T4 이성질체는 다이오드에 사용될 때 효율 및 수명에 대해 특히 양호한 결과를 제공하는 것으로 밝혀졌다. 따라서, T3a/T3b 및 T4a/T4b 이성질체, 즉 유사-면 이성질체는 본 발명에 따라 특히 바람직하다. 더 바람직하게는, 1개의 비카르벤 리간드 및 2개의 카르벤 리간드를 포함하는 화학식 (I)의 본 발명의 착체는 유사-면 이성질체로서 존재한다.

[0125] 1개의 카르벤 리간드 및 2개의 비카르벤 리간드를 가지는 4각 평면 백금(II) 착체의 경우, 2가지 이성질체 U1 및 U2가 가능하다:

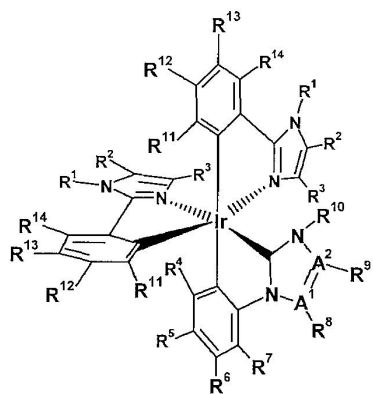


[0126] 일반적으로, 화학식 (I)의 이중 리간드 금속 착체의 상이한 이성질체는 당업자에게 공지된 방법에 의해, 예를 들어 크로마토그래피, 승화 또는 결정화에 의해 분리될 수 있다. 상이한 이성질체는 일반적으로 적당한 반응 조건(예를 들어, pH)에 의해, 열적으로 또는 광화학적으로 상호 전환될 수 있다.

[0128] 본 발명은 화학식 (I)의 이중 리간드 착체의 개별 이성질체 또는 거울이성질체, 및 임의의 요망되는 혼합비의 상이한 이성질체 또는 거울이성질체의 혼합물 모두에 관한 것이다.

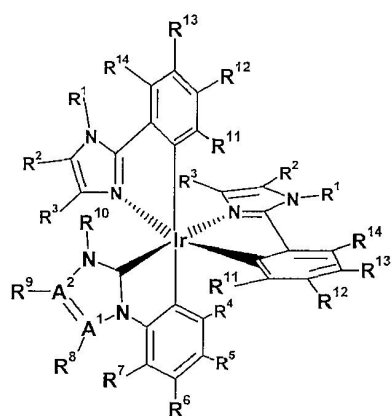
[0129] 따라서, 본 발명은 특히 바람직한 실시양태에서, M, A<sup>1</sup>, A<sup>2</sup>, n, m, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup>, R<sup>10</sup>, R<sup>11</sup>, R<sup>12</sup>, R<sup>13</sup> 및 R<sup>14</sup>(여기서, 이들은 하기 배열 IIIa, IIIb, IVa 또는 IVb 중 하나를 가짐)에 대해 기재된 일반적이고 바람직한 정의를 가지는 본 발명의 이중 리간드 착체에 관한 것이다:

[0130] [화학식 IIIa]



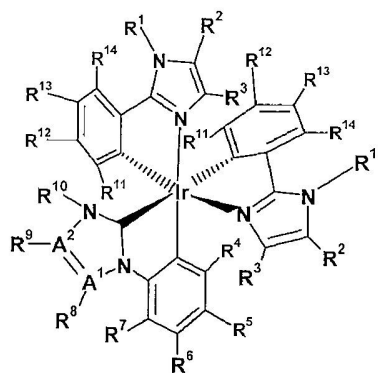
[0131]

[0132] [화학식 IIIb]



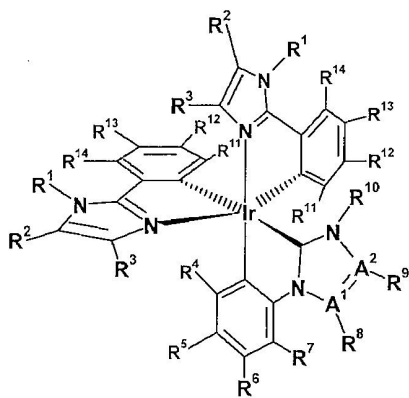
[0133]

[0134] [화학식 IVa]



[0135]

[0136] [화학식 IVb]



[0137]

[0138] 본 발명은 부가적으로

[0139] 금속 M, 및 화학식 (I)의 착체에서 비카르벤 결합을 통해 M에 부착된 1개 이상의 리간드를 포함하는 1종 이상의 전구체 화합물을, 화학식 (I)의 착체에서 1개 이상의 카르벤 결합을 통해 M에 부착된 1개 이상의 리간드, 또는 이의 리간드 전구체, 예를 들어 상응하는 이미다졸륨염과 접촉시키거나,

[0140] 금속 M, 및 화학식 (I)의 착체에서 1개 이상의 카르벤 결합을 통해 M에 결합된 하나의 리간드를 포함하는 1종 이상의 전구체 화합물을, 화학식 (I)의 착체에서 비카르벤 결합을 통해 M에 부착된 1개 이상의 리간드와 접촉시킴으로써,

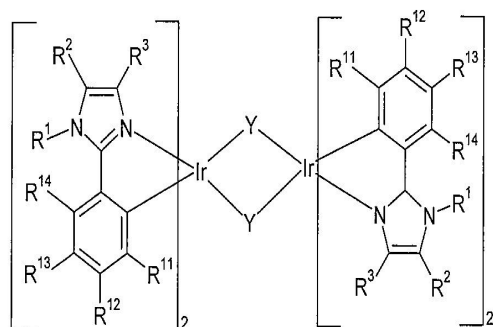
[0141] 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체를 제조하는 방법에 관한 것이다.

[0142] 본 발명의 바람직한 실시양태에 따라, 적당한 금속 M, 바람직하게는 이리듐에 부착된 적당한 비카르벤 리간드, 및 적당한 카르벤 리간드가, 바람직하게는 유리 카르벤으로서의 탈양성자화된 형태 또는 보호된 카르벤의 형태로, 예를 들어 은 카르벤 착체로서 포함하는 착체가 접촉된다. 적당한 전구체 화합물은 화학식 (I)의 착체 내에 존재하는 적당한 치환기  $R^1$  내지  $R^{14}$ 를 포함한다.

[0143] 적당한 금속 M, 바람직하게는 이리듐에 부착된 적당한 비카르벤 리간드를 포함하는 적당한 착체가 당업자에게 공지되어 있다. 화학식 (I)의 착체에 존재하는 비카르벤 리간드에 부가하여, 전구체 화합물로서 사용되는 이 착체들은 당업자에게 공지된 리간드, 예를 들어 할로겐화물, 바람직하게는 염화물을 추가로 포함할 수 있다. 추가의 적당한 리간드는, 예를 들어 1,5-시클로옥타디온(COD), 포스핀, 시아니드, 알콕시드, 유사 할로겐화물 및/또는 알킬이다.

[0144] 적당한 금속 M에 부착된 적당한 비카르벤 리간드를 포함하는 특히 바람직한 착체는 예를 들어  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  및  $R^{14}$ 가 상기 정의된 바와 같은 화학식 (VI)의 화합물이다:

[0145] [화학식 VI]

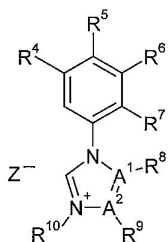


[0146]

[0147] (여기서, Y는 독립적으로 F, Cl, Br, I, 메톡시 또는 카르복실레이트일 수 있다).

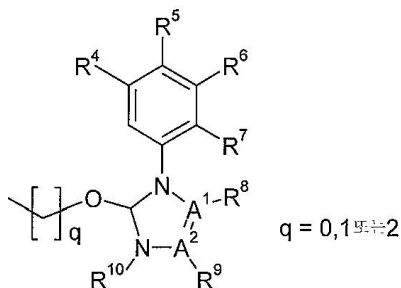
[0148] 화학식 (I)의 착체에 사용되는 카르벤 리간드에 특히 바람직한 전구체 화합물은 예를 들어  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$  및 A가 상기 정의된 바와 같은 화학식 (VII) 또는 (VIII)의 것이다:

[0149] [화학식 VII]



[0150]

[0151] [화학식 VIII]



[0152] (여기서, Z는 F, Cl, Br, I, BF<sub>4</sub>, PF<sub>6</sub>, ClO<sub>4</sub> 또는 SbF<sub>6</sub>일 수 있다).

[0153]

[0154] 카르벤 리간드 전구체는 바람직하게는 반응 전에, 예를 들어 당업자에게 공지된 염기성 화합물, 예를 들어 염기성 메탈레이트, 염기성 금속 아세테이트, 아세틸아세토네이트 또는 알콕시드, 또는 염기, 예컨대 KO<sup>t</sup>Bu, NaO<sup>t</sup>Bu, LiO<sup>t</sup>Bu, NaH, 실릴아미드, Ag<sub>2</sub>O 및 포스파젠 염기에 의해 탈양성자화된다. 추가의 바람직한 실시양태에서, 카르벤은 또한 카르벤 리간드의 전구체 화합물로부터 휘발성 물질, 예를 들어 저급 알코올, 예컨대 메탄올, 에탄올, 예를 들어 승온 및/또는 감압 하에서 제거함으로써 방출될 수 있다. 상응하는 방법이 당업자에게 공지되어 있다.

[0155] 접촉은 바람직하게 용매 내에서 수행된다. 적당한 용매는 당업자에게 공지되어 있고, 바람직하게는 방향족 또는 지방족 용매, 예를 들어 벤젠 또는 톨루엔, 고리형 또는 비고리형 에테르, 알코올, 에스테르, 아미드, 케톤, 니트릴, 할로젠화 화합물 및 이들의 혼합물로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특히 바람직한 용매는 톨루엔, 자일렌, 디옥산 및 THF이다.

[0156] 사용된 금속-비카르벤 착체 대 사용된 카르벤 리간드 전구체의 몰비는 일반적으로 1:10 내지 10:1, 바람직하게는 1:1 내지 1:5, 더 바람직하게는 1:2 내지 1:4이다.

[0157] 접촉은 일반적으로 20 내지 200℃, 바람직하게는 50 내지 150℃, 더 바람직하게는 60 내지 130℃의 온도에서 수행된다.

[0158] 반응 시간은 요망되는 카르벤 착체에 의존하고, 일반적으로 0.02 내지 50시간, 바람직하게는 0.1 내지 24시간, 더 바람직하게는 1 내지 12시간이다.

[0159] 반응 후에 수득되는 화학식 (I)의 착체는 임의로 당업자에게 공지된 방법, 예를 들어 세정, 결정화 또는 크로마토그래피에 의해 정제될 수 있고, 임의로 마찬가지로 당업자에게 공지된 조건 하에, 예를 들어 열적으로 또는 광화학적으로 이성체화될 수 있다.

### 발명의 효과

[0160] 상기 이중 리간드 착체 및 이의 혼합물은 유기 발광 다이오드(OLED) 내 에미터 분자로서 매우 적당하다. 리간드의 변형을 통해, 전자기 스펙트럼의 적색, 녹색, 특히 청색 영역에서 전계발광을 나타내는 상응하는 착체를 제공하는 것이 가능하다. 따라서, 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체는 전자기 스펙트럼의 가시광 영역, 예를 들어 400 내지 800 nm, 바람직하게는 400 내지 600 nm에서 방출(전계발광)을 가지기 때문에, 에미터 물질로서 매우 적당하다. 본 발명의 이중 리간드 착체로 인해, 전자기 스펙트럼의 적색, 녹색, 특히 청색 영역에서 전계발광을 가지는 화합물을 제공하는 것이 가능하다. 따라서, 에미터 물질로서의 본 발명의 이중 리간드 착체를 이용하여, 산업적으로 유용한 OLED를 제공하는 것이 가능하다.

[0161] 또한, 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체는 매트릭스 물질, 전하 수송 물질, 특히 정공 수송 물질, 및/또는 전하 차단제 물질로서 적당하다.

[0162] 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체는 바람직하게 에미터 및/또는 정공 수송 물질, 더 바람직하게는 에미터로서 적당하다.

[0163] 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체의 특별한 성질은 OLED에 사용될 때 특히 양호한 효율 및 수명이다.

[0164] 따라서, 본원은 화학식 (I)의 하나 이상의 본 발명의 이중 리간드 착체를 포함하는 OLED를 또한 제공하는 것이

다. 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체는 바람직하게 OLED에서 에미터, 매트릭스 물질, 전하 수송 물질, 특히 정공 수송 물질, 및/또는 정공 차단제, 더 바람직하게는 에미터 및/또는 정공 수송 물질, 특히 바람직하게 에미터로서 이용된다.

[0165] 본원은 또한 OLED 내 발광층, 바람직하게는 에미터, 매트릭스 물질, 전하 수송 물질, 특히 정공 수송 물질, 및/또는 전하 차단제, 더 바람직하게는 에미터 및/또는 정공 수송 물질, 특히 바람직하게 에미터로서의 화학식 (I)의 이중 리간드 착체의 용도를 제공한다.

[0166] 유기 발광 다이오드는 원칙적으로 하기의 복수개의 층들로부터 형성된다:

[0167] - 양극(1)

[0168] - 정공 수송층(2)

[0169] - 발광층(3)

[0170] - 전자 수송층(4)

[0171] - 음극(5).

[0172] 그러나, OLED는 상기 모든 층들을 포함하지 않은 것도 가능하고, 예를 들어 층 (1) (양극), (3) (발광층) 및 (5) (음극)으로부터 형성된 OLED도 또한 유용하고, 여기서 층 (2) (정공 수송층) 및 (4) (전자 수송층)의 기능은 인접한 층들에 의해 양도된다. 층 (1), (2), (3) 및 (5)을 각각 포함하는 OLED, 및 층 (1), (3), (4) 및 (5)도 또한 적당하다.

[0173] 화학식 (I)의 이중 리간드 착체는 바람직하게 발광층(3) 내 에미터 분자 및/또는 매트릭스 물질로서 사용된다. 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체는 또한, 발광층(3) 내 에미터 분자 및/또는 매트릭스 물질에 부가하여, 또는 발광층에서의 용도 대신에, 정공 수송층(2) 또는 전자 수송층(4) 내 전하 수송 물질로서 및/또는 전하 차단제로서 이용될 수 있고, 여기서 정공 수송층(2)(정공 수송 물질) 내 전하 수송 물질로서의 용도가 바람직하다.

[0174] 따라서, 본원은 하나 이상의 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체를, 바람직하게는 에미터 분자로서 포함하는 발광층을 추가로 제공한다. 바람직한 화학식 (I)의 이중 리간드 착체는 이미 상기 명시되었다.

### 도면의 간단한 설명

[0175] 도 1은 Em1-s 결정 구조이다.

도 2는 Em1-i 결정 구조이다.

도 3은 Em2-i 결정 구조이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0176] 본 발명에 따라 사용되는 화학식 (I)의 이중 리간드 착체는 고유하게, 즉 추가 첨가없이 발광층 내에 존재할 수 있다. 그러나, 본 발명에 따라 사용되는 화학식 (I)의 이중 리간드 착체에 부가하여, 추가 화합물이 발광층 내에 존재하는 것도 또한 가능하다. 예를 들어, 에미터 분자로서 사용되는 이중 리간드 착체의 방출 색상을 변경하기 위해 형광 염료가 존재할 수 있다. 또한, 희석 물질(매트릭스 물질)이 사용될 수 있다. 이 희석 물질은 중합체, 예를 들어 폴리(N-비닐카바졸) 또는 폴리실란일 수 있다. 그러나, 희석 물질도 마찬가지로 소분자, 예를 들어 4,4'-N,N'-디카바졸비페닐(CDP) 또는 삼차 방향족 아민일 수 있다. 희석 물질이 사용될 때, 발광층 내 사용되는 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체의 분율은 일반적으로 40 중량% 미만, 바람직하게는 3 내지 30 중량%이다. 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체는 바람직하게 매트릭스 내에 사용된다. 따라서, 발광층은 바람직하게 하나 이상의 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체, 및 희석 물질로서의 하나 이상의 매트릭스 물질을 포함한다.

[0177] 적당한 매트릭스 물질은, 상기 희석 물질에 부가하여, 원칙적으로 정공 및 전자 수송 물질로서 이후 기재된 물질이고, 또한 카르벤 착체, 예를 들어 화학식 (I)의 카르벤 착체 또는 WO 2005/019373에 언급된 카르벤 착체이다. 카바졸 유도체, 예를 들어 4,4'-비스(카바졸-9-일)-2,2'-디메틸비페닐(CDBP), 4,4'-비스(카바졸-9-일)비페닐(CBP), 1,3-비스(N-카바졸릴)벤젠(mCP), 및 WO 2008/034758 및 WO 2009/003919 에 기재된 매트릭스 물질이 특히 적당하다.

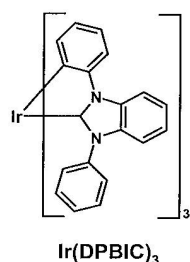


- [0178] 언급된 소분자 또는 소분자의 (공)중합체일 수 있는 추가의 적당한 매트릭스 물질이 하기 공보들에 명시되어 있다:
- [0179] WO 2007108459(H-1 내지 H-37), 바람직하게는 H-20 내지 H-22 및 H-32 내지 H-37, 가장 바람직하게는 H-20, H-32, H-36, H-37, WO 2008035571 A1(Host 1 내지 Host 6), JP 2010135467(화합물 1 내지 46 및 Host-1 내지 Host-39 및 Host-43), WO 2009008100 화합물 No. 1 내지 No. 67, 바람직하게는 No. 3, No. 4, NO. 7 내지 No. 12, No. 55, No. 59, No. 63 내지 No. 67, 더 바람직하게는 No. 4, NO. 8 내지 No. 12, No. 55, No. 59, No. 64, No. 65, 및 No. 67, WO 2009008099 화합물 No. 1 내지 No. 110, WO 2008140114 화합물 1-1 내지 1-50, WO 2008090912 화합물 OC-7 내지 OC-36 및 Mo-42 내지 Mo-51의 중합체, JP 2008084913 H-1 내지 H-70, WO 2007077810 화합물 1 내지 44, 바람직하게는 1, 2, 4-6, 8, 19-22, 26, 28-30, 32, 36, 39-44, WO 201001830 단량체 1-1 내지 1-9의 중합체, 바람직하게는 1-3, 1-7, 및 1-9의 중합체, WO 2008029729 화합물 1-1 내지 1-36(의 중합체), WO 20100443342 HS-1 내지 HS-101 및 BH-1 내지 BH-17, 바람직하게는 BH-1 내지 BH-17, JP 2009182298 단량체 1 내지 75 기재의 (공)중합체, JP 2009170764, JP 2009135183 단량체 1-14 기재의 (공)중합체, WO 2009063757 바람직하게 단량체 1-1 내지 1-26 기재의 (공)중합체, WO 2008146838 화합물 a-1 내지 a-43 및 1-1 내지 1-46, JP 2008207520 단량체 1-1 내지 1-26 기재의 (공)중합체, JP 2008066569 단량체 1-1 내지 1-16 기재의 (공)중합체, WO 2008029652 단량체 1-1 내지 1-52 기재의 (공)중합체, WO 2007114244 단량체 1-1 내지 1-18 기재의 (공)중합체, JP 2010040830 화합물 HA-1 내지 HA-20, HB-1 내지 HB-16, HC-1 내지 HC-23 및 단량체 HD-1 내지 HD-12 기재의 (공)중합체, JP 2009021336, WO 2010090077 화합물 1 내지 55, WO 2010079678 화합물 H1 내지 H42, WO 2010067746, WO 2010044342 화합물 HS-1 내지 HS-101 및 Poly-1 내지 Poly-4, JP 2010114180 화합물 PH-1 내지 PH-36, US 2009284138 화합물 1 내지 111 및 H1 내지 H71, WO 2008072596 화합물 1 내지 45, JP 2010021336 화합물 H-1 내지 H-38, 바람직하게는 H-1, WO 2010004877 화합물 H-1 내지 H-60, JP 2009267255 화합물 1-1 내지 1-105, WO 2009104488 화합물 1-1 내지 1-38, WO 2009086028, US 2009153034, US 2009134784, WO 2009084413 화합물 2-1 내지 2-56, JP 2009114369 화합물 2-1 내지 2-40, JP 2009114370 화합물 1 내지 67, WO 2009060742 화합물 2-1 내지 2-56, WO 2009060757 화합물 1-1 내지 1-76, WO 2009060780 화합물 1-1 내지 1-70, WO 2009060779 화합물 1-1 내지 1-42, WO 2008156105 화합물 1 내지 54, JP 2009059767 화합물 1 내지 20, JP 2008074939 화합물 1 내지 256, JP 2008021687 화합물 1 내지 50, WO 2007119816 화합물 1 내지 37, WO 2010087222 화합물 H-1 내지 H-31, WO 2010095564 화합물 HOST-1 내지 HOST-61, WO 2007108362, WO 2009003898, WO 2009003919, WO 2010040777, US 2007224446 및 W006128800.
- [0180] 특히 바람직한 실시양태에서, 이후 명시되는 화학식 (X)의 하나 이상의 화합물은 매트릭스 물질로서 사용된다. 화학식 (X)의 화합물의 바람직한 실시양태도 마찬가지로 이후에 명시되어 있다.
- [0181] 상기 언급된 매트릭스 물질 및 하기 화학식 (X)의 화합물은 발광층 내 매트릭스 물질로서 뿐만 아니라, OLED의 기타 층, 예를 들어 전자 수송층 및/또는 정공 수송층 내의 매트릭스 물질로서 적용가능하다. 또한, 상기 2개 이상의 상이한 매트릭스 물질 및/또는 하기 화학식 (X)의 화합물을 매트릭스 물질로서 적용하는 것도 가능하다.
- [0182] 특히 효율적인 OLED를 수득하기 위해, 정공 수송층의 HOMO(최고 점유 분자 궤도)가 양극의 일 함수에 맞게 정렬되어야 하고, 전자 수송층의 LUMO(최저 비점유 분자 궤도)는 음극의 일 함수에 맞게 정렬되어야 한다.
- [0183] 본원은 하나 이상의 본 발명의 발광층을 포함하는 OLED를 추가로 제공한다. OLED 내의 추가 층은 상기 층에 통상 사용되고 당업자에게 공지된 임의의 물질로 형성될 수 있다.
- [0184] 상기 층에 적당한 물질(양극, 음극, 정공 및 전자 주입 물질, 정공 및 전자 수송 물질, 정공 및 전자 차단체 물질, 매트릭스 물질, 및 형광 및 인광 에미터)이 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어 문헌[H. Meng, N. Herron, Organic Small Molecule Materials for Organic Light-Emitting Devices in Organic Light-Emitting Materials and Devices, eds: Z. Li, H. Meng, Taylor & Francis, 2007, Chapter 3, pages 295 to 411]에 명시되어 있다.
- [0185] 양극은 양의 전하 캐리어를 제공하는 전극이다. 그것은 예를 들어 금속, 상이한 금속들의 혼합물, 금속 합금, 금속 산화물 또는 상이한 금속 산화물들의 혼합물을 포함하는 물질로 이루어질 수 있다. 대안적으로, 양극은 전자 전도성 중합체일 수 있다. 적당한 금속은 원소 주기율표의 11, 4, 5 및 6족의 금속, 및 8 내지 10족의 전이 금속을 포함한다. 양극이 투명하게 될 경우, 원소주기율표의 12, 13 및 14족의 혼합 금속 산화물이, 예를 들어 산화인듐주석(ITO)이 일반적으로 사용된다. 마찬가지로, 양극(1)은, 예를 들어 문헌[Nature, Vol. 357, pages 477 to 479 (June 11, 1992)]에 기재된 바와 같은 유기 물질, 예를 들어 폴리아닐린을 포함하는 것도 가능하다.

형성된 빛을 방출하기 위해, 양극 또는 음극 중 하나 이상은 적어도 부분적으로 투명해야 한다.

[0186] 본 발명의 OLED의 층(2)을 위한 적당한 정공 수송 물질이, 예를 들어 문헌[Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 4th Edition, Vol. 18, pages 837 to 860, 1996]에 개시되어 있다. 정공 수송 분자 또는 중합체가 정공 수송 물질로 사용될 수 있다. 통상 사용되는 정공 수송 분자는 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐( $\alpha$ -NPD), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 1,1-비스[(디-4-톨릴아미노)페닐]시클로헥산(TAPC), N,N'-비스(4-메틸페닐)-N,N'-비스(4-에틸페닐)-[1,1'-(3,3'-디메틸)비페닐]-4,4'-디아민(ETPD), 테트라키스(3-메틸페닐)-N,N,N',N'-2,5-페닐렌디아민(PDA),  $\alpha$ -페닐-4-N,N-디페닐아미노스티렌(TPS), p-(디에틸아미노)벤즈알데히드 디페닐히드라존(DEH), 트리페닐아민(TPA), 비스[4-(N,N-디에틸아미노)-2-메틸페닐](4-메틸페닐)메탄(MPMP), 1-페닐-3-[p-(디에틸아미노)스티릴]-5-[p-(디에틸아미노)페닐]피라졸린(PPR 또는 DEASP), 1,2-trans-비스(9H-카바졸-9-일)-시클로부탄(DCZB), N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TTB), 플루오렌 화합물, 예컨대 2,2',7,7'-테트라(N,N-디-톨릴)아미노-9,9-스피로비플루오렌(스피로-TTB), N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-NPB) 및 9,9-비스(4-(N,N-비스-비페닐-4-일-아미노)페닐-9H-플루오렌, 벤지딘 화합물, 예컨대 N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)벤지딘 및 포르피린 화합물, 예컨대 구리 프탈로시아닌으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 통상 사용되는 정공 수송 중합체는 폴리비닐카바졸, (페닐메틸)폴리실란 및 폴리아닐린으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 마찬가지로, 폴리스티렌 및 폴리카르보네이트와 같은 중합체 내에 도핑함으로써 정공 수송 중합체를 획득하는 것도 가능하다. 적당한 정공 수송 분자는 이미 상기 언급된 분자이다.

[0187] 또한, 한 실시양태에서, 카르벤 착체를 정공 전도체 물질로서 사용하는 것도 가능하고, 이 경우에 하나 이상의 정공 전도체 물질의 밴드 갭은 사용된 에미터 물질의 밴드 갭보다 일반적으로 크다. 본 발명의 맥락에서, 밴드 갭은 삼중항(triplet) 에너지를 의미하는 것으로 이해된다. 적당한 카르벤 착체는, 예를 들어 화학식 (I)의 본 발명의 카르벤 착체, WO 2005/019373 A2, WO 2006/056418 A2, WO 2005/113704, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727에 기재된 카르벤 착체이다. 적당한 카르벤 착체의 한 예는 하기 화학식을 가지는 Ir(DPBIC)<sub>3</sub>이다:



[0188]

[0189] 마찬가지로 정공 수송층 내의 혼합물, 특히 정공 수송층의 전기 p-도핑을 조려하는 혼합물을 사용하는 것도 가능하다. p-도핑은 산화성 물질의 첨가에 의해 달성된다. 이 혼합물은 예를 들어 하기 혼합물일 수 있다: 상기 정공 수송 물질과 하나 이상의 금속 산화물의 혼합물, 예를 들어 MoO<sub>2</sub>, MoO<sub>3</sub>, WO<sub>x</sub>, ReO<sub>3</sub>, 및/또는 바람직하게는 MoO<sub>3</sub> 및/또는 ReO<sub>3</sub>, 더 바람직하게는 ReO<sub>3</sub>, 또는 상기 정공 수송 물질과 V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, 7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄(TCNQ), 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄(F<sub>4</sub>-TCNQ), 2,5-비스(2-히드록시에톡시)-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄, 비스(테트라-n-부틸암모늄)테트라시아노디페노퀴노디메탄, 2,5-디메틸-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄, 테트라시아노에틸렌, 11,11,12,12-테트라시아노나프토-2,6-퀴노디메탄, 2-플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄, 2,5-디플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄, 디시아노메틸렌-1,3,4,5,7,8-헥사플루오로-6H-나프탈렌-2-일리덴)말로노니트릴(F<sub>6</sub>-TNAP), Mo(tfd)<sub>3</sub>(문헌[Kahn et al., J. Am. Chem. Soc. 2009, 131 (35), 12530-12531] 기재), EP 1 988 587 및 EP 2 180 029에 언급된 화합물로부터 선택된 하나 이상의 화합물, 및 EP 09153776.1에 언급된 퀴는 화합물을 포함하는 혼합물이다.

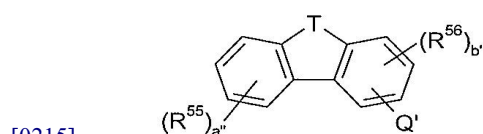
[0190] 본 발명의 OLED의 층(4)을 위한 적당한 전자 수송 물질은 옥시노이드 화합물로 킬레이트화된 금속, 예컨대 트리스(8-히드록시퀴놀레이토)알루미늄(Alq<sub>3</sub>), 페난트롤린 기재의 화합물, 예컨대 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(DDPA=BCP), 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(Bphen), 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(DPA) 또는 EP1786050 또는 EP1097981에 개시된 페난트롤린 유도체, 및 아졸 화합물, 예컨대 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD) 및 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-(4-t-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸(TAZ)을 포함한다. 층(4)은 OLED의 층의 계면에서 엑시톤의 켄칭을 막기 위해, 버퍼 층 또는 배리어 층으로서 작용할 뿐만 아니라 전자 수송을 용

이하에 할 수 있다. 층(4)은 바람직하게 전자의 이동성을 향상시키고 엑시톤의 켄칭을 감소시킨다.

- [0191] 마찬가지로, 전자 수송층 내 2개 이상의 층의 혼합물을 사용하는 것도 가능하고, 이 경우에 1종 이상의 물질은 전자 전도성을 가진다. 바람직하게는, 그러한 혼합 전자 수송층에서, 하나 이상의 페난트롤린 화합물이 사용된다. 더 바람직하게, 혼합 전자 수송층에서, 하나 이상의 페난트롤린 화합물에 부가하여, 알칼리 금속 히드록시퀴놀레이트 착체, 예를 들어 Liq가 사용된다. 또한, 전자 수송층의 전기 n-도핑을 초래하는 혼합물을 사용하는 것이 가능하다. n-도핑은 환원성 물질의 첨가에 의해 달성된다. 이 혼합물은, 예를 들어 상기 전자 수송 물질, 알칼리/알칼리성 토금속 또는 알칼리/알칼리성 토금속 염과의 혼합물, 예를 들어 Li, Cs, Ca, Sr,  $\text{Cs}_2\text{CO}_3$ , 알칼리 금속 착체과의 혼합물, 예를 들어 8-히드록시퀴놀레이토리튬(Liq), 및 Y, Ce, Sm, Gd, Tb, Er, Tm, Yb,  $\text{Li}_3\text{N}$ ,  $\text{Rb}_2\text{CO}_3$ , 프탈산이칼슘, EP 1786050의 W(hpp)<sub>4</sub>와의 혼합물, 또는 EP 1837926 B1에 기재된 화합물과의 혼합물일 수 있다.
- [0192] 따라서, 본 발명은 2종 이상의 상이한 물질(이 중 1종 이상의 물질은 전자 전도성이어야 함)을 포함하는 전자 수송층을 포함하는 본 발명의 OLED에 관한 것이다.
- [0193] 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 전자 수송층이 1종 이상의 페난트롤린 유도체를 포함하는 본 발명의 OLED에 관한 것이다.
- [0194] 추가의 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 전자 수송층이 1종 이상의 페난트롤린 유도체 및 1종 이상의 알칼리 금속 히드록시퀴놀레이트 착체를 포함하는 본 발명의 OLED에 관한 것이다.
- [0195] 추가의 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 전자 수송층이 1종 이상의 페난트롤린 유도체 및 8-히드록시퀴놀레이토리튬을 포함하는 본 발명의 OLED에 관한 것이다.
- [0196] 정공 수송 물질 및 전자 수송 물질로서의 상기 언급된 물질들 중 일부는 수가기 기능을 이행할 수 있다. 예를 들어, 그와 동시에 전자 수송 물질들 중 몇몇은 저지(lowlying) HOMO를 가질 경우 정공 차단 물질이다.
- [0197] 전자 수송층은 또한 사용된 물질의 수성 성질을 향상시키기 위해, 먼저 층 두께를 더 일반화하기 위해(핀홀/단회로 방지), 또한 두 번째로는 장치의 작동 전압을 최소화하기 위해, 전자적으로 도핑될 수도 있다. 정공 수송 물질은 예를 들어 전자 어셉터로 도핑될 수 있거나, 프탈로시아닌 또는 TPD 또는 TDTA와 같은 아릴아민은 각각 예를 들어 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄(F4-TCNQ)으로 도핑될 수 있다. 전자 도핑이 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어 문헌[W. Gao, A. Kahn, J. Appl. Phys., Vol. 94, No. 1, 1. July 2003 (p-도핑된 유기층); A. G. Werner, F. Li, K. Harada, M. Pfeiffer, T. Fritz, K. Leo, Appl. Phys. Lett., Vol. 82, No. 25, 23. June 2003, and Pfeiffer et al., Organic Electronics 2003, 4, 89 - 103 and K. Walzer, B. Maennig, M. Pfeiffer, K. Leo, Chem. Soc. Rev. 2007, 107, 1233]에 개시되어 있다.
- [0198] 음극(5)은 전자 또는 음전하 캐리어를 도입하는 작용을 하는 전극이다. 음극은 양극보다 낮은 일 함수를 가지는 임의의 금속 또는 비금속일 수 있다. 음극에 적당한 물질은 회토류 금속, 및 란타늄 및 악티늄을 포함하는, 제1족의 알칼리 금속, 예를 들어 Li, Cs, 제2족의 알칼리성 토금속, 및 제12족의 금속류로 이루어진 군으로부터 선택된다. 또한, 알루미늄, 인듐, 칼슘, 바륨, 사마륨 및 마그네슘과 같은 금속류, 및 이들의 조합이 사용될 수 있다. 또한, 8-히드록시퀴놀레이토리튬(Liq) 또는 LiF와 같은 리튬 함유의 유기금속성 화합물, 또는 하기 화합물( $\text{Cs}_2\text{CO}_3$ , KF, CsF 또는 NaF) 중 하나 이상을, 작동 전압을 감소시키기 위해 전자 주입 층으로서 유기층과 음극 사이에 적용할 수 있다.
- [0199] 본 발명의 OLED는 당업자에게 공지된 추가 층을 부가적으로 포함할 수 있다. 예를 들어, 양 전하의 수송을 용이하게 하고/하거나 층들 상호 간의 밴드 갭을 매칭하는 층이 층(2)과 발광층(3) 사이에 적용될 수 있다. 대안적으로, 이 추가 층은 보호층으로서 작용할 수 있다. 한 유사 방식으로, 부가적 층은 음 전하의 수송을 용이하게 하고/하거나 층들 상호 간의 밴드 갭을 매칭하기 위해 발광층(3)과 층(4) 간에 존재할 수 있다. 대안적으로, 이 층은 보호 층으로 작용할 수 있다.
- [0200] 바람직한 실시양태에서, 본 발명의 OLED는 층 (1) 내지 (5)에 부가하여 하기 언급된 추가 층들 중 하나 이상을 포함할 수 있다:
- [0201] - 양극(1)과 정공 수송층(2) 사이의 정공 주입 층;
- [0202] - 정공 수송층(2)과 발광층(3) 사이의 전자에 대한 차단 층;

- [0203] - 발광층(3)과 전자 수송층(4) 사이의 정공에 대한 차단 층;
- [0204] - 전자 수송층(4) 및 음극(5) 사이의 전자 주입 층.
- [0205] 그러나 상기 이미 언급된 바와 같이, OLED가 상기 층 (1) 내지 (5) 모두를 가지지 않는 것도 가능하고; 예를 들어, 층(1) (양극), (3) (발광층) 및 (5) (음극)을 포함하는 OLED도 마찬가지로 적당하고, 이 경우에 층(2) (정공 수송층) 및 (4) (전자 수송층)의 기능은 층 결합에 의해 나타나게 된다. 층 (1), (2), (3) 및 (5) 또는 층 (1), (3), (4) 및 (5)을 가지는 OLED도 마찬가지로 적당하다.
- [0206] 당업자는 적당한 물질을 선별하는 방법(예를 들어 전기화학 검토에 기초한 선별)을 알고 있다. 개별 층에 적당한 물질이 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어 WO 00/70655에 개시되어 있다.
- [0207] 또한, 층(1), (2), (3), (4) 및 (5) 중 몇몇 또는 모두는 전하 캐리어 수송의 효율을 증가시키기 위해 표면 처리를 해두는 것도 가능하다. 상기 각각의 층에 대한 물질의 선택은 바람직하게 높은 효율을 가지는 OLED를 수득함으로써 결정된다.
- [0208] 본 발명의 OLED는 당업자에게 공지된 방법에 의해 생성될 수 있다. 일반적으로, OLED는 개별 층을 적당한 기판에 연속 증착시킴으로써 생성된다. 적당한 기판은, 예를 들어 유리, ITO 또는 IZO와 같은 무기 물질, 또는 중합체 필름이다. 증착을 위해, 통상의 기법, 예컨대 열 증발, 화학 증착(CVO), 물리 증착(PVO) 및 기타 기법을 사용할 수 있다.
- [0209] 대체 방법에서, 유기 층은 적당한 용매 중의 용액 또는 분산액으로부터 코팅될 수 있고, 이 경우에 당업자에 공지된 코팅 기법이 이용된다.
- [0210] 적당한 코팅 기법은, 예를 들어 스핀-코팅, 캐스팅법, 랭뮤어-블로젯(Langmuir-Blodgett)("LB")법, 잉크젯 인쇄법, 딥-코팅, 활판 인쇄, 스크린 인쇄, 닥터 블레이드 인쇄, 롤러 인쇄, 리버스 롤러 인쇄, 오프셋 석판술 인쇄, 프렉소(flexographic) 인쇄, 웹 인쇄, 분무 인쇄, 브러쉬에 의한 코팅 또는 패드 인쇄 등이다. 상기 방법들 중, 상기 증착에 부가하여, 스핀-코팅, 잉크젯 인쇄법 및 캐스팅법이 특히 수행하기가 단순하고 저렴하여 바람직하다. OLED의 층이 스핀 코팅법, 캐스팅법 또는 잉크젯 인쇄법에 의해 수득되는 경우, 코팅은, 조성물을 적당한 유기 용매, 예컨대 벤젠, 톨루엔, 자일렌, 테트라히드로푸란, 메틸테트라히드로푸란, N,N-디메틸포름아미드, 아세톤, 아세토니트릴, 아니올, 디클로로메탄, 디메틸 술폰, 물 및 이들의 혼합물 중에 0.0001 내지 90 중량%의 농도로 용해시킴으로써 제조되는 용액을 이용하여 수득될 수 있다.
- [0211] 또한, OLED의 모든 층들이 동일한 코팅 기법으로 제조되는 것도 가능하다. 또한, OLED의 층을 생성하는 데 2가지 이상의 코팅 기법을 수행하는 것도 가능하다.
- [0212] 일반적으로, 상이한 층들은 하기 두께를 가진다: 양극(2) 500 내지 5000 Å, 바람직하게는 1000 내지 2000 Å (옹스트롬); 정공 수송층(3) 50 내지 1000 Å, 바람직하게는 200 내지 800 Å; 발광층(4) 10 내지 1000 Å, 바람직하게는 100 내지 800 Å; 전자 수송층(5) 50 내지 1000 Å, 바람직하게는 200 내지 800 Å; 음극(6) 200 내지 10000 Å, 바람직하게는 300 내지 5000 Å. 본 발명의 OLED 내 정공 및 전자의 재조합 구역의 위치 및 이에 따른 OLED의 방출 스펙트럼은 각 층의 상대 두께에 의해 영향을 받을 수 있다. 이는, 전자 수송층의 두께가 바람직하게 전자/정공 재조합 구역이 발광층 내에 있도록 선택되어야 함을 의미한다. OLED 내의 개별 층의 층 두께의 비는 사용된 물질에 의존한다. 사용된 임의의 부가적 층의 층 두께는 당업자에게 공지되어 있다.
- [0213] 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 또한 하나 이상의 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체, 및 하나 이상의 화학식 (X)의 화합물을 포함하는 OLED에 관한 것이다:

[0214] [화학식 X]

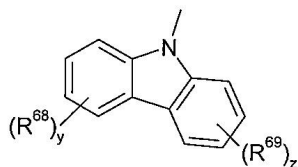


[0216] (식 중,

[0217] T는 NR<sup>57</sup>, S, O 또는 PR<sup>57</sup>, 바람직하게는 S 또는 O, 더 바람직하게는 O이고;

[0218]  $R^{57}$ 은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며;

[0219]  $Q'$ 은  $-NR^{58,59}$ ,  $-P(O)R^{60,61}$ ,  $-PR^{62,63}$ ,  $-S(O)_2R^{64}$ ,  $-S(O)R^{65}$ ,  $-SR^{66}$  또는  $-OR^{67}$ , 바람직하게는  $-NR^{58,59}$ 이고; 더 바람직하게는



[0220]

[0221] (식 중,

[0222]  $R^{68}$  및  $R^{69}$ 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴; 바람직하게는 메틸, 카바졸릴, 디벤조푸릴 또는 디벤조티에닐이고;

[0223]  $y$  및  $z$ 는 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0 또는 1임)이고;

[0224]  $R^{55}$  및  $R^{56}$ 은 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴,  $SiR^{70,71,72}$ ,  $Q'$ 기, 또는 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기이고;

[0225]  $a''$ 는 0, 1, 2, 3 또는 4이며;

[0226]  $b'$ 는 0, 1, 2 또는 3이고;

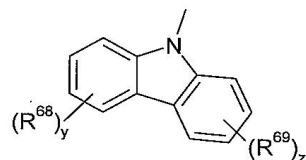
[0227]  $R^{58}$ ,  $R^{59}$ 는 질소 원자와 함께, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지고, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고/있거나, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지는 1개 이상의 추가의 환식 라디칼에 축합될 수 있는 환식 라디칼을 형성하고(여기서, 축합 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있음);

[0228]  $R^{70}$ ,  $R^{71}$ ,  $R^{72}$ ,  $R^{60}$ ,  $R^{61}$ ,  $R^{62}$ ,  $R^{63}$ ,  $R^{64}$ ,  $R^{65}$ ,  $R^{66}$  및  $R^{67}$ 은 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이거나,

[0229] 화학식 (X)의 2개의 단위는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재된 선형 또는 분지형, 포화 또는 불포화 브릿지; 결합; 또는 0에 의해, 브릿지된다.

[0230]  $T$ 는 S 또는 0, 바람직하게는 0이고,

[0231]  $Q'$ 는



[0232]

[0233] (식 중,  $R^{68}$  및  $R^{69}$ 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴; 바람직하게는 메틸, 카바졸릴, 디벤조푸릴 또는 디벤조티에닐이고;

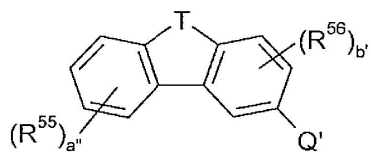
[0234]  $y$  및  $z$ 는 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0 또는 1임)인,

[0235] 화학식 (X)의 화합물이 바람직하다.

[0236] 특히 바람직한 화학식 (X)의 화합물은 하기 화학식 (Xa)을 가진다:



[0237] [화학식 Xa]

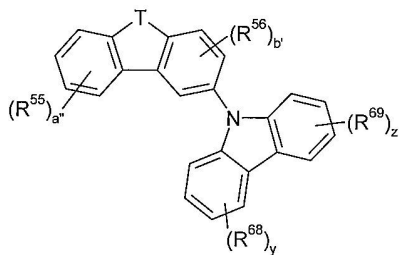


[0238]

[0239] (식 중, 기호 및 지수 Q', T, R<sup>55</sup>, R<sup>56</sup>, a'' 및 b'는 각각 상기 정의된 바와 같다).

[0240] 매우 특히 바람직한 화학식 (X)의 화합물은 화학식 (Xaa)을 가진다:

[0241] [화학식 Xaa]



[0242]

[0243] (식 중, 기호 및 지수 R<sup>68</sup>, R<sup>69</sup>, y, z, T, R<sup>55</sup>, R<sup>56</sup>, a'' 및 b'는 각각 상기 정의된 바와 같다).

[0244] 매우 특히 바람직한 실시양태에서, 화학식 (Xaa)에서:

[0245] T는 0 또는 S, 바람직하게는 0이고;

[0246] a''는 1이고;

[0247] b'는 0이며;

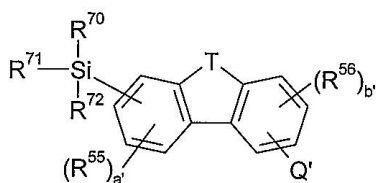
[0248] y 및 z는 각각 독립적으로 0 또는 1이고;

[0249] R<sup>68</sup> 및 R<sup>69</sup>는 각각 독립적으로 메틸, 카바졸릴, 디벤조푸릴 또는 디벤조티에닐이고;

[0250] R<sup>55</sup>은 치환 페닐, 카바졸릴, 디벤조푸릴 또는 디벤조티에닐이다.

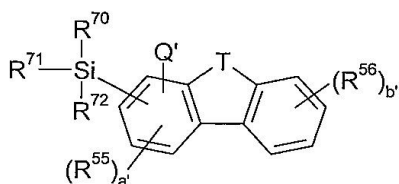
[0251] 추가의 바람직한 실시양태에서, 화학식 (X)의 화합물은 화학식 (XI) 또는 (XI\*)을 가진다:

[0252] [화학식 XI]



[0253]

[0254] [화학식 XI\*]



[0255]

[0256] (식 중,

- [0257] T는  $\text{NR}^{57}$ , S, O 또는  $\text{PR}^{57}$  이고;
- [0258]  $\text{R}^{57}$  은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며;
- [0259]  $\text{Q}'$  은  $-\text{NR}^{58,59}$ ,  $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{60,61}$ ,  $-\text{PR}^{62,63}$ ,  $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{64}$ ,  $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{65}$ ,  $-\text{SR}^{66}$  또는  $-\text{OR}^{67}$  이며;
- [0260]  $\text{R}^{70}$ ,  $\text{R}^{71}$  및  $\text{R}^{72}$  는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬(여기서,  $\text{R}^{70}$ ,  $\text{R}^{71}$ ,  $\text{R}^{72}$  라디칼 중 1개 이상은 2개 이상의 탄소 원자 또는  $\text{OR}^{73}$  를 포함함)이고,
- [0261]  $\text{R}^{55}$  및  $\text{R}^{56}$  은 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, Q 기, 또는 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기이고;
- [0262]  $a'$  및  $b'$  는 화학식 (XI)의 화합물의 경우는 각각 독립적으로 0, 1, 2 또는 3이고; 화학식  $(\text{XI})^*$ 의 화합물의 경우는,  $a'$  는 0, 1, 2이고,  $b'$  는 0, 1, 2, 3 또는 4이며;
- [0263]  $\text{R}^{58}$  과  $\text{R}^{59}$  는, 질소 원자와 함께, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지고, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고/있거나, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지는 1개 이상의 추가의 환식 라디칼에 축합될 수 있는 환식 라디칼을 형성하고(여기서, 축합 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있음);
- [0264]  $\text{R}^{73}$  은 각각 독립적으로  $\text{OR}^{77}$  기로 임의로 치환된,  $\text{SiR}^{74,75,76}$ , 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이고,
- [0265]  $\text{R}^{77}$  은 각각 독립적으로  $\text{SiR}^{74,75,76}$ , 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며,
- [0266]  $\text{R}^{60}$ ,  $\text{R}^{61}$ ,  $\text{R}^{62}$ ,  $\text{R}^{63}$ ,  $\text{R}^{64}$ ,  $\text{R}^{65}$ ,  $\text{R}^{66}$ ,  $\text{R}^{67}$ ,  $\text{R}^{74}$ ,  $\text{R}^{75}$  및  $\text{R}^{76}$  은 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이거나,
- [0267] 화학식 (XI) 및/또는  $(\text{XI})^*$ 의 2개의 단위는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재된 선형 또는 분지형, 포화 또는 불포화 브릿지; 결합; 또는 0에 의해, 브릿지되고, 여기서 화학식 (XI) 및/또는  $(\text{XI})^*$ 에서의 상기 브릿지는 각각의 경우  $\text{R}^{71}$  대신에 수소 원자에 부착된다.
- [0268] 화학식 (X)의 화합물은 바람직하게 에미터로서 작용하게 되는, 청구한 이중 리간드 착체와 조합되어, 매트릭스(회색 물질), 정공/엑시톤 차단제, 전자/엑시톤 차단제, 전자 수송 물질 또는 정공 수송 물질로서 사용될 수 있다. 하나 이상의 화학식 (X)의 화합물 및 화학식 (I)의 화합물을 모두 포함하는 본 발명의 OLED는 특히 양호한 효율 및 수명을 나타낸다. 화학식 (X)의 화합물이 사용되는 기능에 따라, 그것은 순수 형태로 또는 상이한 혼합 비율로 존재한다. 특히 바람직한 실시양태에서, 하나 이상의 화학식 (X)의 화합물은 발광층에서 매트릭스 물질로서 사용된다.
- [0269] 화학식 (X)의 화합물, 특히  $\text{R}^{55}$  내지  $\text{R}^{77}$  라디칼에 대해:
- [0270] 아릴 라디칼 또는 기, 헤테로아릴 라디칼 또는 기, 알킬 라디칼 또는 기, 시클로알킬 라디칼 또는 기, 헤테로시클로알킬 라디칼 또는 기, 알케닐 라디칼 또는 기, 알키닐 라디칼 또는 기, 및 도너 및/또는 어셉터 작용을 가지는 기란 용어들은 각각 하기와 같이 정의된다:
- [0271] 아릴 라디칼 (또는 기)은 방향족 고리 또는 복수개의 축합 방향족 고리로부터 형성되는, 6개 내지 30개의 탄소 원자, 바람직하게는 6 내지 18개의 탄소 원자를 가지는 기본 골격을 가지는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 적당한 기본 골격은, 예를 들어 페닐, 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 인데닐 또는 플루오레닐이다. 이 기본 골격은 비치환될 수 있거나(이는 치환 가능한 모든 탄소 원자가 수소 원자를 가짐을 의미함), 기본 골격의 1개, 1개 초과 또는 모두의 치환 가능한 위치에서 치환될 수 있다.
- [0272] 적당한 치환기는, 예를 들어 중수소, 알콕시 라디칼, 아릴옥시 라디칼, 알킬아미노 기, 아릴아미노 기, 카바졸

릴 기, 실릴 기,  $\text{SiR}^{78, 79, 80} \text{R}^{\text{R}}$  (적당한 실릴 기  $\text{SiR}^{78, 79, 80}$  은 이하에 명시되어 있음), 알킬 라디칼, 바람직하게는 1 내지 8개의 탄소 원자를 가지는 알킬 라디칼, 더 바람직하게는 메틸, 에틸 또는 i-프로필, 아릴 라디칼, 바람직하게는  $\text{C}_6$ -아릴 라디칼(이는 치환 또는 비치환될 수 있음), 헤테로아릴 라디칼, 바람직하게는 하나 이상의 질소 원자를 포함하는 헤테로아릴 라디칼, 더 바람직하게는 피리딜 라디칼 및 카바졸릴 라디칼, 알케닐 라디칼, 바람직하게는 1개의 이중 결합을 가지는 알케닐 라디칼, 더 바람직하게는 1개의 이중 결합 및 1 내지 8개의 탄소 원자를 가지는 알케닐 라디칼, 알키닐 라디칼, 바람직하게는 1개의 삼중 결합을 가지는 알키닐 라디칼, 더 바람직하게는 1개의 삼중 결합 및 1 내지 8개의 탄소 원자를 가지는 알키닐 라디칼, 또는 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기이다. 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 적당한 기가 이하에 명시되어 있다. 치환된 아릴 라디칼은 가장 바람직하게 메틸, 에틸, 이소프로필, 알콕시, 헤테로아릴, 할로젠, 유사 할로젠 및 아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 치환기를 가지고, 바람직하게는 아릴아미노를 가진다. 아릴 라디칼 또는 아릴 기는 바람직하게  $\text{C}_6$ - $\text{C}_{18}$ -아릴 라디칼, 더 바람직하게는  $\text{C}_6$ -아릴 라디칼(이는 상기 치환기들 중 1개 이상 또는 1개 초과에 의해 임의로 치환됨)이다.  $\text{C}_6$ - $\text{C}_{18}$ -아릴 라디칼, 바람직하게는  $\text{C}_6$ -아릴 라디칼은 더 바람직하게 상기 치환기들 중 0개 1개, 2개, 3개 또는 4개를 가지고, 가장 바람직하게는 0개, 1개 또는 2개를 가진다.

[0273] 헤테로아릴 라디칼 또는 헤테로아릴 기는, 아릴 라디칼의 기본 골격 내 하나 이상의 탄소 원자가 이중 원자로 치환되고 헤테로아릴 라디칼의 기본 골격이 바람직하게 5개 내지 18개의 고리 원자를 가진다는 점에서, 상기 아릴 라디칼과 상이한 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 바람직한 이중 원자는 N, O 및 S이다. 특히 바람직하고 적당한 헤테로아릴 라디칼은 질소-함유의 헤테로아릴 라디칼이다. 가장 바람직하게는, 기본 골격의 1개 또는 2개의 탄소 원자가 이중 원자, 바람직하게는 질소로 치환된다. 기본 골격은 특히 바람직하게 피리딘, 피리미딘 및 5-원 이중방향족물, 예컨대 피롤, 푸란, 피라졸, 이미다졸, 티오펜, 옥사졸, 티아졸 및 트리아졸로부터 선택된다. 또한, 헤테로아릴 라디칼은 축합된 고리 시스템, 예를 들어 벤조푸릴, 벤조티에닐, 벤조피롤릴, 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 페난트롤리닐, 카바졸릴 라디칼, 아자카바졸릴 라디칼 또는 디아자카바졸릴 라디칼일 수 있다. 기본 골격은 기본 골격의 1개, 1개 초과 또는 모두의 치환 가능한 위치에서 치환될 수 있다. 적당한 치환기는 아릴 기에 대해 기재된 것과 동일하다.

[0274] 알킬 라디칼 또는 알킬 기는 1개 내지 20개의 탄소 원자, 바람직하게는 1개 내지 10개의 탄소 원자, 더 바람직하게는 1 내지 8개, 가장 바람직하게는 1 내지 4 개의 탄소 원자를 가지는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 이 알킬 라디칼은 분지형 또는 비분지형일 수 있고, 1개 이상의 이중 원자, 바람직하게는 Si, N, O 또는 S, 더 바람직하게는 N, O 또는 S가 임의로 개입될 수 있다. 또한, 이 알킬 라디칼은 아릴 기에 대해 기재된 치환기들 중 하나 이상에 의해 치환될 수 있다. 또한, 본 발명에 따라 존재하는 알킬 라디칼은 하나 이상의 할로젠 원자, 예를 들어 F, Cl, Br 또는 I, 특히 F를 가질 수 있다. 추가의 실시양태에서, 본 발명에 따라 존재하는 알킬 라디칼은 완전 불화될 수 있다. 마찬가지로, 알킬 라디칼이 하나 이상의 (헤테로)아릴 기를 가지는 것도 가능하다. 따라서, 본원의 맥락에서, 예를 들어 벤질 라디칼은 치환 알킬 라디칼이다. 이러한 맥락에서, 상기 열거된 (헤테로)아릴 기들 모두가 적당하다. 알킬 라디칼은 더 바람직하게 메틸, 에틸, 이소프로필, n-프로필, n-부틸, iso-부틸 및 tert-부틸로 이루어진 군으로부터 선택되고, 메틸 및 에틸이 매우 특히 바람직하다.

[0275] 시클로알킬 라디칼 또는 시클로알킬 기는 3개 내지 20개의 탄소 원자, 바람직하게는 3개 내지 10개의 탄소 원자, 더 바람직하게는 3 내지 8개의 탄소 원자를 가지는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 이 기본 골격은 비치환될 수 있거나(이는 치환 가능한 모든 탄소 원자들이 수소 원자를 가짐을 의미함), 기본 골격의 1개, 1개 초과 또는 모두의 치환 가능한 위치에서 치환될 수 있다. 적당한 치환기는 아릴 기에 대해 이미 상기 언급된 기이다. 마찬가지로 시클로알킬 라디칼이 하나 이상의 (헤테로)아릴 기를 가지는 것도 가능하다. 적당한 시클로알킬 라디칼의 예는 시클로프로필, 시클로펜틸 및 시클로헥실이다.

[0276] 헤테로시클로알킬 라디칼 또는 헤테로시클로알킬 기는 시클로알킬 라디칼의 기본 골격 내 하나 이상의 탄소 원자가 이중 원자에 의해 치환된 점에서, 상기 시클로알킬 라디칼과 상이한 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 바람직한 이중 원자는 N, O 및 S이다. 가장 바람직하게는 시클로알킬 라디칼의 기본 골격의 1 또는 2개의 탄소 원자가 이중 원자에 의해 치환된다. 적당한 헤테로시클로알킬 라디칼의 예는 피롤리딘, 피페리딘, 피페라진, 테트라히드로푸란 및 디옥산으로부터 유도된 라디칼이다.

[0277] 알케닐 라디칼 또는 알케닐 기는, 알킬 라디칼의 하나 이상의 C-C 단일 결합이 C-C 이중 결합으로 치환된다는 차이를 가지는, 2개 이상의 탄소 원자를 가지는 상기 알킬 라디칼에 상응하는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 알케닐 라디칼은 바람직하게 1 또는 2개의 이중 결합을 가진다.

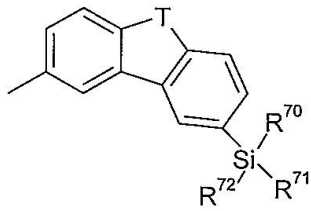


- [0278] 알킬 라디칼 또는 알킬 기는, 알킬 라디칼의 하나 이상의 C-C 단일 결합이 C-C 삼중 결합으로 치환된다는 차이를 가지는 2개 이상의 탄소 원자를 가지는 상기 알킬 라디칼에 상응하는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 알킬 라디칼은 바람직하게 1 또는 2개의 삼중 결합을 가진다.
- [0279]  $\text{SiR}^{78}\text{R}^{79}\text{R}^{80}$  기는,  $\text{R}^{78}$ ,  $\text{R}^{79}$  및  $\text{R}^{80}$ 이 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는  $\text{OR}^{73}$ 인 실릴 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0280]  $\text{SiR}^{74}\text{R}^{75}\text{R}^{76}$  기는  $\text{R}^{74}$ ,  $\text{R}^{75}$  및  $\text{R}^{76}$ 이 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는  $\text{OR}^{73}$ 인 실릴 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0281] 본원의 맥락에서, 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기 또는 치환기는 하기 기들을 의미하는 것으로 이해된다:
- [0282] 도너 작용을 가지는 기는 +I 및/또는 +M 효과를 가지는 기를 의미하는 것으로 이해되고, 어셉터 작용을 가지는 기는 -I 및/또는 -M 효과를 가지는 기를 의미하는 것으로 이해된다. 바람직한 적당한 기는  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알콕시,  $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴옥시,  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬티오,  $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴티오,  $\text{SiR}^{81}\text{R}^{82}\text{R}^{83}$ ,  $\text{OR}^{73}$ , 할로젠 라디칼, 할로젠화  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 라디칼, 카르보닐( $-\text{CO}(\text{R}^{81})$ ), 카르보닐티오( $-\text{C}=\text{O}(\text{SR}^{81})$ ), 카르보닐옥시( $-\text{C}=\text{O}(\text{OR}^{81})$ ), 옥시카르보닐( $-\text{OC}=\text{O}(\text{R}^{81})$ ), 티오퀴르보닐( $-\text{SC}=\text{O}(\text{R}^{81})$ ), 아미노( $-\text{NR}^{81}\text{R}^{82}$ ), 유사 할로젠 라디칼, 아미도( $-\text{C}=\text{O}(\text{NR}^{81})$ ),  $-\text{NR}^{81}\text{C}=\text{O}(\text{R}^{83})$ , 포스포네이트( $-\text{P}(\text{O})(\text{OR}^{81})_2$ ), 포스페이트( $-\text{OP}(\text{O})(\text{OR}^{81})_2$ ), 포스핀( $-\text{PR}^{81}\text{R}^{82}$ ), 포스핀 옥시드( $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{81}_2$ ), 술페이트( $-\text{OS}(\text{O})_2\text{OR}^{81}$ ), 술폭시드( $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{81}$ ), 술포네이트( $-\text{S}(\text{O})_2\text{OR}^{81}$ ), 술포닐( $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{81}$ ), 술폰아미드( $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^{81}\text{R}^{82}$ ),  $\text{NO}_2$ , 보론산 에스테르( $-\text{OB}(\text{OR}^{81})_2$ ), 이미노( $-\text{C}=\text{NR}^{81}\text{R}^{82}$ ), 보란 라디칼, 스타난 라디칼, 히드라진 라디칼, 히드라존 라디칼, 옥심 라디칼, 니트로소 기, 디아조 기, 비닐 기, 술폭시민, 알란, 제르만, 보록심 및 보라진으로부터 선택된다.
- [0283] 상기 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기에서 언급된  $\text{R}^{81}$ ,  $\text{R}^{82}$  및  $\text{R}^{83}$  라디칼은 각각 독립적으로 이하와 같다:
- [0284] 치환 또는 비치환  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 또는 치환 또는 비치환  $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴, 또는  $\text{OR}^{76}$ , 상기 기재된 적당하고 바람직한 알킬 및 아릴 라디칼.  $\text{R}^{81}$ ,  $\text{R}^{82}$  및  $\text{R}^{83}$  라디칼은 더 바람직하게는  $\text{C}_1\text{-C}_6$ -알킬, 예를 들어 메틸, 에틸 또는 i-프로필, 또는 페닐이다. 바람직한 실시양태에서,  $\text{SiR}^{81}\text{R}^{82}\text{R}^{83}$ 의 경우,  $\text{R}^{81}$ ,  $\text{R}^{82}$  및  $\text{R}^{83}$ 은 바람직하게 각각 독립적으로 치환 또는 비치환  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 또는 치환 또는 비치환 아릴, 바람직하게는 페닐이다.
- [0285] 바람직한 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 치환기는 이하의 것들로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0286]  $\text{C}_1\text{-}$  내지  $\text{C}_{20}$ -알콕시, 바람직하게는  $\text{C}_1\text{-C}_6$ -알콕시, 더 바람직하게는 에톡시 또는 메톡시;  $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴옥시, 바람직하게는  $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ -아릴옥시, 더 바람직하게는 페닐옥시;  $\text{SiR}^{81}\text{R}^{82}\text{R}^{83}$ (여기서,  $\text{R}^{81}$ ,  $\text{R}^{82}$  및  $\text{R}^{83}$ 은 바람직하게 각각 독립적으로 치환 또는 비치환 알킬 또는 치환 또는 비치환 아릴, 바람직하게는 페닐이고; 더 바람직하게는,  $\text{R}^{81}$ ,  $\text{R}^{82}$  및  $\text{R}^{83}$  라디칼 중 1개 이상은 치환 또는 비치환 페닐(적당한 치환기는 상기 명시됨)이며; 할로젠 라디칼, 바람직하게는 F, Cl, 더 바람직하게는 F, 할로젠화  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 라디칼, 바람직하게는 할로젠화  $\text{C}_1\text{-C}_6$ -알킬 라디칼, 가장 바람직하게는 불화  $\text{C}_1\text{-C}_6$ -알킬 라디칼, 예를 들어  $\text{CF}_3$ ,  $\text{CH}_2\text{F}$ ,  $\text{CHF}_2$  또는  $\text{C}_2\text{F}_5$ ; 아미노, 바람직하게는 디메틸아미노, 디에틸아미노 또는 디아릴아미노, 더 바람직하게는 디아릴아미노; 유사 할로젠 라디칼, 바람직하게는 CN,  $-\text{C}(\text{O})\text{OC}_1\text{-C}_4$ -알킬, 바람직하게는  $-\text{C}(\text{O})\text{OMe}$ ,  $\text{P}(\text{O})\text{R}_2$ , 바람직하게는  $\text{P}(\text{O})\text{Ph}_2$ 이다.
- [0287] 매우 특히 바람직한 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 치환기는 메톡시, 페닐옥시, 할로젠화  $\text{C}_1\text{-C}_4$ -알킬, 바람직하게는  $\text{CF}_3$ ,  $\text{CH}_2\text{F}$ ,  $\text{CHF}_2$ ,  $\text{C}_2\text{F}_5$ , 할로젠, 바람직하게는 F, CN,  $\text{SiR}^{81}\text{R}^{82}\text{R}^{83}$ (여기서, 적당한  $\text{R}^{81}$ ,  $\text{R}^{82}$  및  $\text{R}^{83}$  라디칼은 이미 명시됨), 디아릴아미노( $\text{NR}^{84}\text{R}^{85}$ , 여기서  $\text{R}^{84}$  및  $\text{R}^{85}$ 은 각각  $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴임),  $-\text{C}(\text{O})\text{OC}_1\text{-C}_4$ -알킬, 바람직하게는  $-\text{C}(\text{O})\text{OMe}$ ,  $\text{P}(\text{O})\text{Ph}_2$ 로 이루어진 군으로부터 선택된다.

- [0288] 할로젠 기는 바람직하게 F, Cl 및 Br, 더 바람직하게는 F 및 Cl, 가장 바람직하게는 F를 의미하는 것으로 이해된다.
- [0289] 유사 할로젠 기는 바람직하게 CN, SCN 및 OCN, 더 바람직하게는 CN을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0290] 상기 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기는 본원에 언급되나 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기의 상기 목록에 포함되지 않은 추가 라디칼 및 치환기가 도너 또는 어셉터 작용을 가질 가능성을 배제하지 않는다.
- [0291] 아릴 라디칼 또는 기, 헤테로아릴 라디칼 또는 기, 알킬 라디칼 또는 기, 시클로알킬 라디칼 또는 기, 헤테로시클로알킬 라디칼 또는 기, 알케닐 라디칼 또는 기 및 도너 및/또는 어셉터 작용을 가지는 기는 상기 언급된 바와 같이, 치환 또는 비치환될 수 있다. 본원의 맥락에서, 비치환된 기는 기의 치환 가능한 원자가 수소 원자를 가지는 기를 의미하는 것으로 이해된다. 본원의 맥락에서, 치환 기는 하나 이상의 치환 가능한 원자(들)는 하나 이상의 위치에서 수소 원자 대신에 치환기를 가지는 기를 의미하는 것으로 이해된다. 적당한 치환기는 아릴 라디칼 또는 기에 대해 상기 기재된 치환기이다.
- [0292] 동일한 넘버링을 가지는 라디칼이 본원에 따른 화합물 내에 1회 초과 나타날 때, 이들 라디칼은 각각 독립적으로 기재된 정의를 가질 수 있다.
- [0293] 화학식 (X)의 화합물 내의 T 라디칼은  $\text{NR}^{57}$ , S, O 또는  $\text{PR}^{57}$ , 바람직하게는  $\text{NR}^{57}$ , S 또는 O, 더 바람직하게는 O 또는 S, 가장 바람직하게는 O이다.
- [0294]  $\text{R}^{57}$  라디칼은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 바람직하게는 아릴, 헤테로아릴 또는 알킬, 더 바람직하게는 아릴이고, 여기서 상기 라디칼은 비치환 또는 치환될 수 있다. 적당한 치환기는 상기 명시되어 있다.  $\text{R}^{65}$ 은 더 바람직하게 상기 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있는 페닐이다.  $\text{R}^{57}$ 은 가장 바람직하게 비치환 페닐이다.
- [0295] 화학식 (X)의 화합물 내의 Q' 기는  $-\text{NR}^{58,59}$ ,  $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{60,61}$ ,  $-\text{PR}^{62,63}$ ,  $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{64}$ ,  $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{65}$ ,  $-\text{SR}^{66}$  또는  $-\text{OR}^{67}$ ; 바람직하게는  $\text{NR}^{58,59}$ ,  $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{60,61}$  또는  $-\text{OR}^{67}$ , 더 바람직하게는  $-\text{NR}^{58,59}$ 이다.
- [0296]  $\text{R}^{58}$  내지  $\text{R}^{67}$  및  $\text{R}^{74}$  내지  $\text{R}^{76}$  라디칼은 각각 하기와 같이 정의된다:
- [0297]  $\text{R}^{58}$ 과  $\text{R}^{59}$ 는, 질소 원자와 함께, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지고, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고/있거나, 3개 내지 10개의 고리 원자를 가지는 1개 이상의 추가의 환식 라디칼에 축합될 수 있는 환식 라디칼을 형성하고(여기서, 축합 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있음);
- [0298]  $\text{R}^{60}$ ,  $\text{R}^{61}$ ,  $\text{R}^{61}$ ,  $\text{R}^{62}$ ,  $\text{R}^{63}$ ,  $\text{R}^{64}$ ,  $\text{R}^{65}$ ,  $\text{R}^{66}$ ,  $\text{R}^{67}$ ,  $\text{R}^{74}$ ,  $\text{R}^{75}$  및  $\text{R}^{76}$ 은 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 바람직하게는 아릴 또는 헤테로아릴이고, 여기서 라디칼은 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택된 라디칼들 중 하나 이상, 더 바람직하게는 비치환 또는 치환 페닐에 의해 치환될 수 있고(여기서, 적당한 치환기는 상기 명시됨), 예를 들어 톨릴 또는 하기 화학식의 기이다:



- [0299]
- [0300] (식 중, T 기 및  $\text{R}^{70}$ ,  $\text{R}^{71}$  및  $\text{R}^{72}$  라디칼은 각각 독립적으로 화학식 (XI) 또는 (XI<sup>\*</sup>)의 화합물에 대해 정의된 바와 같다).
- [0301]  $\text{R}^{60}$ ,  $\text{R}^{61}$ ,  $\text{R}^{61}$ ,  $\text{R}^{62}$ ,  $\text{R}^{63}$ ,  $\text{R}^{64}$ ,  $\text{R}^{65}$ ,  $\text{R}^{66}$  및  $\text{R}^{67}$ 은 가장 바람직하게 각각 독립적으로 페닐, 톨릴 또는 하기 화학식의 기이다:



[0302]

[0303]

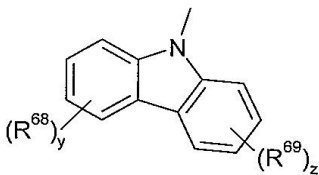
(식 중, T는 NPh, S 또는 O임).

[0304]

바람직하고 적당한  $-NR^{58}R^{59}$  기의 예는 피롤릴, 2,5-디히드로-1-피롤릴, 피롤리디닐, 인돌릴, 인돌리닐, 이소인돌리닐, 카바졸릴, 아자카바졸릴, 디아자카바졸릴, 이미다졸릴, 이미다졸리닐, 벤즈이미다졸릴, 피라졸릴, 인다졸릴, 1,2,3-트리아졸릴, 벤조트리아졸릴, 1,2,4-트리아졸릴, 테트라졸릴, 1,3-옥사졸릴, 1,3-티아졸릴, 피페리딜, 모르폴리닐, 9,10-디히드로아크리디닐 및 1,4-옥사지닐로 이루어진 군으로부터 선택되고(여기서, 상기 기는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있음);  $-NR^{67}$  기는 바람직하게 카바졸릴, 피롤릴, 인돌릴, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 아자카바졸릴 및 디아자카바졸릴로부터 선택되고(여기서, 상기 기는 비치환되거나, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환될 수 있음);  $-NR^{58}R^{59}$  기는 더 바람직하게 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있는 카바졸릴이다.

[0305]

특히 바람직한  $-NR^{58}R^{59}$  기는 이하의 것:



[0306]

[0307]

(식 중,

[0308]

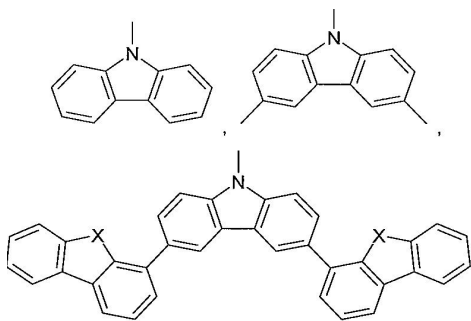
$R^{68}$  및  $R^{69}$  는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴; 바람직하게는 메틸, 카바졸릴, 디벤조푸릴 또는 디벤조티에닐이고;

[0309]

y 및 z는 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0 또는 1임)이고;

[0310]

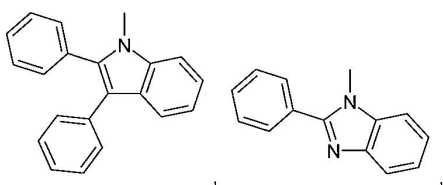
예를 들어 이하의 것들이다:



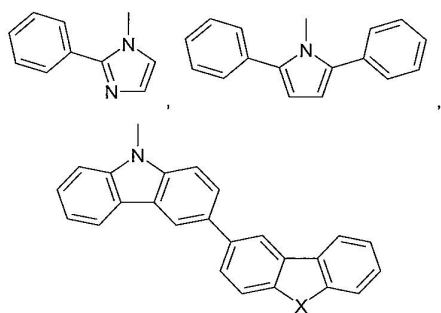
[0311]

[0312]

(식 중, X는 NPh, S 또는 O임);

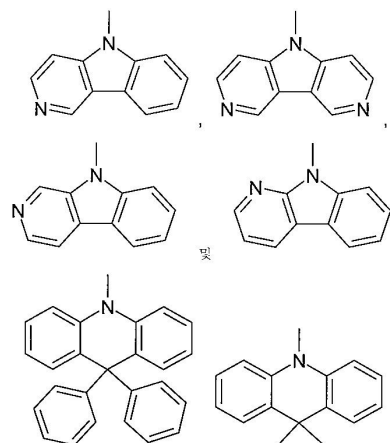


[0313]



[0314]

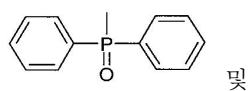
[0315] (식 중, X는 NPh, S 또는 O임)



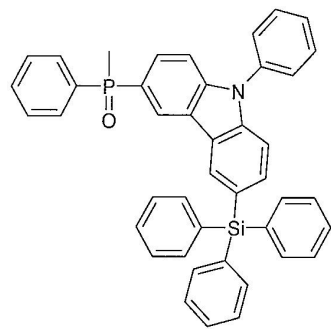
[0316]

[0317] 특히 바람직한  $-P(O)R^{60}R^{61}$  기는 이하의 것이다:

[0318]

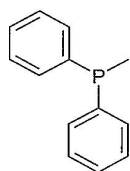


[0319]



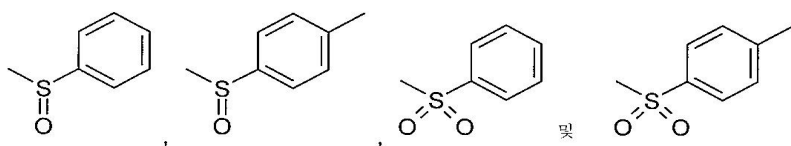
[0320] 특히 바람직한  $PR^{62}R^{63}$  기는 이하의 것이다:

[0321]

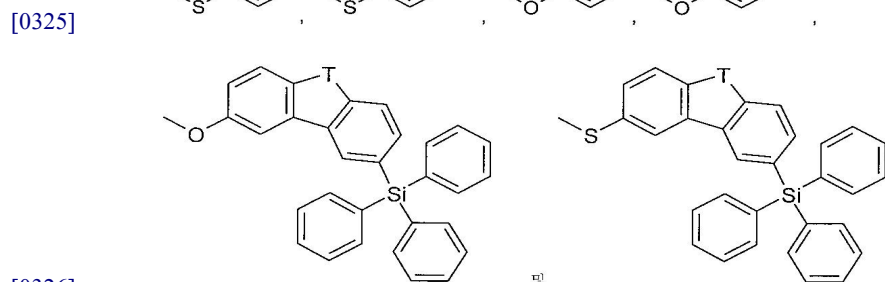


[0322] 특히 바람직한 기  $-S(O)_2R^{64}$  및  $-S(O)R^{65}$  는 이하의 것이다:

[0323]

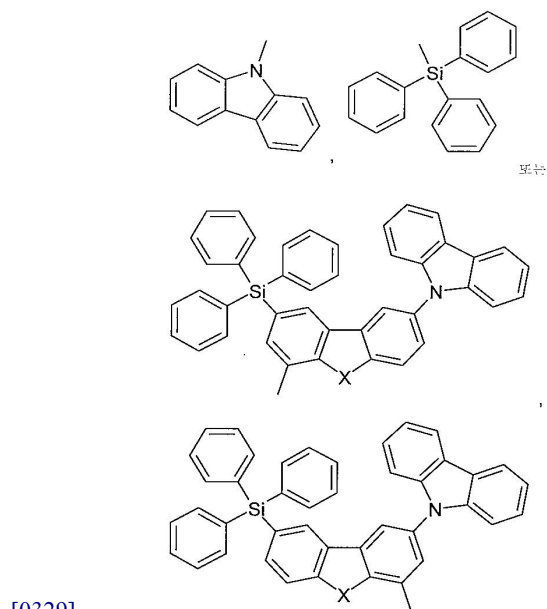


[0324] 특히 바람직한 기  $-SR^{66}$  및  $-OR^{67}$  은 이하의 것이다:



[0327] (식 중, T는 각각의 경우 NPh, S 또는 O임).

[0328] 화학식 (X)의 화합물에서의  $R^{55}$  및  $R^{56}$  은 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 추가의 A 기, 또는 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기이고; 바람직하게 각각 독립적으로 알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는 도너 또는 어셉터 작용을 가지는 기이다. 예를 들어,  $R^{55}$  또는  $R^{56}$  은 각각 독립적으로 이하의 것일 수 있다:



[0330] (식 중, X는 NPh, S 또는 O임).

[0331] 화학식 (X)의 화합물에서,  $a'' R^{55}$  기 및/또는  $b' R^{56}$  기가 존재할 수 있고, 여기서  $a''$  및  $b'$ 는 이하와 같다:

[0332]  $a''$ 는 0, 1, 2, 3 또는 4이고; 바람직하게는 독립적으로 0, 1 또는 2이며;

[0333]  $b'$ 는 0, 1, 2 또는 3이고; 바람직하게는 독립적으로 0, 1 또는 2이다.

[0334] 가장 바람직하게, 적어도  $a''$  또는  $b'$ 는 0이고, 매우 특히 바람직하게  $a''$  및  $b'$ 는 각각 0이거나  $a''$ 는 1이고  $b'$ 는 0이다.

[0335] 화학식 (XI)의 화합물에서의  $R^{73}$  은 일반적으로 독립적으로  $OR^{77}$  기에 의해 임의로 치환된,  $SiR^{74}R^{75}R^{76}$ , 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이다.

[0336] 화학식 (XI)의 화합물에서의  $R^{77}$  은 일반적으로 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이다.

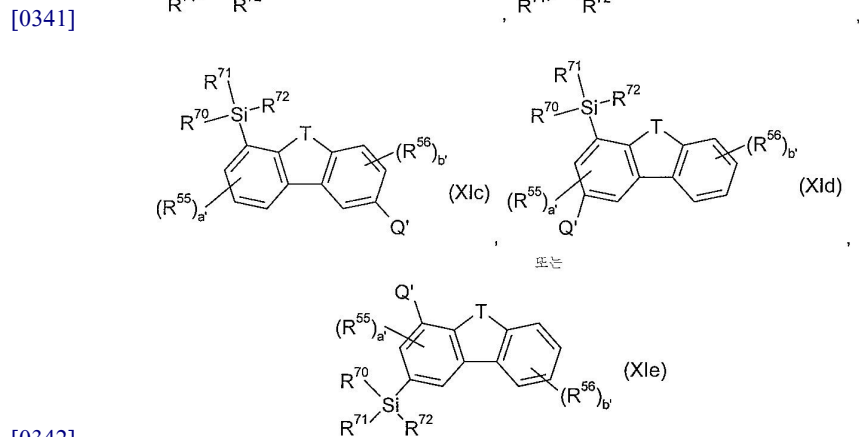
[0337] 임의로 존재하는  $OR^{77}$  치환기는 일반적으로 당업자에게 적당한 것으로 보이는 모든 부위에 상기 라디칼 내에 존

재할 수 있다.

[0338] 추가의 실시양태에서, 화학식 (XI) 및/또는 (XI<sup>\*</sup>)의 2개의 단위는 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재된 선형 또는 분지형, 포화 또는 불포화 브릿지를 통해 또는 0를 통해 브릿지되고, 여기서 화학식 (XI) 및/또는 (XI<sup>\*</sup>) 내 이 브릿지는 각각의 경우 R<sup>71</sup> 대신에 규소 원자에 부착된다.

[0339] 이 브릿지는 바람직하게 -CH<sub>2</sub>-, -C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-, -C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>-, -C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>-, -C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>-, -C<sub>8</sub>H<sub>16</sub>-, -C<sub>9</sub>H<sub>18</sub>-, -CH(C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>)CH<sub>2</sub>-, -C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>(CF<sub>2</sub>)<sub>8</sub>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-, -C≡C-, -1,4-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-페닐-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, 1,3-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-페닐-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, -1,4-페닐-, -1,3-페닐-, -O-, -O-Si(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-O-, -O-Si(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-O-Si(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-O- 및 -O-로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0340] 본원의 바람직한 실시양태에서, 화학식 (X)의 화합물은 화학식 (XIa), (XIb), (XIc), (XI<sub>d</sub>) 또는 (XIe)을 가지고, 즉 이들은 화학식 (XI) 또는 (XI<sup>\*</sup>)의 화합물의 바람직한 실시양태이다:



[0342]

[0343] (식 중, Q', T, R<sup>70</sup>, R<sup>71</sup>, R<sup>72</sup>, R<sup>55</sup>, R<sup>58</sup> 라디칼 및 기, 및 a' 및 b'는 각각 상기 정의된 바와 같다).

[0344] 본 발명에 따라 바람직한 또 다른 실시양태에서, 화학식 (XI) 또는 (XI<sup>\*</sup>)의 화합물 내의 R<sup>70</sup>, R<sup>71</sup> 또는 R<sup>72</sup>는 하기 화학식 (XIi) 및/또는 (XIi<sup>\*</sup>)의 방향족 단위이다:

[0345] [화학식 XIi]

[0346]

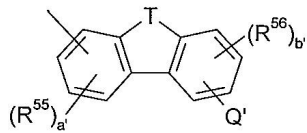
[0347] [화학식 XIi<sup>\*</sup>]

[0348]

[0349] (식 중, R<sup>55</sup>, R<sup>58</sup>, Q', T, a' 및 b'는 각각 상기 정의된 바와 같다).

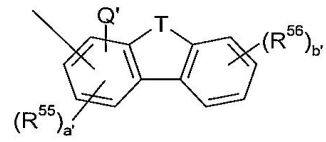
[0350] 그러므로, 본 발명은 한 실시양태에서, 화학식 (XI) 또는 (XI<sup>\*</sup>)의 화합물 내 R<sup>70</sup>, R<sup>71</sup> 또는 R<sup>72</sup>가 화학식 (XIi) 및/또는 (XIi<sup>\*</sup>)의 방향족 단위인 본 발명의 OLED에 관한 것이다:

[0351] [화학식 XIi]



[0352]

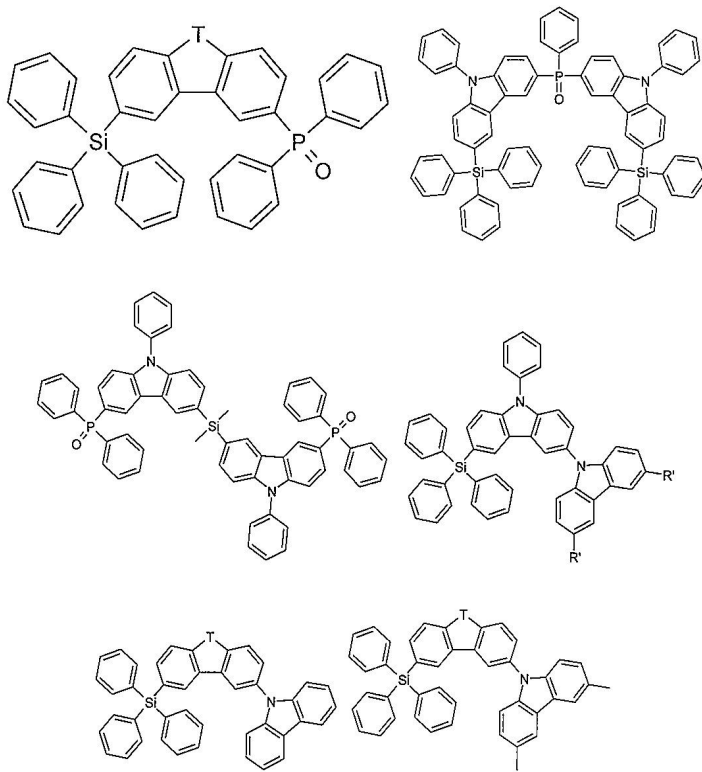
[0353] [화학식 XIi\*]



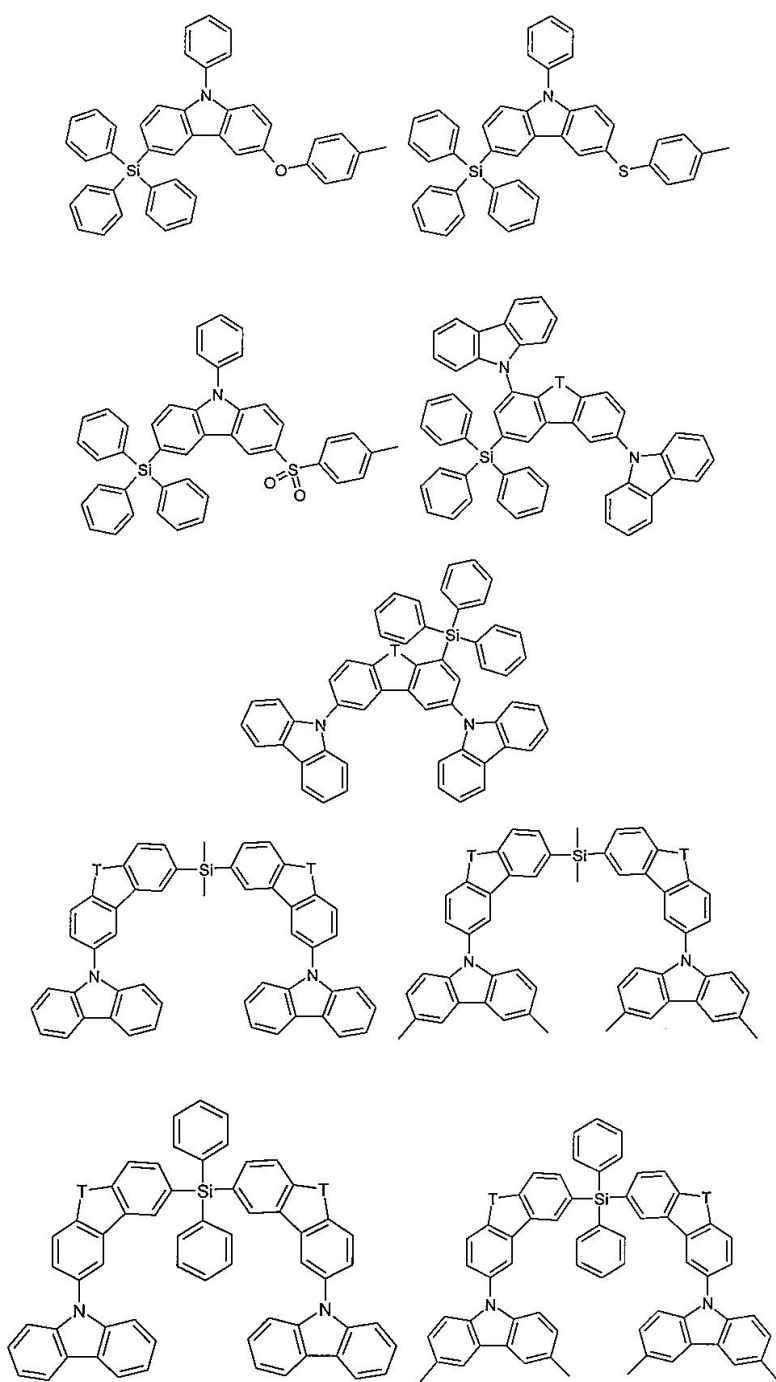
[0354]

[0355] (식 중,  $R^{56}$ ,  $R^{56}$ ,  $Q'$ ,  $T$ ,  $a'$  및  $b'$ 는 각각 상기 정의된 바와 같다).

[0356] 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 화학식 (XI) 또는 (XI\*)의 화합물이 하기 군으로부터 선택되는 OLED에 관한 것이다:

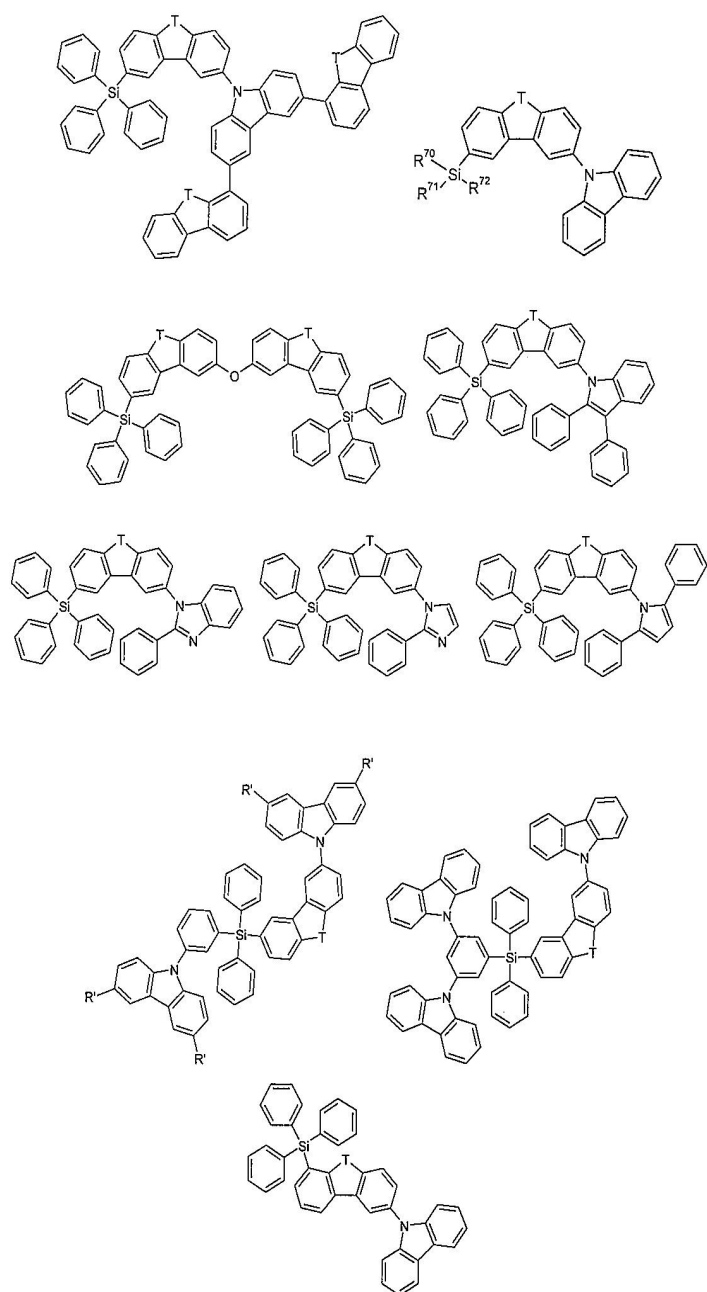


[0357]

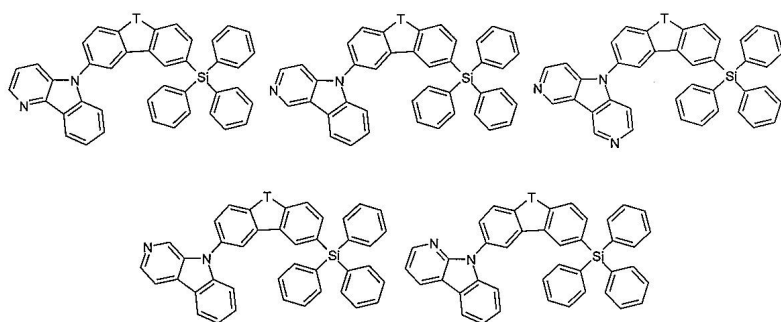
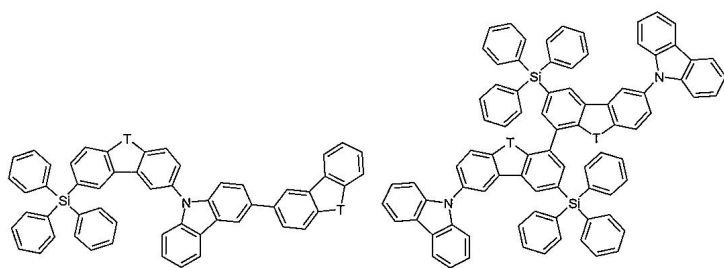
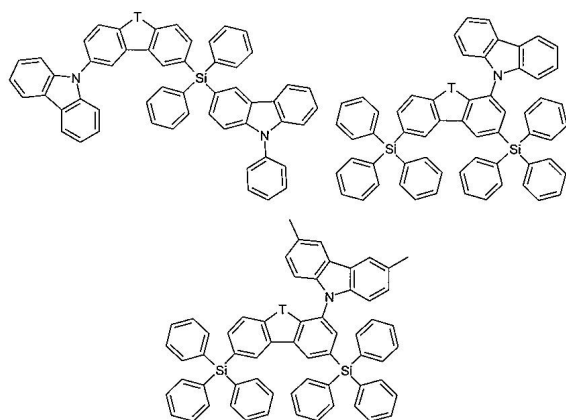


[0358]

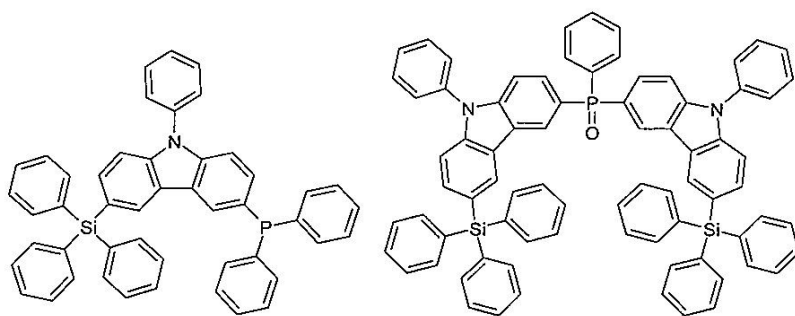




[0359]



[0360]



[0361]

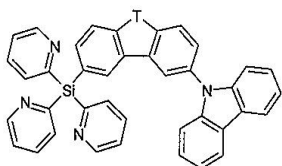
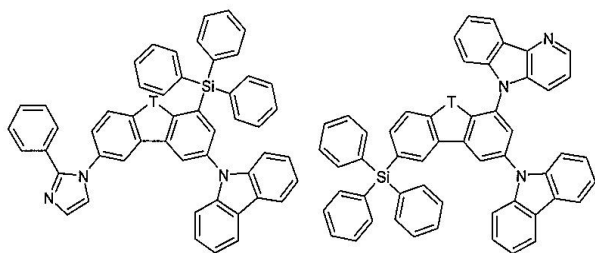
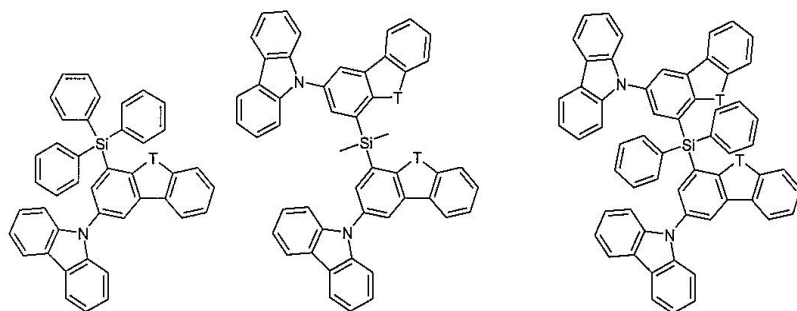
[0362] 화학식 (XI) 또는 (XI<sup>\*</sup>)의 이 특히 바람직한 화합물에서:

[0363] T는 S 또는 O이고,

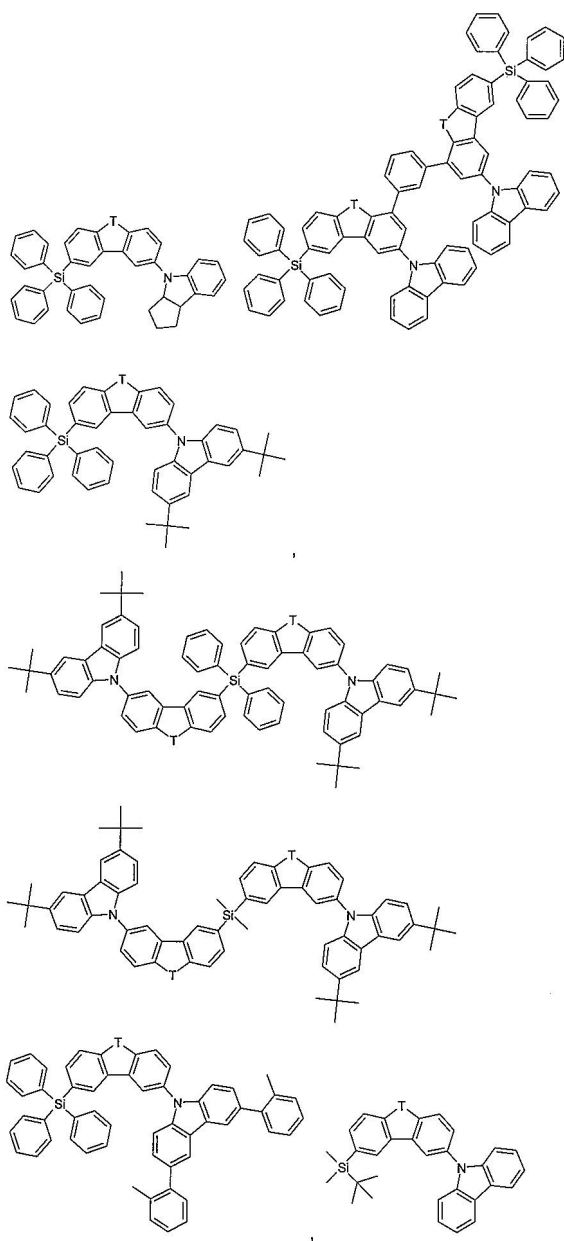
[0364] R<sup>1</sup>은 H 또는 CH<sub>3</sub>이며;

[0365] R<sup>70</sup>, R<sup>71</sup> 및 R<sup>72</sup>는 각각 페닐, 카바졸릴, 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜이다.

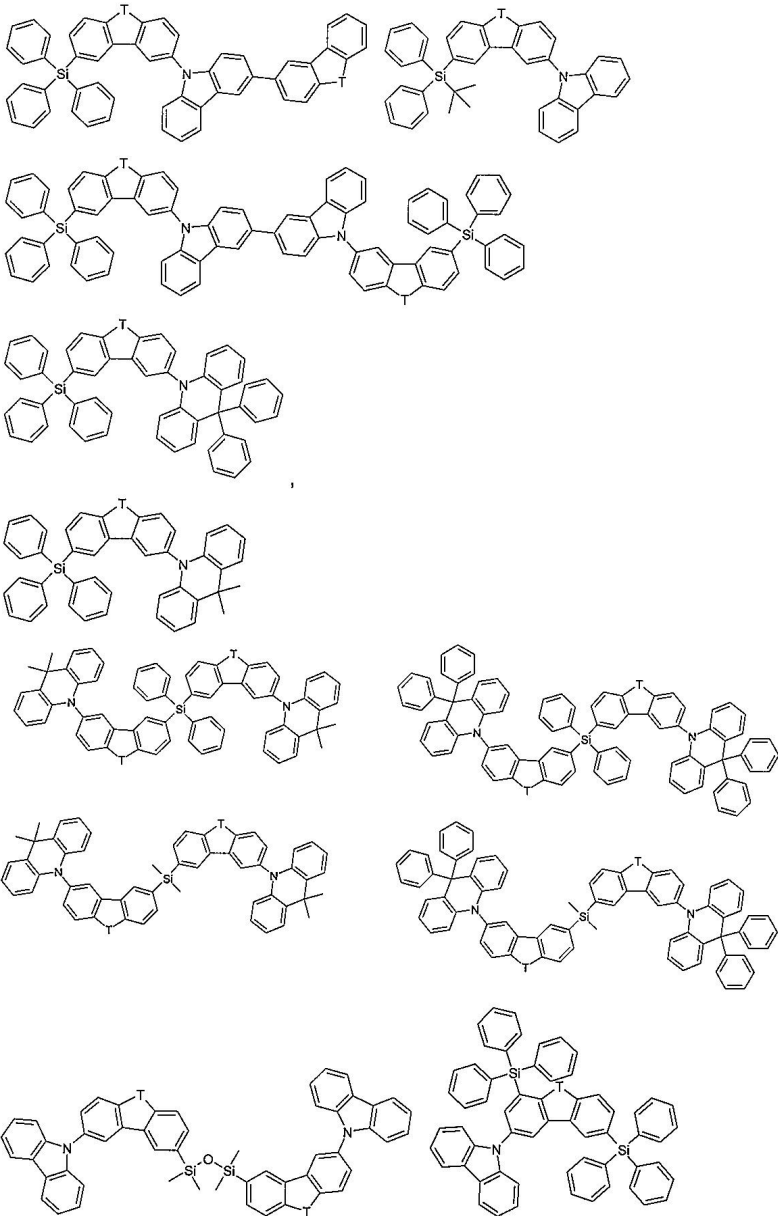
[0366] 추가의 특히 적당한 화학식 (XI) 또는 (XI\*)의 화합물은 이하의 것이다:



[0367]



[0368]



[0369]

[0370]

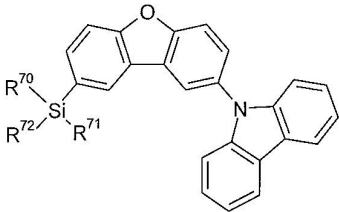
[0371]

[0372]

화학식 (XI) 또는 (XI)의 이 특히 바람직한 화합물에서도, T는 O 또는 S, 바람직하게는 O이다.

화학식 (XI) 또는 (XI<sup>\*</sup>)의 추가의 본 발명의 화합물은 하기 화학식 (XII)에 상응한다:

[화학식 XII]



[0373]

[0374]

화학식 (XII)에서, R<sup>70</sup>, R<sup>71</sup> 및 R<sup>72</sup>는 각각 하기와 같이 정의된다:

표 2

[0375]

Nr	R <sup>70</sup>	R <sup>71</sup>	R <sup>72</sup>
1	메틸	메틸	에틸
2	메틸	메틸	i-프로필

3	메틸	메틸	n-프로필
4	메틸	메틸	n-부틸
5	메틸	메틸	i-부틸
6	메틸	메틸	t-부틸
7	메틸	메틸	n-펜틸
8	메틸	메틸	n-헥실
9	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>
10	메틸	메틸	n-C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>
11	메틸	메틸	i-C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>
12	메틸	메틸	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>
13	메틸	메틸	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>
16	메틸	메틸	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>
17	메틸	메틸	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>
19	메틸	메틸	시클로헥실
20	메틸	메틸	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> Ph
21	메틸	메틸	-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
22	메틸	메틸	-CCH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> )(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )
23	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH(C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> ) <sub>2</sub>
24	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH(C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> ) <sub>2</sub>
25	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> )CF <sub>3</sub>
26	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> )CF <sub>3</sub>
27	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> )CF <sub>3</sub>
29	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>

표 3

[0376]

30	메틸	메틸	페닐
31	메틸	메틸	2-비페닐
32	메틸	메틸	p-톨릴
33	메틸	메틸	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>
34	메틸	메틸	3,5-(cf <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 페닐
35	메틸	메틸	-ch <sub>2</sub> c(ch <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 페닐
36	메틸	메틸	9-플루오레닐
37	메틸	메틸	3,6-디(tert-부틸)-9-플루오레닐
15	메틸	메틸	R <sup>86</sup>
38	메틸	메틸	-OMe
39	메틸	메틸	-OEt
40	메틸	메틸	2,4,6-t-부틸페녹시
41	메틸	메틸	-O-tBu(tert-부톡시)
42	메틸	메틸	-OSiEt <sub>3</sub>
43	메틸	에틸	에틸
44	메틸	에틸	페닐
45	메틸	에틸	R <sup>86</sup>
46	메틸	n-프로필	n-프로필
47	메틸	n-프로필	페닐
48	메틸	n-프로필	R <sup>86</sup>
49	메틸	i-프로필	i-프로필

50	메틸	i-프로필	페닐
51	메틸	i-프로필	R <sup>86</sup>
52	메틸	n-부틸	n-프로필
53	메틸	n-부틸	페닐
54	메틸	n-부틸	R <sup>86</sup>
55	메틸	i-부틸	i-부틸
56	메틸	i-부틸	페닐
57	메틸	i-부틸	R <sup>86</sup>
58	메틸	t-부틸	t-부틸
59	메틸	t-부틸	페닐
60	메틸	t-부틸	R <sup>86</sup>
61	메틸	n-펜틸	n-펜틸
62	메틸	n-펜틸	n-헥실
63	메틸	n-펜틸	페닐
64	메틸	n-펜틸	R <sup>86</sup>
65	메틸	n-헥실	헥실
66	메틸	n-헥실	페닐
67	메틸	n-헥실	R <sup>86</sup>
68	메틸	n-헵틸	R <sup>86</sup>

표 4

[0377]

69	메틸	n-옥틸	R <sup>86</sup>
70	메틸	n-데실	R <sup>86</sup>
71	메틸	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	R <sup>86</sup>
72	메틸	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	R <sup>86</sup>
73	메틸	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	R <sup>86</sup>
74	메틸	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	R <sup>86</sup>
75	메틸	시클로펜틸	시클로펜틸
76	메틸	시클로펜틸	페닐
77	메틸	시클로펜틸	R <sup>86</sup>
78	메틸	시클로헥실	시클로헥실
79	메틸	시클로헥실	페닐
80	메틸	시클로헥실	R <sup>86</sup>
81	메틸	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	R <sup>86</sup>
82	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
83	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
84	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
85	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
86	메틸	페닐	페닐
87	메틸	페닐	p-톨릴
89	메틸	페닐	메시틸
90	메틸	페닐	R <sup>86</sup>
91	메틸	p-톨릴	p-톨릴

92	메틸	p-톨릴	R <sup>86</sup>
93	메틸	메시틸	메시틸
94	메틸	메시틸	R <sup>5</sup>
95	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
96	메틸	메톡시	메톡시
97	메틸	에톡시	에톡시
98	메틸	-OSiEt <sub>3</sub>	-OSiEt <sub>3</sub>
99	메틸	-O-SiMe <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-SiMe <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>
100	에틸	에틸	에틸
101	에틸	에틸	n-프로필
102	에틸	에틸	i-프로필
103	에틸	에틸	n-부틸
104	에틸	에틸	i-부틸
105	에틸	에틸	t-부틸
106	에틸	에틸	페닐
107	에틸	에틸	R <sup>5</sup>
108	에틸	페닐	페닐

표 5

[0378]

109	에틸	페닐	R <sup>86</sup>
110	에틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
111	에틸	에톡시	에톡시
112	n-프로필	n-프로필	n-프로필
113	n-프로필	n-프로필	페닐
114	n-프로필	n-프로필	R <sup>86</sup>
115	n-프로필	페닐	페닐
116	n-프로필	페닐	R <sup>86</sup>
117	n-프로필	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
118	i-프로필	i-프로필	i-프로필
119	i-프로필	i-프로필	페닐
120	i-프로필	i-프로필	R <sup>86</sup>
121	i-프로필	i-프로필	2-비페닐
122	i-프로필	i-프로필	에톡시
123	i-프로필	페닐	페닐
124	i-프로필	페닐	R <sup>86</sup>
125	i-프로필	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
126	n-부틸	n-부틸	n-부틸
127	n-부틸	n-부틸	페닐
128	n-부틸	n-부틸	R <sup>86</sup>
129	n-부틸	n-헥실	R <sup>86</sup>
130	n-부틸	페닐	페닐
131	n-부틸	페닐	R <sup>86</sup>
132	n-부틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
133	sec-부틸	sec-부틸	sec-부틸
134	sec-부틸	sec-부틸	페닐



135	sec-부틸	sec-부틸	R <sup>86</sup>
136	sec-부틸	페닐	페닐
137	sec-부틸	페닐	R <sup>86</sup>
138	sec-부틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
139	i-부틸	i-부틸	i-부틸
140	i-부틸	i-부틸	n-C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>
141	i-부틸	i-부틸	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>
142	i-부틸	i-부틸	페닐
143	i-부틸	i-부틸	R <sup>86</sup>
144	i-부틸	페닐	페닐
145	i-부틸	페닐	R <sup>86</sup>
146	i-부틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
147	t-부틸	t-부틸	t-부틸
148	t-부틸	t-부틸	n-C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>

표 6

[0379]

149	t-부틸	t-부틸	페닐
150	t-부틸	t-부틸	R <sup>86</sup>
151	t-부틸	페닐	페닐
152	t-부틸	페닐	R <sup>5</sup>
153	t-부틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
154	n-펜틸	n-펜틸	n-펜틸
155	n-펜틸	n-펜틸	페닐
156	n-펜틸	n-펜틸	R <sup>86</sup>
157	n-펜틸	페닐	페닐
158	n-펜틸	페닐	R <sup>86</sup>
159	n-펜틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
160	시클로펜틸	시클로펜틸	시클로펜틸
161	시클로펜틸	시클로펜틸	페닐
162	시클로펜틸	시클로펜틸	R <sup>86</sup>
163	시클로펜틸	페닐	페닐
164	시클로펜틸	페닐	R <sup>86</sup>
165	시클로펜틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
166	n-헥실	n-헥실	n-헥실
167	n-헥실	n-헥실	페닐
168	n-헥실	n-헥실	R <sup>86</sup>
169	n-헥실	페닐	페닐
170	n-헥실	페닐	R <sup>86</sup>
171	n-헥실	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
172	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>
173	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
174	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>

175	t-헥실	t-헥실	t-헥실
176	t-헥실	t-헥실	R <sup>86</sup>
177	t-헥실	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
178	n-헵틸	n-헵틸	n-헵틸
179	n-헵틸	n-헵틸	R <sup>86</sup>
180	n-헵틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
181	n-옥틸	n-옥틸	n-옥틸
182	n-옥틸	n-옥틸	R <sup>86</sup>
183	n-옥틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
184	i-옥틸	i-옥틸	i-옥틸
185	i-옥틸	i-옥틸	R <sup>86</sup>
186	i-옥틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
187	n-노닐	n-노닐	n-노닐
188	n-노닐	n-노닐	R <sup>86</sup>

표 7

[0380]

189	n-노닐	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
190	시클로헥실	시클로헥실	시클로헥실
191	시클로헥실	시클로헥실	R <sup>86</sup>
192	시클로헥실	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
193	시클로옥틸	시클로옥틸	시클로옥틸
194	시클로옥틸	시클로옥틸	R <sup>86</sup>
195	시클로옥틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
196	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>
197	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	R <sup>86</sup>
198	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
199	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>
200	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	R <sup>86</sup>
201	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
202	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>
203	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	R <sup>86</sup>
204	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
205	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>
206	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	R <sup>86</sup>
207	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
208	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>
209	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	R <sup>86</sup>
210	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
211	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	R <sup>86</sup>

212	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
213	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	OE <sub>t</sub>	OE <sub>t</sub>
214	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	R <sup>86</sup>	OMe
215	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>
216	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	R <sup>86</sup>
217	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
218	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>
219	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	R <sup>86</sup>
220	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
221	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>
222	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	R <sup>86</sup>
223	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
224	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>
225	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	R <sup>86</sup>
226	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
227	-CH <sub>2</sub> -시클로헥실	-CH <sub>2</sub> -시클로헥실	R <sup>86</sup>
228	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>

표 8

[0381]

229	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
230	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
231	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>
232	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
233	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
234	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>
235	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
236	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
237	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>
238	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
239	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
240	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>
241	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
242	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
243	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>
244	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>
245	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
246	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>

247	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	R <sup>86</sup>
248	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
249	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>
250	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	R <sup>86</sup>
251	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
14	페닐	페닐	페닐
252	페닐	페닐	p-톨릴
253	페닐	페닐	m-톨릴
254	페닐	페닐	o-톨릴
255	페닐	페닐	2-자일릴
256	페닐	페닐	5-자일릴
257	페닐	페닐	메시틸
258	페닐	페닐	9-플루오레닐
18	페닐	페닐	R <sup>86</sup>
259	페닐	페닐	-O-tBu(tert-부톡시)
260	페닐	p-톨릴	p-톨릴
261	페닐	m-톨릴	m-톨릴
262	페닐	o-톨릴	o-톨릴
263	페닐	2-자일릴	2-자일릴
264	페닐	5-자일릴	5-자일릴
265	페닐	메시틸	메시틸
266	페닐	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>

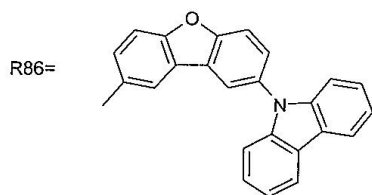
표 9

[0382]

267	페닐	에톡시	에톡시
268	p-톨릴	p-톨릴	p-톨릴
269	p-톨릴	p-톨릴	R <sup>86</sup>
270	p-톨릴	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
271	m-톨릴	m-톨릴	m-톨릴
272	m-톨릴	m-톨릴	R <sup>86</sup>
273	o-톨릴	o-톨릴	o-톨릴
274	o-톨릴	o-톨릴	R <sup>86</sup>
275	2-자일릴	2-자일릴	2-자일릴
276	2-자일릴	2-자일릴	R <sup>86</sup>
277	5-자일릴	5-자일릴	5-자일릴
278	5-자일릴	5-자일릴	R <sup>86</sup>
279	메시틸	메시틸	메시틸
280	메시틸	메시틸	R <sup>86</sup>
281	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>
282	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	R <sup>86</sup>
283	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
284	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>
285	R <sup>86</sup>	에톡시	에톡시
286	R <sup>86</sup>	n-부톡시	n-부톡시

287	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메톡시
288	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	에톡시
289	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	OSiMe <sub>3</sub>
290	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> O-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> OCH <sub>3</sub>
291	메톡시	메톡시	메톡시
292	에톡시	에톡시	에톡시
293	i-프로폭시	i-프로폭시	i-프로폭시
294	t-부톡시	t-부톡시	t-부톡시
295	OSiMe <sub>3</sub>	OSiMe <sub>3</sub>	OSiMe <sub>3</sub>
296	시클로부틸		메틸
297	시클로부틸		R <sup>86</sup>
298	시클로부틸		p-메톡시페닐
299	시클로펜틸		메틸
300	시클로펜틸		R <sup>86</sup>
301	시클로헥실		메틸
302	시클로헥실		R <sup>86</sup>

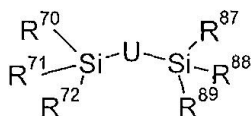
[0383] 이 표에서,



[0384] 이다.

[0385] 화학식 (XI) 및/또는 (XI<sup>\*</sup>)의 2개의 단위가 임의로 1개 이상의 이중 원자가 개재된 선형 또는 분지형, 포화 또는 불포화 브릿지, 또는 O를 통해 브릿지되(여기서, 화학식 (XI) 및/또는 (XI<sup>\*</sup>) 내의 이 브릿지는 각각의 경우 R<sup>71</sup> 대신에 규소 원자에 부착됨) 특히 바람직한 화합물은 화학식 (XIII)에 상응한다:

[0386] [화학식 XIII]



[0387]

[0388] 화학식 (XIII)에서, U, R<sup>70</sup>, R<sup>71</sup>, R<sup>72</sup>, R<sup>87</sup>, R<sup>88</sup> 및 R<sup>89</sup>는 각각 하기와 같이 정의된다:

표 10

[0389]

Nr	R <sup>70</sup>	R <sup>71</sup>	R <sup>72</sup>	R <sup>87</sup>	R <sup>88</sup>	R <sup>89</sup>	U
303	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>5</sup>	R <sup>86</sup>	-CH <sub>2</sub> -
304	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-CH <sub>2</sub> -
305	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-CH <sub>2</sub> -
306	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>5</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
307	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -

308	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
309	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> -
310	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> -
311	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> -
312	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -
313	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -
314	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -
315	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> -
316	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> -
317	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> -
318	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> -
319	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> -
320	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> -
321	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> -
322	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> -

표 11

[0390]

323	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> -
324	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-CH(C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> )CH <sub>2</sub> -
325	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
326	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
327	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
328	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C≡C-
329	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-C≡C-
330	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-C≡C-
331	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
332	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
333	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
334	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
335	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
336	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
337	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
338	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
339	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
340	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -

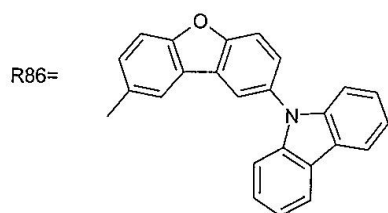
표 12

[0391]

341	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
342	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -페닐-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
343	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,4-페닐
344	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-1,4-페닐
345	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,4-페닐
346	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,3-페닐
347	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-1,3-페닐
348	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-1,3-페닐
28	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-O-
349	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	메틸	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-O-
350	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O-
351	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-O-Si(CH <sub>3</sub> )(Ph)-O-
352	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O-
353	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	메틸	메틸	R <sup>86</sup>	-O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O-
354	메틸	-OSiMe <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	메틸	-OSiMe <sub>3</sub>	R <sup>86</sup>	-O-
355	메틸	페닐	R <sup>86</sup>	메틸	페닐	R <sup>86</sup>	-O-
356	i-프로필	i-프로필	R <sup>86</sup>	i-프로필	i-프로필	R <sup>86</sup>	-O-
357	시클로펜틸	시클로펜틸	R <sup>86</sup>	시클로펜틸	시클로펜틸	R <sup>86</sup>	-O-
358	페닐	페닐	R <sup>86</sup>	페닐	페닐	R <sup>86</sup>	-O-
359	페닐	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	페닐	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-O-
340	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	R <sup>86</sup>	-O-

[0392]

이 표에서,

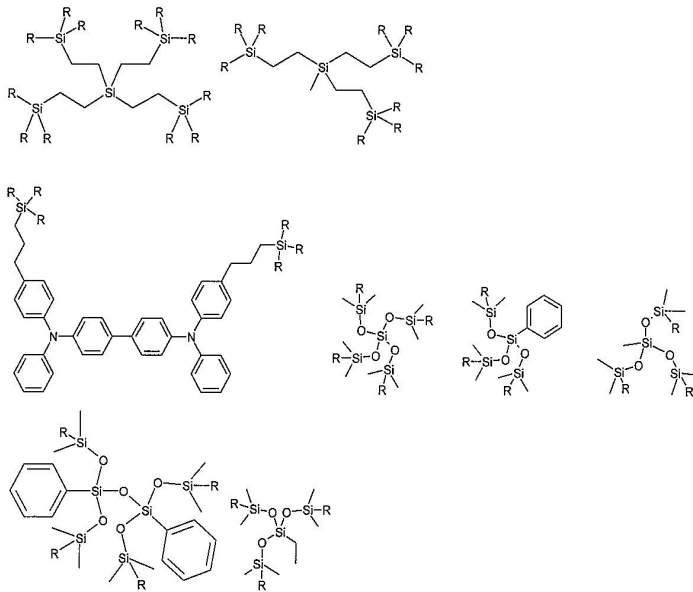


[0393]

이다.

[0394]

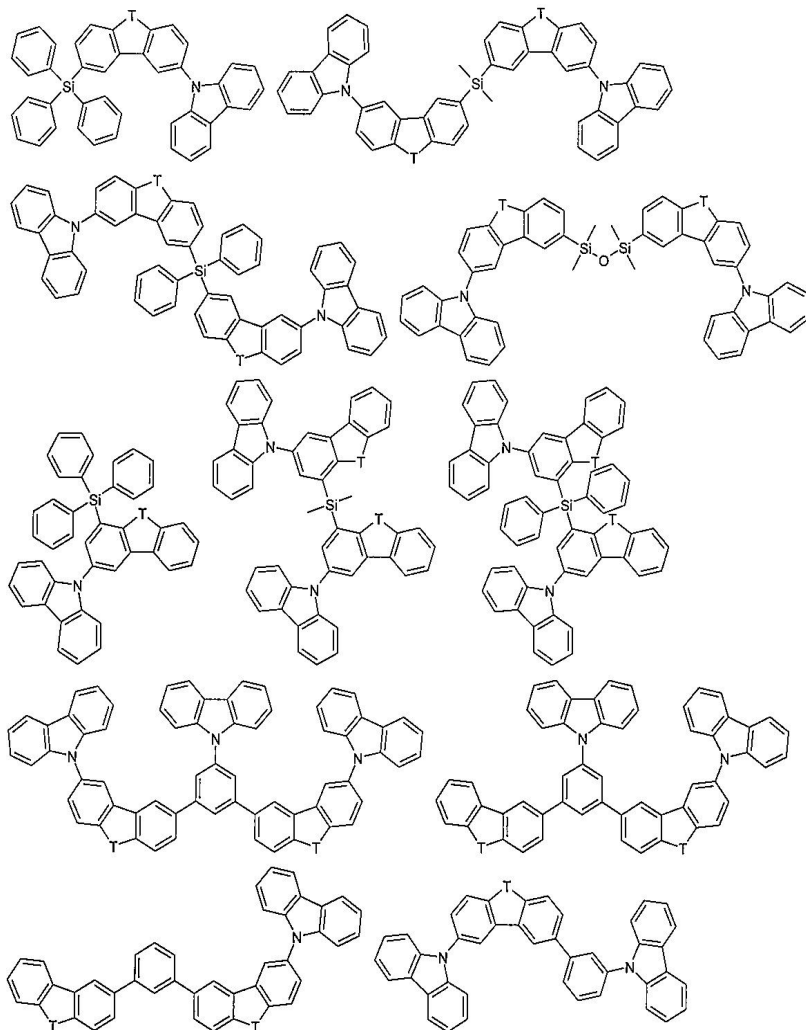
화학식 (XI) 및/또는 (XI<sup>\*</sup>)의 추가의 적당한 화합물은 이후 명시된다. 거기에서의 R은 독립적으로 Me, 페닐 또는 R<sup>86</sup>(여기서, 하나 이상의 R 라디칼은 R<sup>86</sup>임)이다:



[0395]

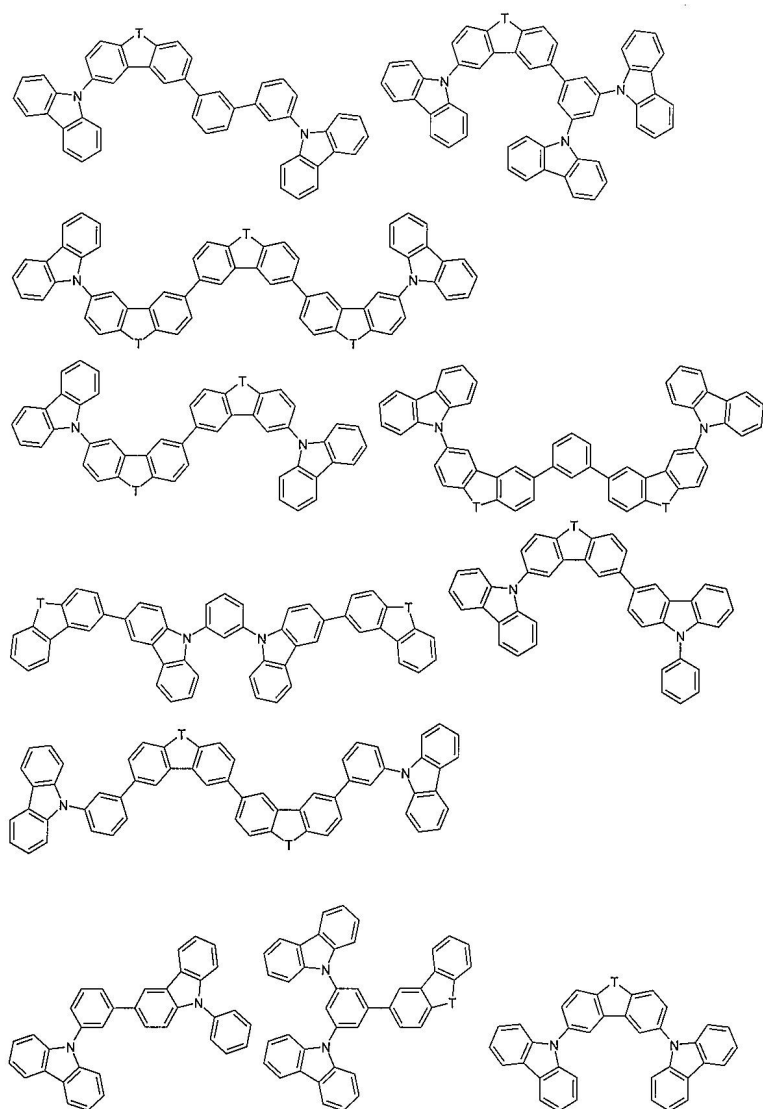
[0396]

매우 특히 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 하나 이상의 화학식 (I)의 금속-카르벤 착체뿐만 아니라, 하나 이상의 화학식 (X)의 화합물을 함유하는 OLED에 관한 것으로, 이 경우에 화학식 (X)의 화합물은 가장 바람직하게 이하 기재된 화합물들 중 하나 이상이다:

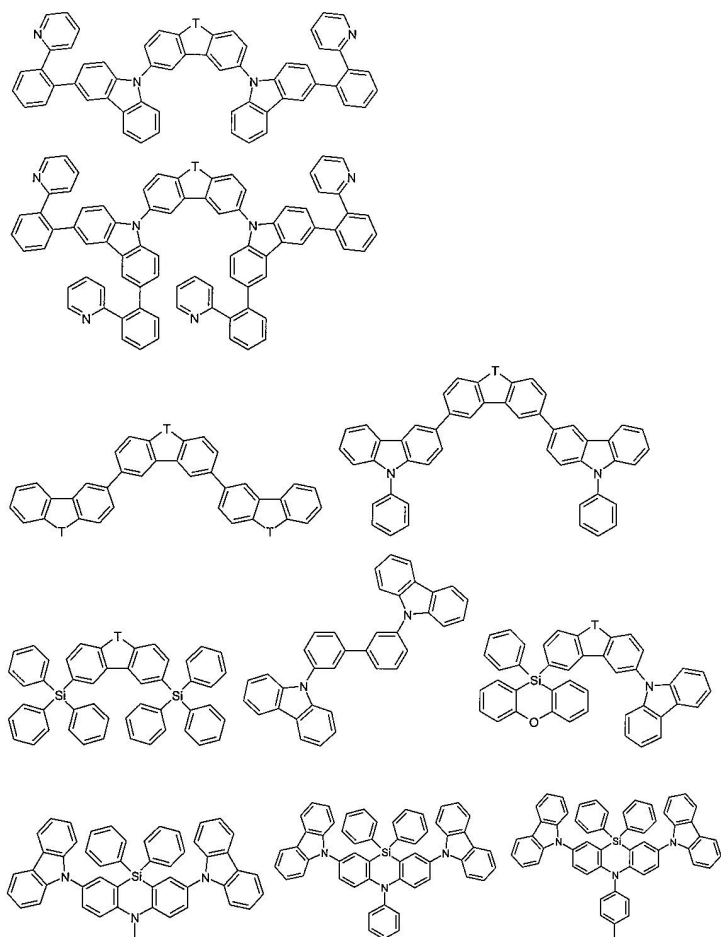


[0397]





[0398]



[0399]

[0400]

상기 화합물에서, T는 O 또는 S, 바람직하게는 O이다. 1개의 초과 T가 분자 내에 나타날 경우, 모든 T 기는 동일한 정의를 가진다.

[0401]

화학식 (X)의 화합물에 부가하여, 본 발명에 따라, 하나 이상의 화학식 (I)의 이중 리간드 착체와 함께, 가교결합 또는 중합된 형태의 화학식 (X) 기재의 반복 단위를 포함하는 가교결합 또는 중합체 물질을 사용하는 것도 가능하다. 화학식 (X)의 화합물과 같이, 후자의 것도 바람직하게 매트릭스 물질로서 사용된다.

[0402]

가교결합 또는 중합체 물질은 유기 용매 내 뛰어난 용해도, 우수한 필름 형성성 및 비교적 높은 유리 전이 온도를 가진다. 또한, 본 발명에 따른 가교결합 또는 중합체 물질이 유기 발광 다이오드(OLED)에 사용될 때, 높은 전하 캐리어 이동성, 높은 발색 안정성 및 상응하는 성분의 긴 작동 시간이 관찰될 수 있다.

[0403]

가교결합 또는 중합체 물질은 열적으로 또한 기계적으로 안정하고 비교적 결함이 없기 때문에, 코팅물로서 또는 박막에서 특히 적당하다.

[0404]

화학식 (X) 기재의 반복 단위를 포함하는 가교결합 또는 중합체 물질은 단계 (a) 및 (a)를 포함하는 방법에 의해 제조될 수 있다:

[0405]

(a)  $a'' R^{55}$  라디칼 중 1개 이상 또는  $b' R^{56}$  라디칼 중 1개 이상이 스페이서를 통해 부착된 가교결합성 또는 중합성 기인, 화학식 (X)의 가교결합성 또는 중합성 화합물을 제조하는 단계, 및

[0406]

(b) 단계 (a)로부터 수득된 화학식 (X)의 화합물을 가교결합 또는 중합하는 단계.

[0407]

가교결합 또는 중합된 물질은 동중중합체일 수 있는데, 이는 화학식 (X)의 단위만이 가교결합 또는 중합된 형태로 존재함을 의미한다. 그것은 또한 공중중합체일 수 있는데, 이는 가교결합 또는 중합된 형태로, 화학식 (X)의 단위에 부가하여 추가의 단량체, 예를 들어 정공 전도성 및/또는 전자 전도성을 가지는 단량체가 존재함을 의미한다.

[0408]

본 발명의 OLED의 추가의 바람직한 실시양태에서, 그것은 하나 이상의 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체, 하나 이상의 화학식 (X)의 매트릭스 물질, 및 임의로 1개 이상의 추가의 정공 수송 매트릭스 물질을 포함하

는 방출 층을 포함한다.

[0409] 본 발명의 OLED는 전계발광이 유용한 모든 장치들에 사용될 수 있다. 적당한 장치는 바람직하게 정지 및 이동형 시각 표시 장치 및 조명 수단으로부터 선택된다. 따라서, 본 발명은 본 발명의 OLED를 포함하는, 정지형 시각 표시 장치 및 이동형 시각 표시 장치 및 조명 수단으로 이루어진 군으로부터 선택되는 장치에 관한 것이다.

[0410] 정지형 시각 표시 장치는, 예를 들어 컴퓨터 및 텔레비전의 시각 표시 장치, 인쇄기, 주방 용품 및 광고 패널에서의 시각 표시 장치, 조명 및 정보 패널이다. 이동형 시각 표시 장치는, 예를 들어 휴대폰, 랩탑, 디지털 카메라, mp-3 플레이어, 스마트폰 및 차량에서의 시각 표시 장치, 및 버스 및 기차에서의 목적지 표시기이다.

[0411] 또한, 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체는 역 구조를 가지는 OLED에 사용될 수 있다. 본 발명의 착체는 바람직하게 발광층 내 이러한 역 OLED에 사용된다. 본원에서 통상 사용되는 역 OLED 및 물질의 구조는 당업자에게 공지되어 있다.

[0412] 본 발명의 추가의 실시양태는 하나 이상의 화학식 (I)의 이중 리간드 착체를 포함하는 백색 OLED이다. 바람직한 실시양태에서, 화학식 (I)의 이중 리간드 착체는 백색 OLED에서 에미터 물질로서 이용된다. 화학식 (I)의 이중 리간드 착체의 바람직한 실시양태는 상기 언급되어 있다. 하나 이상의 화학식 (I)의 이중 리간드 착체에 부가하여, 백색 OLED는 하나 이상의 화학식 (X)의 화합물을 포함할 수 있다. 화학식 (X)의 화합물은 바람직하게 매트릭스 물질로 이용된다. 바람직한 화학식 (X)의 화합물은 상기 언급되어 있다.

[0413] 백색 광을 수득하기 위해, OLED는 전체의 가시광선 범위의 스펙트럼에서 발색하는 광을 발생시켜야 한다. 그러나, 유기 에미터는 정상적으로 가시광선 스펙트럼의 제한된 부분에만 방출되고, 즉 발색된다. 백색 광은 상이한 에미터의 조합에 의해 발생될 수 있다. 통상, 적색, 녹색 및 청색 에미터들이 조합된다. 그러나, 종래 기술은 또한 백색 OLED의 형성을 위한 다른 방법, 예를 들어 삼중항 집광법(triplet harvesting approach)을 개시한다. 백색 OLED의 적당한 구조 또는 백색 OLED의 형성 방법이 당업자에 공지되어 있다.

[0414] 본 발명은 또한 하나 이상의 화학식 (I)의 본 발명의 이중 리간드 착체를 포함하는, 유기 전자 성분, 바람직하게는 유기 발광 다이오드(OLED), 유기 태양광 전지(OPV), 유기 전계 효과 트랜지스터 (OFET) 또는 발광 전기화학 전지(LEEC)에 관한 것이다.

## [0415] 실시예

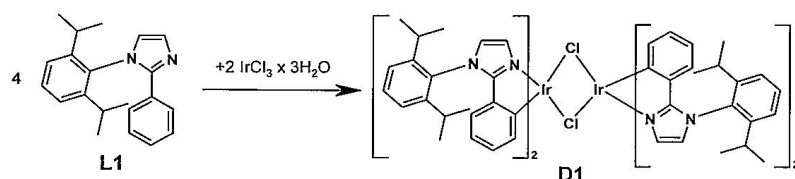
[0416] 이하 실시예, 특히 실시예에 상세히 설명된 방법, 물질, 조건, 공정 매개변수, 장치 등은 본 발명의 설명을 도모하기 위한 것이나, 본 발명의 범주를 제한하지 않는 것으로 한다.

[0417] WO 2006/121811의 실시예 14와 유사한 방식으로 N-(2,6-디이소프로필페닐)-2-페닐이미다졸 **L1**을 합성한다. 문헌 [D. Enders, K. Breuer, G. Raabe, J. Runsink, J. H. Teles, J.-P. Melder, K. Ebel, S. Brode, Angew. Chem. **1995**, 107, 9, 1119-1122] 또는 문헌[D. Enders, K. Breuer, U. Kallfass, T. Balensiefer, Synthesis **2003**, 8, 1292-1295]에 따라 5-메톡시-1,3,4-트리페닐-4,5-디히드로-1H-1,2,4-트리아졸 **C1**의 합성을 수행한다. WO 2007/095118의 실시예 10과 유사한 방식으로 3-(2,6-디메틸페닐)-7-메틸이미다조[1,2-f]페난트리딘 **L3**을 합성한다. WO 2009/050281에 기재된 바와 같이, 리간드 전구체 1-이소프로필-1,2,4-트리아졸로[4,3-f]페난트리딘 염 요오드화물 **C3**의 합성을 수행한다. 엑시톤 및 정공 차단제 2,8-비스(트리페닐실릴)-디벤조푸란 LB1의 합성은 WO 2009/003898의 합성에 4g에 개시되어 있다.

[0418] 모든 실험은 보호성 기체 분위기 하에 수행된다.

## [0419] 실시예 1:

[0420]  $\mu$ -디클로로 이량체 **D1**:



[0421]

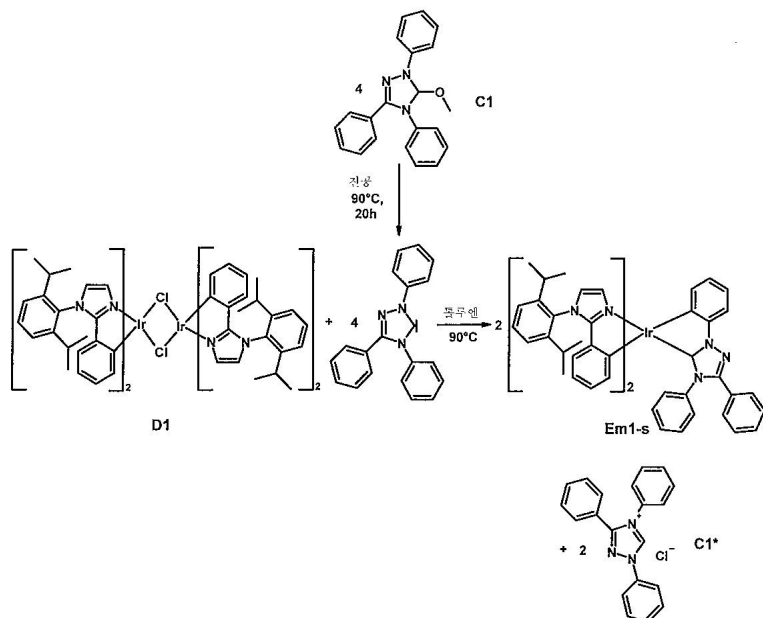
[0422] 3.50 g(11.5 mmol)의 1-(2,6-디이소프로필페닐)-2-페닐-1H-이미다졸 **L1**을 먼저 200 ml의 2-에톡시에탄올/물(비 3/1)에 충전하고, 1.84 g(5.2 mmol)의 염화이리듐(III) 삼수화물과 혼합한다. 반응 혼합물을 18시간 동안 환류 하에 가열한다. 냉각 후, 50 ml의 증류수를 첨가한다. 석출물을 여과하고, 증류수로 세정하며, 건조시킨다. 이

에 따라, 3.50 g(80%)의  $\mu$ -디클로로 이량체 **D1**를 황색 분말로서 수득한다.

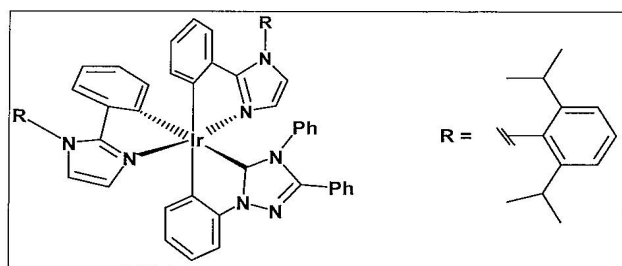
$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz):

$\delta$  = 0.95 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 12H), 1.18 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 12H), 1.27 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 12H), 1.34 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 12H), 2.80-2.91 (m, 8H), 6.08 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.7$  Hz, 4H), 6.24 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.7$  Hz, 4H), 6.39 (pt,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.5$  Hz, 4H), 6.53 (pt,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.5$  Hz, 4H), 6.97 (d,  $J_{\text{H,H}} = 1.5$  Hz, 4H), 7.39-7.45 (m, 8H), 7.59 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz, 4H), 7.67 (d,  $J_{\text{H,H}} = 1.5$  Hz, 4H).

**착체 Em1-s:**



2.37 g(7.2 mmol)의 5-메톡시-1,3,4-트리페닐-4,5-디히드로-1H-1,2,4-트리아졸 **C1**을 18시간 동안 감압 하에 90℃로 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 먼저 100 ml의 무수 톨루엔을 첨가한 후, 3.00 g(1.8 mmol)의 클로로 이량체 **D1** 및 150 ml의 무수 톨루엔의 현탁액을 첨가한다. 혼합물을 2시간 동안 90℃로 가열한다. 형성된 백색 석출물(1.15 g, 염화이미다졸륨 **C1\***)을 여과한다. 여과액을 3×40 ml의 포화  $\text{NaHCO}_3$  용액 및 1×40 ml의 증류수로 세정하고,  $\text{MgSO}_4$ 로 건조시키고, 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 2×50 ml의 메탄올로 세정하고, 염화메틸렌/메탄올로 재결정화한 후, 니트로메탄으로 재결정화한다. 이에 따라, 3.2 g의 착체 **Em1-s**을 황색 분말(82%)로 수득한다.



**Em1-s:** **Em1-s**의 형태는 유사-자오선 이성질체 S1a 또는 S1b의 형태에 상응한다. **Em1-s**는 라세미체로서 존재하고; 결정 구조에 대해, 도 1을 참조하고, 단지 하나의 거울이성질체만 나타내어져 있고, 큰 구=C, 작은 구=H이다. x-선 구조 분석을 위한 샘플을 니트로메탄(결정 중에 여전히 존재하는 니트로메탄)으로 결정화한다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz):

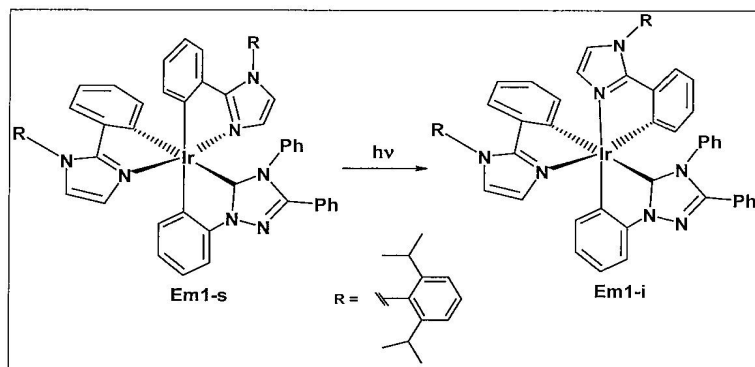
$\delta$  = 0.88 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 3H), 0.91 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 9H), 1.14 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 3H), 1.16 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 3H), 1.20 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 3H), 1.28 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 3H), 2.08 (sept,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.7$  Hz, 1H), 2.65-2.77 (m, 3H), 6.08-6.15 (m, 3H), 6.19-6.25 (m, 2H), 6.42-6.45 (m, 1H), 6.50-6.52 (m, 2H), 6.67 (s, b, 2H), 6.71 (dt,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.4$  Hz,  $J = 1.2$  Hz, 1H), 6.75 (d,  $J = 1.5$  Hz, 1H), 6.79-6.87 (m, 6H), 7.00-7.07 (m, 2H), 7.28-7.43 (m, 9H), 7.50 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz, 1H), 7.56 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz, 1H), 7.71 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.5$  Hz, 1H).

광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

$\lambda_{\text{max}} = 460, 490$  nm, CIE: (0.19; 0.34)

실시예 2:

착체 **Em1-i**:



각각의 경우의 라세미형, 각각에 대해 단지 하나의 거울이성질체만이 표기됨

200 ml의 3-메톡시프로피오니트릴 중의 1.6 g의 착체 **Em1-s**의 용액에 5시간 동안 흑광 청색 램프로 실온에서 조사한다(irradiated)(오스람(Osram), L18W/73,  $\lambda_{\text{max}} = 370-380$  nm). 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 메탄올로 세정하고 염화메틸렌/메탄올로 재결정화한다. 이에 따라, 1.2 g의 **Em1-i**를 레몬 황색 분말(75%)로서 수득한다.

**Em1-i**의 형태는 (유사면 이성질체 **S4a** 또는 **S4b**의 형태 **IVa** 또는 **IVb**에 상응한다. **Em1-i**는 라세미체로서 존재하고; 결정 구조에 대해, 도 2를 참조하고, x-선 구조 분석을 위한 샘플을 시클로헥산/아세트산에틸(결정 내에 여전히 존재하는 시클로헥산)로부터 결정화한다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 500 MHz):

$\delta$  = 0.46 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 3H), 0.75 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 3H), 0.81 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 3H), 1.01 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 3H), 1.09 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 3H), 1.14 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 3H), 1.17 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 3H), 1.26 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 3H), 1.50 (sept,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 1H), 2.49-2.60 (m, 3H), 6.01 (d,  $J = 1.3$  Hz, 1H), 6.10 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 8.2$  Hz, 2H), 6.34 (d,  $J = 1.4$  Hz, 1H), 6.38 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.2$  Hz, 1H), 6.41-6.45 (m, 2H), 6.57-6.73 (m, 5H), 6.85 (d,  $J = 1.4$  Hz, 1H), 6.96-7.00 (m, 1H), 7.11 (d,  $J = 1.4$  Hz, 1H), 7.17-7.42 (m, 14H), 7.46 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz, 1H), 7.54 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz, 1H), 7.68 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 8.2$  Hz, 1H).

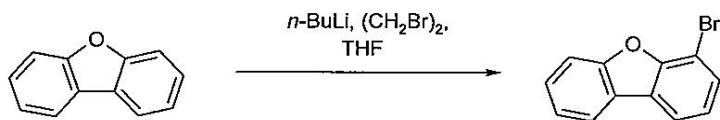
광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

$\lambda_{\text{max}} = 456, 488$  nm, CIE: (0.21; 0.37)

면 이성질체 **Em1-i**의 광발광 양자 수율은 자오선 이성질체 **Em1-s**의 양자 수율의 1.36배이다.

실시예 3:

[0443] 4-브로모디벤조푸란



[0444]

[0445] 100.00 g(99%, 588.6 mmol)의 디벤조푸란을 800 ml의 무수 THF 중에 용해시키고,  $-40^\circ\text{C}$ 에서 400 ml(640.0 mmol)의  $n\text{-BuLi}$  (헥산 중 1.6 M)와 혼합한다. 냉각 조를 제거한다. 반응 용액을 대략 30분 내에 수조 내에서 실온이 되도록 방치하고, 추가의 2시간 동안 교반한다. 그 후, 그것을  $-78^\circ\text{C}$ 로 냉각시키고, 80 ml의 무수 THF 중의 160.34 g(99%, 844.9 mmol, 73.55 ml)의 1,2-디브로모에탄의 용액을 적가한다. 냉각조를 제거하고, 혼합물을 대략 30분 내에 수조 내에서 실온이 되도록 방치하고, 추가의 2시간 동안 방치한다. 후속하여, 60 ml의 포화 염화나트륨 용액을 주의하여(약간의 발열 반응, 온도 상승을 1 내지  $2^\circ\text{C}$ ) 첨가한다. 유기상을 제거하고, 감압 하에 용매를 제거한다. 유상의 적갈색 잔류물을 900 ml의 디클로로메탄 중에 취하고, 500 ml의 HCl 용액(1 N) 및 400 ml의 물로 연속하여 세정한다. 유기상을 황산마그네슘으로 건조시키고, 용매를 감압 하에 제거한다. 냉각 중에, 황색빛 고체가 석출되고, 이를 모르타르로 분쇄하고,  $2 \times 150$  ml의 이소프로판올로 프릿에서 세정한다. 건조 후, 120.36 g의 베이지색 분말을 수득한다(GC 및 NMR에 따라, DBF/Br-DBF 비=10/90, 111.93 g의 Br-DBF/76% 수율에 상응함). 용매를 제거한 후, 추가의 15.84 g의, 디벤조푸란 및 4-브로모디벤조푸란의 혼합물(추가 대략 7.8 g/5% Br-DBF를 포함함)을 이소프로판올 용액으로부터 수득한다. 이 혼합물은 마찬가지로 추가 단계에서 사용될 수 있다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 500 MHz):

$\delta$  = 7.92 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz, 1H), 7.86 (dd,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.7$  Hz,  $^4J_{\text{H,H}} = 1.0$  Hz, 1H), 7.65 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 8.2$  Hz, 1H), 7.61 (dd,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz,  $^4J_{\text{H,H}} = 1.1$  Hz, 1H), 7.50 (dt,  $^3J_{\text{H,H}} = 8.2$  Hz,  $J_{\text{H,H}} = 1.3$  Hz, 1H), 7.37 (dt,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz,  $J_{\text{H,H}} = 0.8$  Hz, 1H), 7.21 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.8$  Hz, 1H).

[0446]

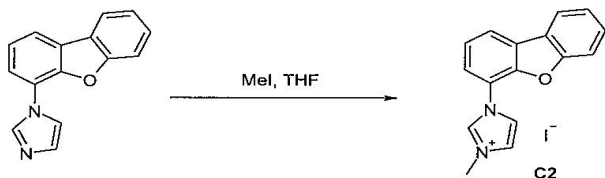
[0447] 1-디벤조푸란-4-일-1H-이미다졸



[0448]

[0449] 119.00 g의 첫 번째 단계의 산물(110.66 g, 447.9 mmol의 4-브로모디벤조푸란을 포함함)을 700 ml의 디메틸포름아미드에 용해시키고, 37.15 g(545.7 mmol)의 이미다졸, 15.80 g(83.0 mmol)의 요오드화구리(I) 및 83.20 g(602.0 mmol)의 탄산칼륨과 혼합한다. 혼합물을 48시간 동안  $150^\circ\text{C}$ 에서 교반하고, 그 동안에 추가의 3.75 g(55.1 mmol)의 이미다졸을 24시간 후에 첨가하고, 추가로 1.93 g(28.3 mmol)을 44시간 후에 첨가한다. 그 후, 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 불용성 구성성분을 여과한다. 여과액을 농축 건조시킨다. 잔류물을 500 ml의 염화메틸렌 중에 취하고, 150 ml의 암모니아 용액(25%) 및 150 ml의 물로 연속하여 세정하며, 황산마그네슘으로 건조시키고, 농축시킨다. 이에 따라, 82.23 g의 조생성물을 수득하고, 이는 다음 단계에서 추가 정제없이 사용된다(78% 조(crude) 수율).

[0450] 3-디벤조푸란-4-일-1-메틸-3H-이미다졸-1-륨 요오드화물 C2



[0451]

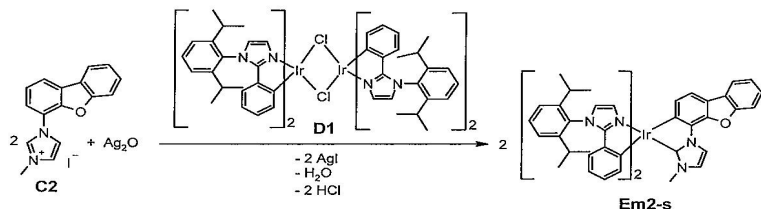
[0452] 82.03 g(350.1 mmol)의 1-디벤조푸란-4-일-1H-이미다졸(조 생성물)을 1 l의 테트라히드로푸란에 용해시키고, 246.06 g(1.733 mol)의 요오드화메틸과 천천히 혼합한다. 혼합물을 실온에서 65시간 동안 교반한다. 형성된 석출물을 여과하고, 1 l의 테트라히드로푸란으로 세정하며, 건조시킨다. 이에 따라, 98.41 g(261.6 mmol, 75%)의 베이지색 분말을 수득한다.



$^1\text{H}$  NMR (DMSO, 500 MHz):

$\delta$  = 10.00 (s, 1H, NCHN), 8.49 (t,  $J$  = 1.9 Hz, 1H,  $\text{CH}_{\text{Aryl}}$ ), 8.41 (dd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.8 Hz,  $J$  = 1.0 Hz, 1H,  $\text{CH}_{\text{Aryl}}$ ), 8.32-8.30 (m, 1H,  $\text{CH}_{\text{Aryl}}$ ), 8.15 (t,  $J$  = 1.8 Hz, 1H,  $\text{CH}_{\text{Aryl}}$ ), 7.96 (dd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.9 Hz,  $J$  = 1.0 Hz, 1H,  $\text{CH}_{\text{Aryl}}$ ), 7.84 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 8.4 Hz, 1H,  $\text{CH}_{\text{Aryl}}$ ), 7.69-7.65 (m, 2H,  $\text{CH}_{\text{Aryl}}$ ), 7.53 (dt,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.5 Hz,  $J$  = 0.9 Hz, 1H,  $\text{CH}_{\text{Aryl}}$ ), 4.12 (s, 3H,  $\text{CH}_3$ ).

착체 **Em2-s**:



1.01 g(2.7 mmol)의 이미다졸류 요오드화물 **C2** 및 0.31 g(1.3 mmol)의  $\text{Ag}_2\text{O}$ 를 200 ml의 무수 아세토니트릴 중에 서 실온에서 18시간 동안 교반한다. 이어서, 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 300 ml의 무수 THF 중에 취하고, 1.50 g(0.9 mmol)의 클로로 이랑체 **D1**를 첨가한다. 그 후, 혼합물을 24시간 동안 환류 하에 가열한다. 냉각 후, 반응 용액을 여과한다. 여과액에서 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 메탄올로 세정하고, 건조 후, 1.2 g의 착체 **Em2-s**를 황색 분말(64%)로서 수득한다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 500 MHz):

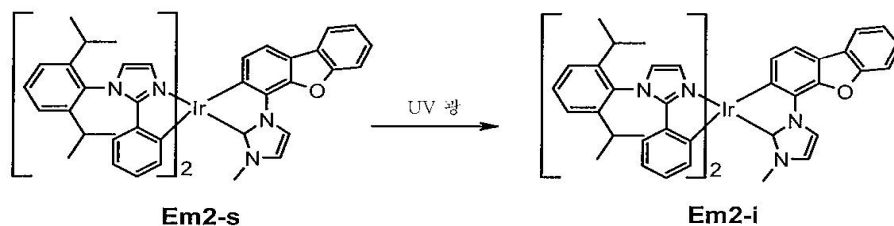
$\delta$  = 0.86 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 0.96 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 1.00 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.7 Hz, 3H), 1.02 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.1 Hz, 3H), 1.03 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.1 Hz, 3H), 1.06 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.21 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.0 Hz, 3H), 1.23 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.0 Hz, 3H), 2.15 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 1H), 2.39 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 1H), 2.77-2.85 (m, 2H), 3.34 (s, 3H), 6.17 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.8 Hz, 1H), 6.20 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.8 Hz, 1H), 6.41 (d,  $J$  = 1.5 Hz, 1H), 6.44-6.52 (m, 2H), 6.54 (d,  $J$  = 1.5 Hz, 1H), 6.67-6.79 (m, 5H), 6.89 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.4 Hz, 1H), 6.95 (d,  $J$  = 1.9 Hz, 1H), 7.16 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.3 Hz, 1H), 7.29-7.41 (m, 7H), 7.51-7.55 (m, 2H), 7.61 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 8.1 Hz, 1H), 7.89 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 8.3 Hz, 1H), 8.46 (d,  $J$  = 1.9 Hz, 1H).

광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

$\lambda_{\text{max}}$  = 460, 491 nm, CIE: (0.18; 0.33)

실시예 4:

착체 **Em2-i**:



200 ml의 3-메톡시프로피오니트릴 중의 0.90 g의 착체 **Em2-s**의 용액에 3시간 동안 흑광 청색 램프로 실온에서 조사한다(오스람, L18W/73,  $\lambda_{\text{max}}$  = 370-380 nm). 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 메탄올로 주의하여 세정한다. 이에 따라, 0.63 g의 **Em2-i**을 황색 분말(70%)로서 수득한다.

**Em2-i**의 형태는 유사면 이성질체 **S4a** 또는 **S4b**의 형태 **IVa** 또는 **IVb**에 상응한다. **Em2-i**이 라세미체로 존재하고; 결정 구조에 대해 도 3을 참조하고, x-선 구조 분석을 위한 샘플을 테트라히드로푸란/n-헵탄으로부터 결정화하였다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz):

$\delta$  = 0.72 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 0.85 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 0.90 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 0.99 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.02 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 1.11 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.19 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.1 Hz, 3H), 1.21 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.1 Hz, 3H), 1.90 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 1H), 2.46 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 1H), 2.60 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 1H), 2.77 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 1H), 3.53 (s, 3H), 6.16 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.7 Hz, 2H), 6.38-6.56 (m, 5H), 6.65-6.69 (m, 2H), 6.76-6.84 (m, 4H), 6.99 (d,  $J$  = 1.9 Hz, 1H), 7.22 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.7 Hz, 1H), 7.27-7.37 (m, 6H), 7.49-7.60 (m, 3H), 7.86 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.2 Hz, 1H), 8.38 (d,  $J$  = 1.9 Hz, 1H).

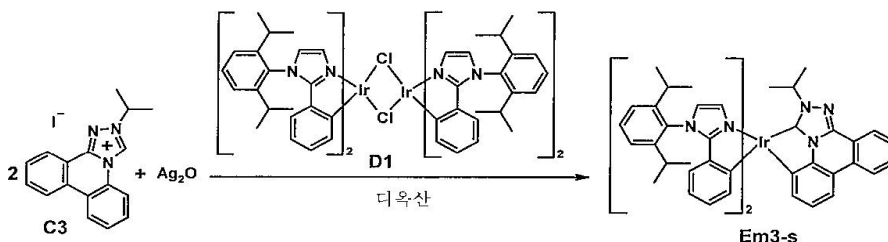
광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

$\lambda_{\text{max}}$  = 462, 490 nm, CIE: (0.17; 0.29)

면 이성질체 **Em2-i**의 광발광 양자 수율은 이성질체 **Em2-s**의 양자 수율의 1.44배이다.

실시예 5:

착체 **Em3-s**:



6.0 g(15.5 mmol)의 1-이소프로필-1,2,4-트리아졸로[4,3-f]페난트리디늄 요오드화물 **C3** 및 2.9 g(12.3 mmol)의  $\text{Ag}_2\text{O}$ 를 40시간 동안 실온에서 400 ml의 디옥산 중에서 교반한다. 후속하여, 2.6 g(1.6 mmol)의 클로로 이량체 **D1**를 첨가하고, 혼합물을 24시간 동안 가열 환류한다. 실온으로 냉각시킨 후, 석출물을 여과하고, 디클로로메탄으로 세정한다. 조합된 여과액을 농축 건조시키고, 칼럼 크로마토그래피(실리카 겔, 디클로로메탄)에 의해 정제한다. 건조 후, 2.1 g의 **Em3-s**를 황색 분말(64%)로서 수득한다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 500 MHz):

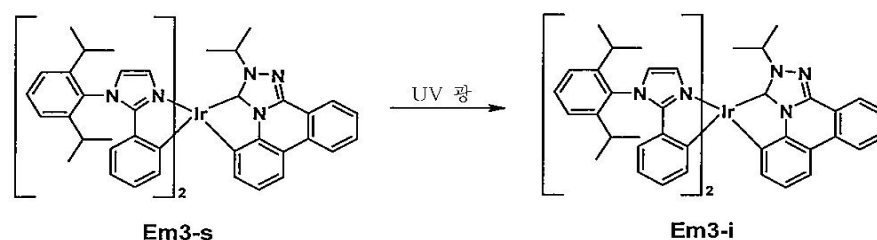
$\delta$  = 0.79 (d, 3H), 0.89 (d, 3H), 0.90 (d, 3H), 0.97 (d, 6H), 1.02 (d, 3H), 1.10 (d, 3H), 1.15 (d, 3H), 1.16 (d, 3H), 1.47 (d, 3H), 2.03 (sept, 1H), 2.47 (sept, 1H), 2.65 (sept, 1H), 2.76 (sept, 1H), 4.47 (sept, 1H), 6.13 (d, 1H), 6.21 (d, 1H), 6.35 (d, 1H), 6.46 (m, 3H), 6.58 (dd, 2H), 6.65-6.76 (m, 3H), 6.93 (dd, 1H), 7.09 (dd, 1H), 7.15 (d, 1H), 7.25 (dd, 1H), 7.28-7.33 (m, 3H), 7.44-7.52 (m, 2H), 7.58 (dd, 1H), 7.67-7.76 (m, 2H), 8.39 (dd, 1H), 8.43 (d, 1H).

광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

$\lambda_{\text{max}}$  = 457, 489 nm, CIE: (0.18; 0.32)

실시예 6:

착체 **Em3-i**:



2000 ml의 아세토니트릴 중의 2.1 g의 **Em3-s**의 현탁액에 8시간 동안 실온에서 중압 수은 침지 램프(moderate



pressure mercury immersion lamp)로 조사한다(듀란 시쓰(Duran sheath)를 갖는 TQ150). 후속하여, 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 아세톤과 함께, 2회 교반하고, 여과하였다. 1.6 g의 **Em3-i**을 황색 분말(76%)로서 수득하였다.

<sup>1</sup>H NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 500 MHz):

δ = 0.68 (d, 3H), 0.75 (d, 3H), 0.82 (d, 3H), 0.96 (d, 3H), 0.99 (d, 3H), 1.05 (d, 3H), 1.13 (d, 3H), 1.20 (d, 3H), 1.24 (d, 3H), 1.60 (d, 3H), 1.79 (sept, 1H), 2.42 (sept, 1H), 2.51 (sept, 1H), 2.76 (sept, 1H), 4.56 (sept, 1H), 6.10 (dd, 2H), 6.30-6.35 (m, 1H), 6.38-6.45 (m, 2H), 6.53 (d, 1H), 6.61 (dd, 1H), 6.68 (d, 1H), 6.73 (d, 1H), 6.74-6.78 (m, 2H), 6.79 (d, 1H), 6.96 (dd, 1H), 7.07-7.15 (m, 1H), 7.19 (d, 1H), 7.22 (d, 1H), 7.27-7.34 (m, 3H), 7.47 (dd, 1H), 7.49 (dd, 1H), 7.66-7.72 (m, 2H), 8.34 (d, 1H), 8.40 (d, 1H).

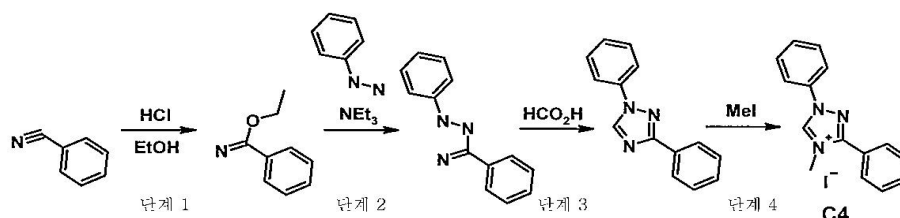
광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

λ<sub>max</sub>=456, 487 nm, CIE: (0.19; 0.32)

이성질체 **Em3-i**의 광발광 양자 수율은 이성질체 **Em3-s**의 양자 수율의 1.21배이다.

실시예 7:

4-메틸-1,3-디페닐-1H-[1,2,4]-이미다졸륨 요오드화물 **C4**:



단계 1: 벤조니트릴(51.5 g, 0.50 mol)을 에탄올(무수, 25 ml)과 혼합한다. 이어서, HCl 기체의 일정 스트림을 2시간에 걸쳐 도입하고, 후속하여 혼합물을 48시간 동안 실온에서 교반하며, 그 동안에 고체가 형성된다. 용매를 반응 혼합물로부터 감압 하에 제거한다(95 g).

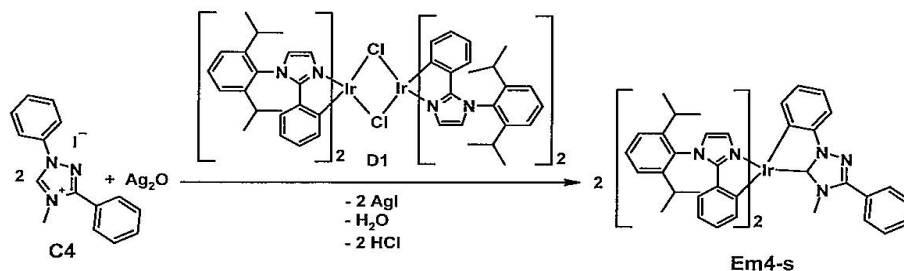
단계 2+3: 12 g의 단계 1의 물질(64.6 mmol)을 다시 EtOH(120 ml)에 용해시키고, 페닐히드라진(9.4 g, 84 mmol, 1.3 당량)을 첨가하고, 그 동안 고체가 형성된다. 트리에틸아민(22 ml, 162 mmol, 2.5 당량)을 첨가한 후, 혼합물을 16시간 동안 실온에서 교반한다. 용매를 다시 실온에서 반응 혼합물로부터 감압 하에 제거하여, 형성된 이미드라존이 여전히 습윤상태로 남는다. 포름산(200 ml)을 첨가한 후, 혼합물을 3.5시간 동안 가열 환류한다. 실온에서 추가 48시간 후, 혼합물을 탄산칼륨 수용액(44%, 900 ml)에 주의하여 첨가하고, 0℃로 냉각시킨다. CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(500 ml)를 첨가한 후, 상을 분리시키고, 유기상을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키며, 감압 하에 농축시킨다. 샘플을 디클로로메탄/석유 에테르로부터 재결정화하고, 이로부터 약간 오염된 생성물을 수득한다(5.5 g, 40%). 모액을 칼럼으로 여과하고(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/n-헥산), 이로부터 추가 회분의 순(clean) 생성물을 수득한다(1.7 g, 12%).

단계 4: 전 단계의 트리아졸(1.5 g, 66 mmol)을 THF(무수, 40 ml)에 용해시키고, MeI(14 ml)과 혼합하여, 5일 동안 가열 환류한다. 수득된 고체를 여과하고, 반복 재결정화하며(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/n-헥산), 건조시킨다(780 mg, 32%).

<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>):

δ = 4.26 (s, 3H), 7.53 – 7.71 (m, 6H), 7.74 – 7.76 (m, 2H), 8.09 – 8.11 (m, 2H), 12.27 (s, 1H).

[0491] 착체 Em4-s:



[0492]

[0493] 0.40 g(1.1 mmol)의 이미다졸류 요오드화물 **C4** 및 0.13 g(0.56 mmol)의  $\text{Ag}_2\text{O}$ 를 18시간 동안 실온에서 50 ml의 무수 아세토니트릴 중에서 교반한다. 이어서, 25 ml의 무수 아세토니트릴 중의 0.61 g(0.37 mmol)의 클로로 이량체 **D1**의 용액을 첨가한다. 그 후, 혼합물을 6시간 동안 가열 환류한 후, 추가 16시간 동안 실온에서 교반한다. 냉각 후, 반응 용액을 여과한다. 여과액에서 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 메탄올로 세정한 후, 0.2 g의 착체 **Em4-s**를 황색 분말(26%)로서 수득한다.

$^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ ):

$\delta$  = 0.91 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 0.95 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.1 Hz, 3H), 0.97 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.1 Hz, 3H), 0.98 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 1.00 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.05 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.20 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.21 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 2.17 (sept,

[0494]

$^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 1H), 2.40 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 1H), 2.75-2.82 (m, 2H), 3.36 (s, 3H), 6.17 (bt,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.0 Hz, 2H), 6.43-6.50 (m, 3 H), 6.62 (d,  $J$  = 1.5 Hz, 1H), 6.66-6.82 (m, 6 H), 6.88 (dd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.1 Hz,  $J$  = 1.3 Hz, 1 H), 6.96 (dt,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.4 Hz,  $J$  = 1.5 Hz, 1H), 7.08 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.7 Hz, 1H), 7.31-7.37 (m, 4H), 7.51-7.59 (m, 6H), 7.69-7.72 (m, 2H).

[0495]

광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0496]

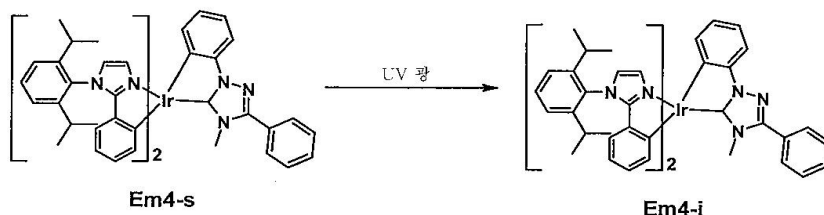
$\lambda_{\text{max}}$ =458, 488 nm, CIE: (0.19; 0.33)

[0497]

실시예 8:

[0498]

[0499] 착체 Em4-i:



[0500]

[0501] 200 ml의 3-메톡시프로피오니트릴 중의 0.15 g의 착체 **Em4-s**의 용액에 2시간 동안 흑광 청색 램프로 실온에서 조사한다(오스람, L18W/73,  $\lambda_{\text{max}}$ =370-380 nm). 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 메탄올로 주의하여 세정한다. 이에 따라, 0.05 g의 **Em4-i**을 황색 분말(33%)로서 수득한다.

$^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ ):

$\delta$  = 0.71 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 0.84 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 0.88 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.03 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 1.06 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.7 Hz, 3H), 1.07 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 3H), 1.18 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.19 (d,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 3H), 1.89 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.8 Hz, 1H), 2.50 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 1H), 2.58 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 1H), 2.73 (sept,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 6.9 Hz, 1H), 6.17 (bd,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.8 Hz, 2H), 6.42-6.52 (m, 3H), 6.60 (dt,  $^3J_{\text{H,H}}$  = 7.6 Hz,  $J$  = 1.3 Hz, 1H), 6.64-6.70 (m, 4H), 6.76-6.78 (m, 2H), 6.81 (d,  $J$  = 61.4 Hz, 1H), 6.91-6.94 (m, 2H), 7.27-7.38 (m, 4H), 7.50-7.56 (m, 6H), 7.75-7.77 (m, 2H).

[0502]



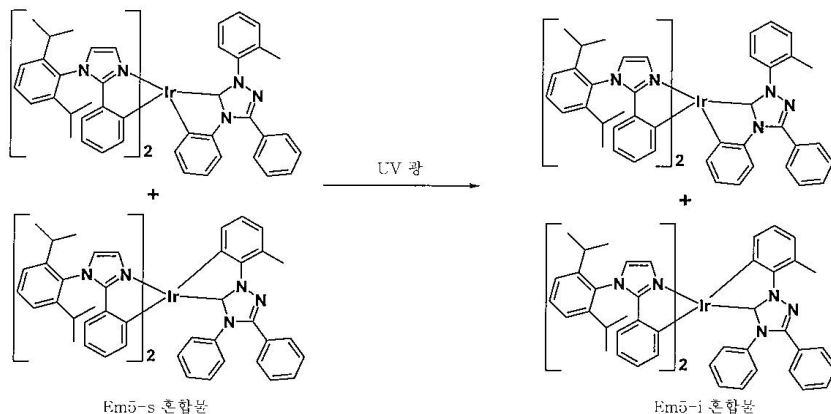
90℃로 가열하고, 이 온도에서 2시간 동안 교반한다. 냉각시킨 후, 석출물을 제거한다. 여과액을 3×30 ml의 NaHCO<sub>3</sub> 수용액 및 1×30 ml의 물로 연속하여 세정하고, MgSO<sub>4</sub>로 건조시키며, 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피(용매: 시클로헥산/아세톤=4/1)로 정제한다. 이에 따라, 1.2 g(63%)의 **Em5-s**를 2가지 고리형금속화 이성질체의 혼합물로서 수득한다.

[0516] 광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0517]  $\lambda_{\max}$ =461, 489 nm, CIE: (0.19; 0.33)

[0518] 실시예 10:

[0519] 착체 혼합물 **Em5-i**:



[0520]

[0521] 200 ml의 3-메톡시프로피온트릴 중의 0.60 g의 **Em5-s** 착체 혼합물의 용액에 실온에서 7시간 동안 흑광 청색 램프로 조사한다(오스람, L18W/73,  $\lambda_{\max}$ =370-380 nm). 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 메탄올로 주의하여 세정한다. 이에 따라, 0.10 g의 **Em5-i**을 담황색 분말(17%, 이 또한 2가지 고리형금속화 이성질체의 혼합물임)로서 수득한다.

[0522] MS (Maldi):

[0523]  $m/e=1110(M+H)^+$

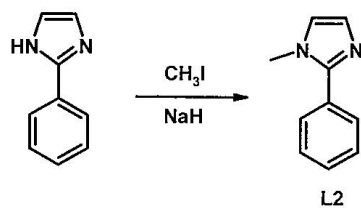
[0524] 광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0525]  $\lambda_{\max}$ =456, 487 nm, CIE: (0.20; 0.34)

[0526] 이성질체화 **Em5-i** 착체 혼합물의 광발광 양자 수율은 **Em5-s** 착체 혼합물의 양자 수율의 1.50배이다.

[0527] 실시예 11:

[0528] 1-메틸-2-페닐-1H-이미다졸 **L2**:



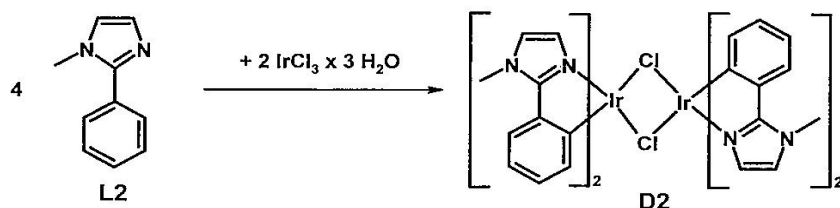
[0529]

[0530] 13.0 g(90 mmol)의 2-페닐이미다졸을 600 ml의 DMF에 용해시키고, 4.0 g(100 mmol)의 수소화나트륨(미네랄 오일 중 60%)와 천천히 혼합하고, 실온에서 30분 동안 교반한다. 이어서, 14.0 g(99 mmol)의 요오드화메틸을 첨가한다. 반응 혼합물을 실온에서 1.5시간 동안 교반한 후, 주의하여 350 ml의 물과 혼합한다. 혼합물을 2×200 ml의 아세트산에틸로 추출한다. 추출액을 황산나트륨으로 건조시키고, 농축시켰다. 이에 따라, 12.0 g(84%)의 **L2**를 수득한다.

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ ):

$\delta = 3.74$  (s, 3H), 7.00 (s, 1H), 7.05 (s, 1H), 7.40-7.43 (m, 1H), 7.45-7.48 (m, 2H), 7.62-7.63 (m, 2H).

$\mu$ -디클로로 이량체 **D2**:

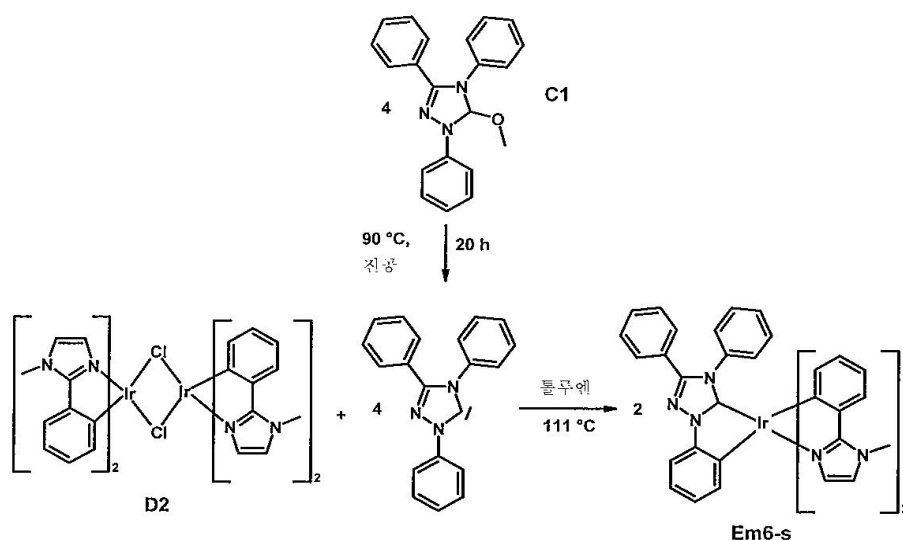


**D1**과 유사하게 합성을 수행한다. 수득된 석출물을 디클로로메탄으로 추출한다. 용매를 제거한 후, **D2**를 추출액으로부터 36%의 수율로 수득한다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz):

$\delta = 4.13$  (s, 12H), 6.05 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.7$  Hz, 4H), 6.55 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.5$  Hz, 4H), 6.74 (t,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.5$  Hz, 4H), 6.94 (s, 4H), 7.27 (s, 4H), 7.37 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.7$  Hz, 4H).

착체 **Em6-s**:



1.20 g(3.6 mmol)의 5-메톡시-1,3,4-트리페닐-4,5-디히드로-1H-1,2,4-트리아졸 **C1**를 20시간 동안 감압 하에 90 °C로 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 먼저 1.2 l의 무수 톨루엔을 첨가한 후, 0.99 g(0.9 mmol)의 클로로 이량체 **D2**를 첨가한다. 혼합물을 8시간 동안 가열 환류한다. 형성된 석출물을 여과한다. 여과액을 대략 800 ml로 농축하고, 3×500 ml의 포화  $\text{NaHCO}_3$  용액 및 1×500 ml의 증류수로 연속하여 세정하며,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ 로 건조시키고, 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피(시클로헥산/아세톤=5/1)에 의해 정제한다. 이에 따라, 118 mg의 착체 **Em6-s**(8%)을 수득한다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz):

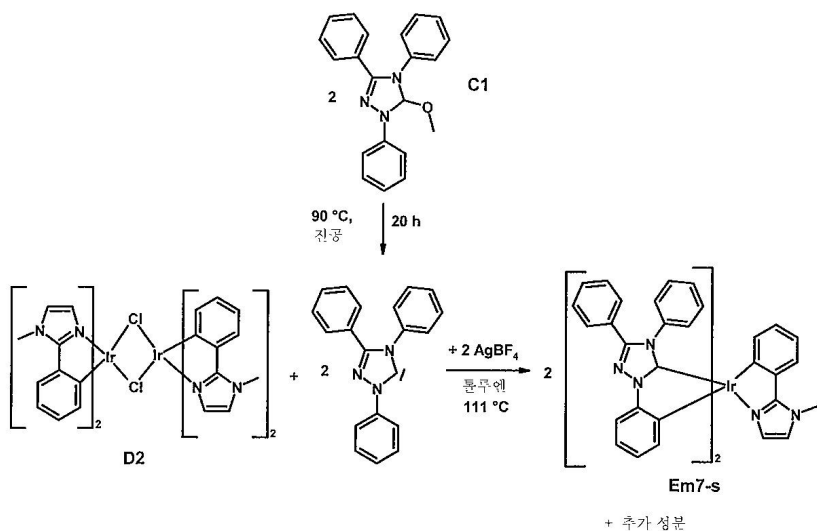
$\delta = 3.95$  (s, 3H), 4.03 (s, 3H), 6.00 (bd,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.3$  Hz, 1H), 6.23 (bt,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.3$  Hz, 1H), 6.27 (d,  $J = 1.5$  Hz, 1H), 6.47 (bd,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.1$  Hz, 1H), 6.51 (d,  $J = 1.5$  Hz, 1H), 6.60 (bt,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.5$  Hz, 1H), 6.67-6.72 (m, 4H), 6.79-6.88 (m, 6H), 6.95 (dt,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.5$  Hz,  $J = 1.5$  Hz, 1H), 7.05 (bt,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.5$  Hz, 1H), 7.24-7.27 (m, 2H), 7.33-7.36 (m, 4H), 7.47 (bd,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.8$  Hz, 1H), 7.61 (bd,  $^3J_{\text{H,H}} = 6.9$  Hz, 1H).

광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

$\lambda_{\text{max}}=456, 486$  nm, CIE: (0.21; 0.33)

[0542] 실시예 12:

[0543] 착체 Em7-s:



[0544]

[0545] 0.67 g(2.0 mmol)의 5-메톡시-1,3,4-트리페닐-4,5-디히드로-1H-1,2,4-트리아졸 C1을 20시간 동안 감압 하에 90 °C로 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 잔류물을 50 ml의 무수 톨루엔에 용해시키고, 1.2 l의 무수 톨루엔 중의 1.00 g(0.9 mmol)의 클로로 이량체 D2 및 0.36 g(1.9 mmol)의 AgBF<sub>4</sub>의 현탁액에 첨가한다. 혼합물을 8시간 동안 환류 하에 교반한다. 형성된 석출물을 여과한다. 여과액을 대략 800 ml로 농축시키고, 3×500 ml의 포화 NaHCO<sub>3</sub> 용액 및 1×500 ml의 증류수로 연속하여 세정하며, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키고, 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피(시클로헥산/아세톤=5/1)에 의해 정제한다. 이에 따라, 70 mg의 착체 Em7-s(5%)을 수득한다.

[0546] MS (Maldi):

[0547] m/e=943 (M+H)<sup>+</sup>

<sup>1</sup>H NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz):

δ= 3.70 (s, 3H), 5.86 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 5.96 (bd, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 8.1 Hz, 2H), 6.10 (d, J = 1.3 Hz, 1H), 6.56 (bd, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.2 Hz, 1H), 6.72-6.75 (m, 4H), 6.80 (bt, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.3 Hz, 1H), 6.86-6.92 (m, 3H), 6.94 (bt, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.5 Hz, 1H), 7.02-7.12 (m, 5H), 7.19-7.40 (m, 13H), 7.56 (bd, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.7 Hz, 1H), 7.70 (bd, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.0 Hz, 1H).

[0548]

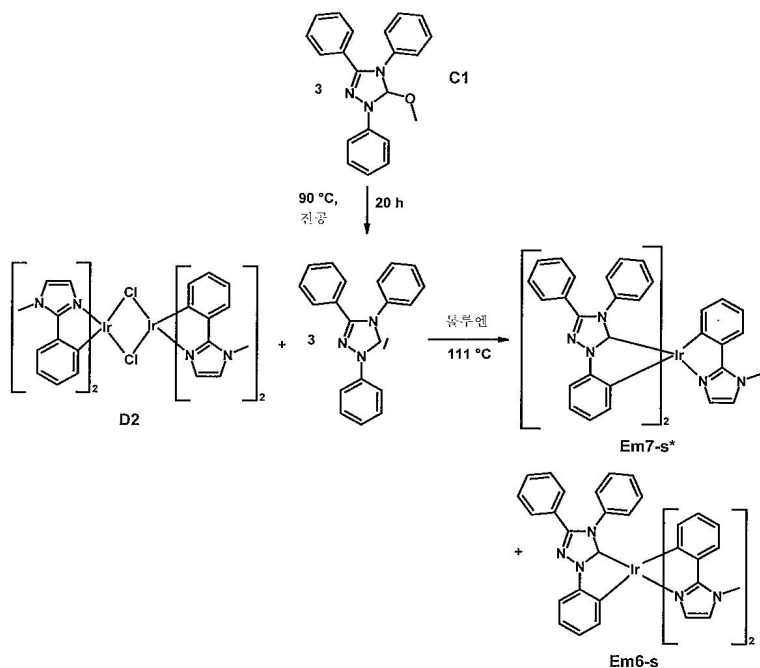
[0549] 광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0550] λ<sub>max</sub>=476, 502 nm, CIE: (0.22; 0.37)

[0551] 실시예 13:



[0552] 착체 **Em7-s\***:



[0553]

[0554] 0.90 g(2.7 mmol)의 5-메톡시-1,3,4-트리페닐-4,5-디히드로-1H-1,2,4-트리아졸 **C1**을 20시간 동안 감압 하에 90 °C로 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 먼저 800 ml의 무수 톨루엔을 첨가한 후, 0.99 g(0.9 mmol)의 클로로 이량체 **D2**를 첨가한다. 혼합물을 3시간 동안 환류 하에 교반한다. 형성된 석출물을 여과한다. 여과액을 3×50 ml의 포화 NaHCO<sub>3</sub> 용액 및 1×50 ml의 증류수로 연속하여 세정하고, MgSO<sub>4</sub>로 건조시키며, 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피(시클로헥산/아세톤 =2/1)에 의해 정제한다. 50 mg의 착체 **Em6-s**뿐만 아니라, 150 mg의 착체 **Em7-s\***을 수득한다.

<sup>1</sup>H NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 500 MHz):

δ= 3.86 (s, 3H), 5.95 (bd, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.3 Hz, 2H), 6.23 (bd, J = 1.4 Hz, 1H), 6.38 (bt, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.3 Hz, 1H), 6.44 (bd, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.3 Hz, 1H), 6.54 (bt, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.5 Hz, 1H), 6.61-6.67 (m,

[0555]

4H), 6.78-6.91 (m, 5H), 6.96 (bt, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.5 Hz, 1H), 7.07-7.13 (m, 4H), 7.19-7.36 (m, 12H), 7.53 (bd, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.0 Hz, 1H), 7.76 (bd, <sup>3</sup>J<sub>H,H</sub> = 7.3 Hz, 1H).

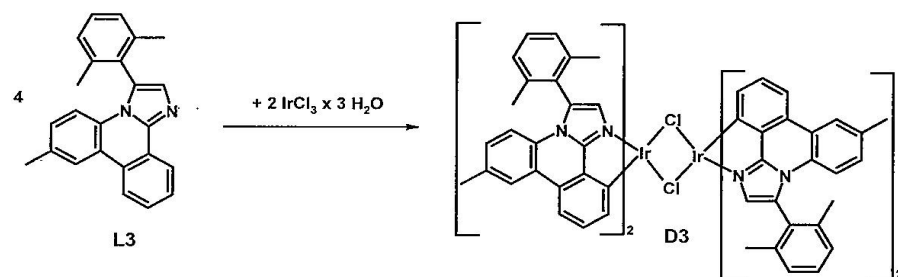
[0556]

[0557] 광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0558] λ<sub>max</sub>=482, 508 nm, CIE: (0.24; 0.40)

[0559] 실시예 14:

[0560] μ-디클로로 이량체 **D3**:



[0561]

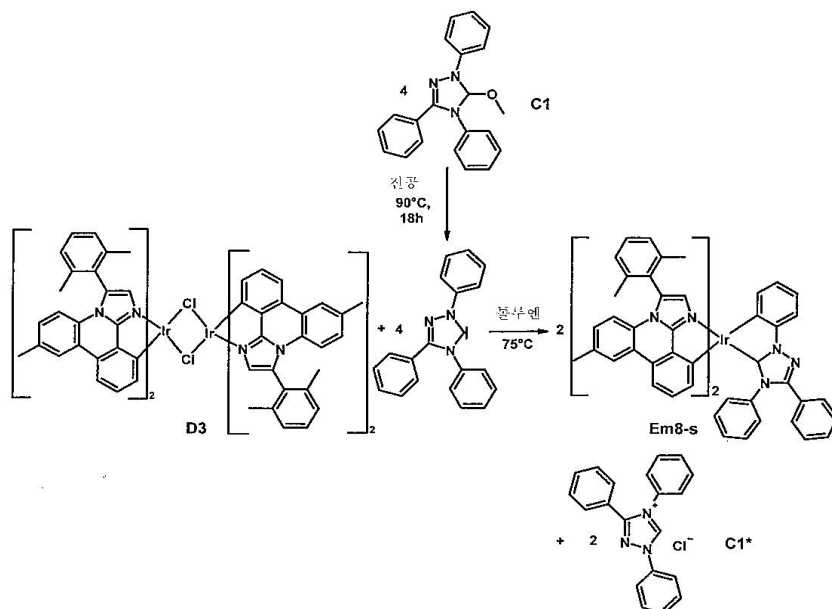
[0562] D1과 유사하게 합성을 수행한다. 수율: 87%.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz):

$\delta$  = 2.21 (s, 12H), 2.28 (s, 12H), 2.44 (s, 12H), 6.38 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.4$  Hz, 4H), 7.09 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 8.7$  Hz, 4H), 7.19 (m, 4H), 7.30 (bd,  $^3J_{\text{H,H}} = 8.7$  Hz, 4H), 7.42 (m, 8H), 7.55 (m, 4H), 7.86 (s, 4H), 8.00 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 8.4$  Hz, 4H), 8.48 (bs, 4H).

[0563]

[0564] 착체 Em8-s:



[0565]

[0566] 0.37 g(1.1 mmol)의 5-메톡시-1,3,4-트리페닐-4,5-디히드로-1H-1,2,4-트리아졸 C1을 감압 하에 18시간 동안 90 °C로 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 먼저 120 ml의 무수 톨루엔을 첨가한 후, 0.50 g(0.28 mmol)의 클로로 이량체 D3을 첨가한다. 혼합물을 3시간 동안 75°C로 가열한다. 형성된 백색 석출물을 여과한다. 여과액을 3×30 ml의 포화  $\text{NaHCO}_3$  용액 및 1×30 ml의 증류수로 세정하고,  $\text{MgSO}_4$ 로 건조시키며, 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 칼럼 크로마토그래피(실리카 겔, 아세트산에틸:시클로헥산 =1:5)에 의해 정제한다. 이에 따라, 0.19 g의 착체 Em8-s(28%)을 수득한다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 500 MHz):

$\delta$  = 2.03 (s, 3H), 2.10 (s, 3H), 2.20 (s, 3H), 2.28 (s, 3H), 2.44 (s, 3H), 2.48 (s, 3H), 6.21 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.6$  Hz, 1H), 6.63-7.39 (m, 28H), 7.45 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.9$  Hz, 1H), 7.67 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.9$  Hz, 1H), 7.70 (d,  $^3J_{\text{H,H}} = 7.6$  Hz, 1H), 8.21 (bs, 2H).

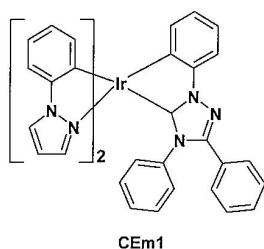
[0567]

[0568] 광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0569]  $\lambda_{\text{max}}=456$  nm, CIE: (0.24; 0.29)

[0570] 실시예 15(비교예, 본 발명에 따르지 않음):

[0571] 착체 CEm1:



[0572]



[0573] CEm1은 WO 2006067074로부터의 화합물(N-3)에 상응한다.

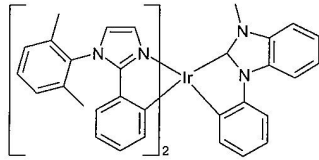
[0574] 합성은 WO 2006067074와 유사하다.

[0575]  $\lambda_{PL}(PMMA)$ : 472 nm, 491 nm, 양자 수율<sub>PL</sub> : 2%

[0576] 착체 CEm1은 그것의 매우 낮은 인광 양자 수율로 인해, OLED 내의 에미터로서 적당하지 않다.

[0577] 실시예 16(비교예, 본 발명에 따르지 않음):

[0578] 착체 CEm2:



CEm2

[0579]

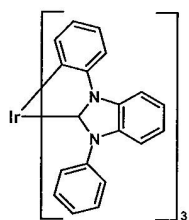
[0580] CEm2는 WO 2006121811로부터의 화합물 "화합물 3"에 상응한다. 합성은 WO 2006121811과 유사하였다.

[0581] 실시예 17:

[0582] OLED의 생성 - 상이한 에미터들의 비교

[0583] 양극으로 사용되는 ITO 기판을 먼저 LCD 생산용 시판 세제(테코넥스(Deconex)® 20NS, 및 250ORGAN-ACID® 중 화제)로 세정한 후, 초음파 조에서 아세톤/이소프로판올 혼합물 중에 세정한다. 가능한 유기 잔류물을 제거하기 위해, 기판을 추가 25분 동안에 오존 오븐에서 연속 오존 흐름에 노출한다. 이 처리는 또한 ITO의 정공 주입 성질을 향상시킨다. 그 다음, 플렉스코어(Plexcore)사의 정공 주입 층 AJ20-1000, 또는 H. C. 스타크(H. C. Starck)사의 PEDT:PSS(CLEVIOS P AR 4083)를 용액으로부터 스피닝한다.

[0584] 그 후, 이하에 기재된 유기 물질을 대략 0.5 내지 5 nm/분의 속도로 약  $10^{-7}$  내지  $10^{-9}$  mbar로 세정된 시판에의 증착에 의해 적용한다. 기판에 적용된 정공 전도체 및 엑시톤 차단제는 두께가 45 nm인 Ir(DPBIC)<sub>3</sub>이고, 이 중 먼저 35 nm를 MoO<sub>x</sub>로 도핑하여 전도성을 향상시킴),

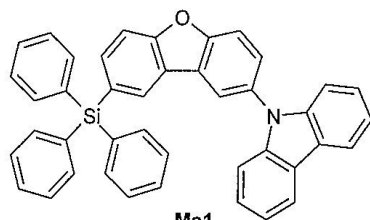


Ir(DPBIC)<sub>3</sub>

[0585]

[0586] (제조에 대해, 출원 PCT/EP/04/09269에서의 Ir 착체 (7)을 참조함).

[0587] 후속하여, 에미터 및 화합물 Ma1의 혼합물을 두께 40 nm로 증착에 의해 적용하고, 후자의 화합물은 매트릭스 물질로서 기능한다. 후속하여, 물질 Ma1은 엑시톤 및 정공 차단제로서 10 nm의 두께로 증착에 의해 적용된다.



Ma1

[0588]

[0589] 그 다음, 전자 수송체 BCP(2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린)을 두께 20 nm로 증착에 의해 적용하고, 이는 0.75 nm-두께의 불화리튬 층이고, 마지막으로 100 nm-두께의 Al 전극이다. 모든 성분들을 불활성 질소 분

위기 하에 유리 뚜껑에 접착 결합시킨다.

[0590] OLED를 특징분석하기 위해, 전계발광 스펙트럼을 상이한 전류 및 전압에서 기록한다. 또한, 전류-전압 특성을 방출된 광 출력과 조합하여 측정한다. 광 출력은 광분석기(photometer)를 이용한 보정에 의해 광분석 매개변수로 전환될 수 있다. 다이오드의 수명  $t_{1/2}$ 는 휘도가 초기 값의 50%로 떨어지는 데 걸리는 시간으로 정의된다. 수명 측정은 일정 전류에서 수행된다.

[0591] 상기 OLED 구조에서의 상이한 에미터에 대해, 하기 전기광학 데이터가 취득된다:

표 13

에미터	CIE	300 nits에서의 Cd/A	1000 nits에서의 $t_{1/2}$ (CEm2의 값으로 정규화됨)
Em1-i	0.22/0.37	23.2 cd/A	594%
Em3-i	0.18/0.28	19.5 cd/A	135%
Em2-i	0.17/0.25	24.5 cd/A	245%
CEm2	0.20/0.35	10.3 cd/A	100%

[0593] 실시예 18:

[0594] 한 에미터의 상이한 이성질체들의 비교

[0595] 예로서, OLED 성능에 대한 상이한 이성질체들의 영향이 두 경우에서 나와 있다. 상기 OLED 구조에서의 상이한 에미터 및 이성질체에 대해, 하기 전기광학 데이터가 취득된다:

표 14

에미터	CIE	300 nits에서의 Cd/A	1000 nits에서의 $t_{1/2}$ (Em1-s의 값으로 정규화됨)
Em1-s	0.19/0.31	18.2 cd/A	100%
Em1-i	0.22/0.37	23.2 cd/A	406%

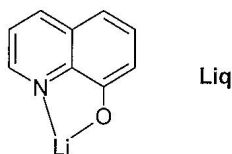
표 15

에미터	CIE	300 nits에서의 Cd/A	1000 nits에서의 $t_{1/2}$ (Em2-s의 값으로 정규화됨)
Em2-s	0.21/0.35	15.4 cd/A	100%
Em2-i	0.17/0.25	24.5 cd/A	178%

[0598] 실시예 19:

[0599] 혼합 전자 전도체 층의 영향

[0600] 하기 실시예는 BCP 전자 전도체 층의 Liq를 이용한 도핑의 영향을 나타낸다.



[0601]

[0602] 하기 OLED 구조가 사용된다:

[0603] ITO - 40 nm AJ20-1000 - MoO<sub>x</sub>와 혼합된 35 nm Ir(DPBIC)<sub>3</sub> - 10 nm Ir(DPBIC)<sub>3</sub> - 20 wt% Em1-i와 혼합된 40 nm

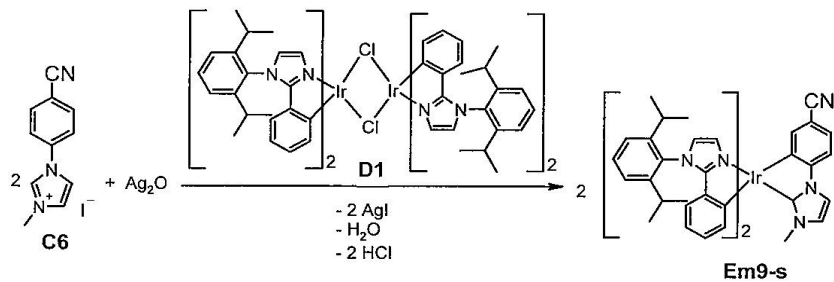
**Ma1** - 5 nm **Ma1** - 40 nm 전자 전도체 - 1 nm Liq - 100 nm Al. 실시예 17과 유사하게 OLED의 제조를 수행한다.

표 16

전자 전도체	CIE	300 nits에서의 Cd/A	1000 nits에서의 t <sub>1/2</sub> (BCP의 값으로 정규화됨)
BCP	0.22/0.36	16.8 cd/A	100%
BCP:Liq 50%	0.21/0.36	21.7 cd/A	170%

실시예 20:

착체 **Em9-s**:



이미다졸륨 요오드화물 **C6**은 WO 2006056418에서의 화합물 "실시예 1"의 예비중간체에 상응한다. WO 2006056418에서의 화합물 "실시예 1"의 합성과 유사하게 합성을 수행한다.

2.0 g(6.4 mmol)의 이미다졸륨 요오드화물 **C6** 및 0.75 g(3.2 mmol)의  $\text{Ag}_2\text{O}$ 를 50℃에서 4시간 동안 170 ml의 무수 아세트니트릴 중에 교반한다. 이어서, 용매를 진공 하에 제거한다. 잔류물에 170 ml의 무수 톨루엔을 첨가하고, 3.6 g(2.1 mmol)의 클로로이랑체 **D1**을 첨가한다. 후속하여, 그것을 24시간 동안 환류 하에 가열한다. 냉각한 후, 반응 혼합물을 여과한다. 여과액에서 진공 하에 용매를 제거한다. 잔류물에 염화메틸렌을 첨가하고 물로 세정하며, 건조 후 감소시키고, 크로마토그래피(시클로헥산/아세트산 에스테르)에 의해 정제하여, 0.26 g의 **Em9-s**를 단리하고(6%), 착체 **Em9-s**와 착화되지 않은 페닐이미다졸리간드와의 혼합 분획 0.63 g 및 역 리간드 화학양론(stoichiometry)을 갖는 추가의 착체 0.10 mg의 혼합 분획을 수득한다. 또한, 1.3 g의 클로로이랑체 **D1**(36%)를 재단리한다.

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz):  
 $\delta$ = 0.83 (d, 3H), 0.89 – 0.96 (m, 4 x d, 12 H로 해석될 수 개연성이 있음), 1.00 (d, 3H), 1.13 (d, 3H), 1.15 (d, 3H), 1.98 (sept, 1H), 2.31 (sept, 1H), 2.70 (sept, 1H), 2.74 (sept, 1H), 3.21 (s, 3H), 6.10 (dd, 2H), 6.37 – 6.45 (m, 4H), 6.56-6.65 (m, 4H), 6.70 (dd, 1H), 6.83 (m, 1H), 6.95 (d, 1H), 7.06 (m, 1H), 7.19 (m, 2H), 7.25 - 7.31 (m, 4H), 7.44-7.50 (m, 3H).

MS (Maldi):

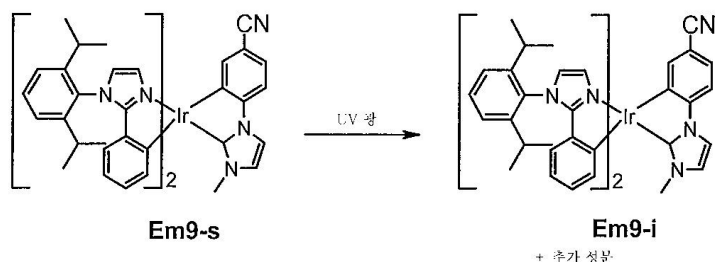
m/e=979 (M+H)+

광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

$\lambda_{\text{max}}$ =456, 487 nm, CIE: (0.20; 0.30)

실시예 21:

[0616] 착체 **Em9-i**:



[0617]

[0618] 2000 ml의 아세토니트릴 중의 0.17 g의 착체 **Em9-s**의 용액에 흑광 청색 램프(오스람, L18W/73,  $\lambda_{\max}$ =370-380 nm)로 9.5시간 동안 15℃에서 조사한다. 용매를 진공 하에 제거한다. 잔류물을 크로마토그래피(시클로헥산/아세트산 에스테르)에 의해 정제한다. 0.055 g의 **Em9-i** (32%, 미량의 추가의 착체로 오염됨)가 수득되고, 또한 0.075 g의 재결정화된 **Em9-s**(44%)가 단리된다.

[0619]  $^1\text{H-NMR}$  [ $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz, 샘플은 예를 들어 0.77 (m), 0.83 (d), 1.04 (d), 1.21 (m), 1.92 (sept), 2.34 (sept), 7.20-7.23 (m), 7.31 - 7.34 (m)에서 관찰가능한 미량의 추가의 착체를 포함함]:

[0620]

[0621] MS (Maldi):

[0622]  $m/e=979$  (M+H)+

[0623] 광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

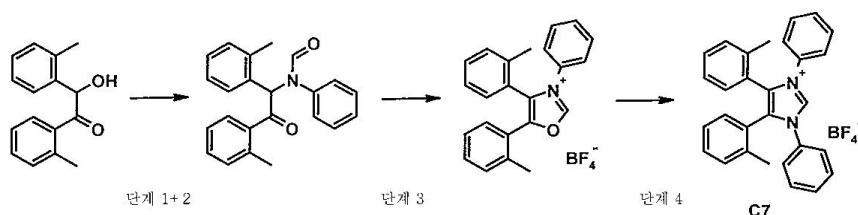
[0624]  $\lambda_{\max}=457, 485$  nm, CIE: (0.17; 0.26)

[0625] 이성질체 **Em9-i**의 광발광 양자 효율은 이성질체 **Em9-s**의 양자 효율의 1.14배 값을 가진다.

[0626] 실시예 22:

[0627] 착체 **Em10-5**:

[0628] 1,3-디페닐-4,5-디-*o*-톨릴-이미다졸륨-테트라플루오로보레이트 **C7**



[0629]

[0630] 단계 1: 2-아닐리노-1,2-디-*o*-톨루엔-에타논의 제조

[0631] 18.00 g(74.91 mmol)의 *o*-톨루엔의 용액을 100 ml의 무수 톨루엔에 용해시키고, 21.00 g(224.9 mmol)의 아닐린 및 0.2 g의 농축 HCl을 실온에서 첨가한다. 반응 혼합물을 10시간 동안 환류 하에 가열하여 비등시키고, 형성된 물을 회전 배출한다. 실온으로 냉각시킨 후 반응 혼합물을 100 ml의 아세트산 에스테르로 희석한 후, 각각 70 ml의 1 n HCl로 2회 진탕한다. 후속하여, 유기상을 100 ml의 물 및 70 ml의 염수로 세정하고, 황산마그네슘으로 건조시키며, 황색 수지로 감량시킨다. 조 생성물을 용리액으로서 염화메틸렌을 이용하여 실리카 겔 상에서 크로마토그래피에 의해 정제한다. 용매를 제거한 후, 19.6 g(83%)의 황색 오일을 수득한다.

[0632] 단계 2: N-(2-옥소-1,2-디-*o*-톨릴-에틸)-N-페닐-포름아미드의 제조

[0633] 80 ml의 테트라히드로푸란 중의 19.50 g(58.7 mmol)의 2-아닐리노-1,2-디-*o*-톨릴-에타논의 용액을 7.80 g(88.1

mmol)의 아세틸포르밀 무수물에 용해시키고, 실온에서 17시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 로타랩(rotarap)에서 시럽으로 감량시키고, 먼저 10:1의 비에서 이어서 1:1의 비의 용리액으로서의 석유 에테르-아세트산 에스테르 용액을 이용하여 실리카 겔에서 정제한다. 용매를 제거한 후, 18.4 g(91%)의 거의 무색인 시럽을 수득한다.

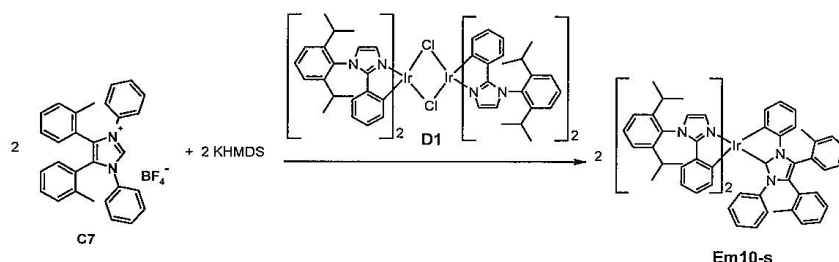
[0634] 단계 3: 3-페닐-4,5-디-*o*-톨릴-옥사졸리움-테트라플루오로보레이트의 제조

[0635] 9.80 g(55.9 mmol)의 50% 테트라플루오로붕산에 63 g의 트리플루오로아세트산 무수물을 15분 내에 5 내지 10℃에서 주사기로 첨가한다(발열). 후속하여, 냉각된 용액을 10분 내에 실온에서 60 g의 트리플루오로아세트산 무수물 중의 20.00 g(55.3 mmol)의 N-(2-옥소-1,2-디-*o*-톨릴-에틸)-N-페닐-포름아미드의 현탁액에 적가하고, 이로써 온도가 28℃로 증가된다. 반응 혼합물을 3시간 동안 20 내지 25℃에서 교반한 후, 로타랩에서 오일로 감소시킨다. 100 ml의 디에틸에테르를 첨가한 후, 9.7 g(55.3 mmol)의 50 % 테트라플루오로보론산을 교반에 의해 적가하고, 이로써 석출물이 형성된다. 1시간 동안 교반한 후에, 석출물을 취출하고, 10 ml의 디에틸 에테르로 각각 세정하고, 건조시킨다. 22.55 g(99%)의 무색 분말을 수득한다.

[0636] 단계 4: 1,3-디페닐-4,5-디-*o*-톨릴-이미다졸륨-테트라플루오로보레이트 C7의 제조

[0637] 35 ml의 에탄올 중의 3.50 g(8.47 mmol)의 3-페닐-4,5-디-*o*-톨릴-옥사졸리움테트라플루오로보레이트의 현탁액에 1.58 g(16.9 mmol)의 아닐린을 첨가한다. 실온에서 45분 동안 교반한 후, 용액을 오렌지색 수지로 감소시키고, 후속하여 15 mol의 황산을 첨가한다. 용액을 실온에서 2시간 동안 교반한다. 반응 용액을 300 ml의 빙수 중에서 교반하고, 이로써 석출물이 형성된다. 현탁액을 추가 1시간 동안 교반한 후, 흡인 여과기로 여과한다. 잔류물을 물로 세정하고, 큰 정도로 흡인 건조시킨다. 잔류물을 40 ml의 디에틸 에테르와 함께, 엘렌마이어(Erlenmeyer) 플라스크에서 교반하고, 흡인하며, 10 ml의 디에틸 에테르로 세정한다. 디에틸 에테르 중에서의 교반 후에 흡인 여과하는 것을 2회 반복한다. 건조시킨 후, 3.10 g(71% d.th.)의 무색 분말을 수득한다.

[0638] 착체 Em10-s:



[0639]

[0640] 25 ml의 톨루엔 중의 1.61 g(3.30 mmol)의 1,3-디페닐-4,5-디-*o*-톨릴-이미다졸륨 테트라플루오로보레이트의 현탁액을 실온에서 아르곤 하에 15분 동안 교반한 후, 0℃로 냉각시킨다. 톨루엔 중의 12.6 ml(6.29 mmol)의 0.5 M 칼륨-비스(트리메틸실릴)-아미드를 1분간 첨가한다. 이어서, 반응 용액을 0 내지 12℃에서 15분 동안 교반하고, 후속하여 2.50 g(1.50 mmol)의 비스(이리듐-μ-클로로-착체) D1을 첨가한다. 그것을 5 ml의 톨루엔으로 퍼징한다. 오렌지-황색 현탁액을 환류 하에 가열하여 비등시킨다. 75분 후에, 반응 용액을 실온으로 냉각시키고, 20 ml의 아세트산 에스테르로 희석한 후, 20 ml의 인산염 용액 (ph 7)으로 2회 추출한다. 유기상을 분리하고, 황산나트륨으로 건조시킨 후, 감량 건조시킨다. 고체를 곧 환류 하에 150 ml의 메탄올 중에 가열하여 비등시킨다. 현탁액을 50℃로 냉각시킨 후, 고체를 흡인하고, 10 ml의 메탄올로 각각 2회 세정하며, 건조시킨다. 2.52 g의 황색 고체를 수득한다. 여과액을 40 ml로 감량하고, 실온에서 하룻밤 동안 교반시킨다. 석출물을 흡인하고, 소량의 메탄올로 세정하며, 건조시킨다. 0.28 g의 황색 고체를 수득하고, 이를 잔류물과 조합한다.

[0641] 이에 따라, 모두 함께, 282 내지 283℃에서 용융하는 2.80 g(th.의 78%)의 황색 고체를 수득한다.

[0642] MS (Maldi):

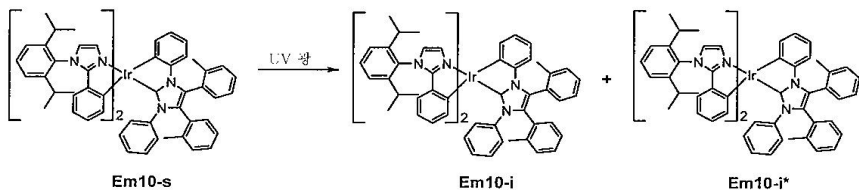
[0643] m/e=1197.4 (M+H)<sup>+</sup>

[0644] 광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0645] λ<sub>max</sub>=464, 493 nm, CIE: (0.19; 0.35)

[0646] 실시예 23:

[0647] 착체 **Em10-i** 및 **Em10-i\***:



[0648]

[0649] 0.50 g(0.42 mmol)의 **Em10-s**를 300 ml의 아세토니트릴에 용해시키고, 여기에 5.5시간 동안 수은 압력 디핑 램프 TQ 150 (365 nm, 150 W)로 조사한다. 용액에서 용매를 제거한다. 잔류물을 가열에 의해 30 ml의 메탄올에 용해시킨다. 냉각 후, 석출물을 흡인하고, 메탄올로 세정하며, 건조시킨다. 착체 이성질체 **Em10-i** [0.19 g(38%)]를 316 내지 317℃에서 용융하는 황색 분말로서 수득한다.

[0650] MS (Maldi):

[0651]  $m/e=1196.7 (M)^+$

[0652] 광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0653]  $\lambda_{max}=460, 491 \text{ nm}$ , CIE: (0.18; 0.32)

[0654] 여과액을 감량 건조시키고, 10 ml의 n-펜탄과 함께, 교반하며, 흡인하고, 펜탄으로 세정하며, 건조시킨다. 착체 이성질체 **Em10-i\*** [0.16 g(32%)]를 207 내지 209℃에서 용융하는 황토 황색 고체로서 수득한다.

[0655] MS (Maldi):

[0656]  $m/e=1197.8 (M+H)^+$  광발광(필름 내, PMMA 중 2%):

[0657]  $\lambda_{max}=458, 490 \text{ nm}$ , CIE: (0.19; 0.33)

[0658] I) **Em1-s**에 관한 다이오드 실시예:

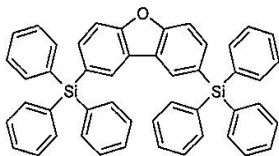
[0659] 실시예 24 - **Em1-s**에 대한 매트릭스 물질의 영향:

[0660] 다이오드 구조:

[0661] ITO - PEDT:PSS - 0 중량% MoO<sub>x</sub>와 혼합된 35 nm Ir(DPBIC)<sub>3</sub> - 10 nm Ir(DPBIC)<sub>3</sub> - 15 중량% **Em1-s**와 혼합된 40 nm 매트릭스 **MaX** - 10 nm LB1 - 20 nm 전자 전도체 BCP - 0.70 nm LiF - 100 nm Al.

[0662] 실시예 17과 유사한 방식으로 다이오드의 제조를 수행한다.

[0663] 엑시톤 및 정공 차단제 **LB1**:

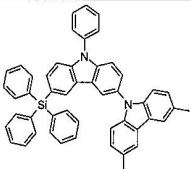
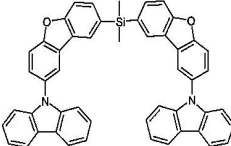
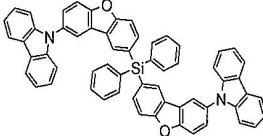
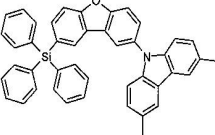
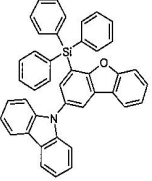


[0664]

표 17

매트릭스 "MaX"	CIE	300 nits에서의 전압(V)	300 nits에서의 Cd/A	300 nits에서의 EQE 및 Ma2의 값에 정규화됨
<b>Ma2</b> <sup>1</sup>	0.20/0.36	8.8	10.1	100%
<b>Ma3</b>	0.20/0.32	5.5	20.5	166%
<b>Ma4</b> <sup>2</sup>	0.19/0.32	6.5	16.3	134%
<b>Ma5</b>	0.20/0.31	6.2	13.9	115%
<b>Ma6</b> <sup>3</sup>	0.19/0.30	6.2	22.8	195%

- [0666] <sup>1</sup> 이 경우에, 40 nm BCP를 전자 전도체로서 사용함.
- [0667] <sup>2</sup> 이 경우에, 30 nm BCP를 전자 전도체로서 사용함.
- [0668] <sup>3</sup> 이 경우에, PEDT:PSS 대신에 AJ20-1000의 플렉스코어를 정공 주입 층으로 사용함.
- [0669] 매트릭스 "**MaX**" (= **Ma2-Ma6**)의 구조 및 WO 2010/079051에서의 이의 합성에 대한 설명

매트릭스 " <b>MaX</b> "	하기 명칭으로 WO2010/079051에 기재된 MaX의 합성	구조
<b>Ma2</b>	BS 10	
<b>Ma3</b>	BS15	
<b>Ma4</b>	BS18	
<b>Ma5</b>	BS20	
<b>Ma6</b>	BS 31	

[0670]

[0671] II) Em1-i에 관한 다이오드 실시예:

[0672] 실시예 25 - Em1-i에 대한 매트릭스 물질의 영향:

[0673] 구조 A: ITO - AJ20-1000 - 50 중량% MoO<sub>3</sub>과 혼합된 35 nm Ir(DPBIC)<sub>3</sub> -10 nm Ir(DPBIC)<sub>3</sub> - 20 중량% Em1-i과 혼합된 40 nm "**MaX**" - 5 nm "**MaX**" - 40 nm 전자 전도체 BCP:Liq 50 중량% - 1 nm Liq - 100 nm Al. 실시예 17과 유사하게 다이오드의 제조를 수행한다.

[0674] 구조 B: ITO - AJ20-1000 - 10 중량% MoO<sub>3</sub>과 혼합된 35 nm Ir(DPBIC)<sub>3</sub> - 10 nm Ir(DPBIC)<sub>3</sub> - 15 중량% **Em1-i**과 혼합된 40 nm "**MaX**" - 10 nm **LB1** - 20 nm 전자 전도체 BCP - 0.70 nm LiF - 100 nm Al. 실시예 17과 유사한 방식으로 다이오드의 제조를 수행한다.

표 18

[0675]

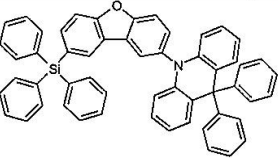
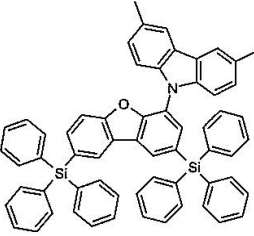
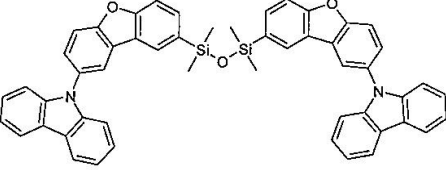
매트릭스 <b>Max</b>	다이오드 구조	CIE	300 nits에서의 전압(V)	300 nits에서의 Cd/A	300 nits에서의 EQE 및 <b>Ma7</b> 의 값에 정규화됨
<b>Ma7</b>	구조 A	0.22/ 0.36	5.8	18.8	100%



Ma8	구조 B	0.23/ 0.38	7.0	17.3	91%
Ma9	구조 C	0.23/ 0.38	4.3	17.9	95%

[0676] <sup>1</sup> 이 경우에, 5 nm Ma1을 엑시톤 정공 차단제로서 사용한다.

[0677] 매트릭스 **MaX**의 구조 및 WO2010/079051에서의 이의 합성에 대한 설명:

매트릭스 MaX	WO2010/079051 내 화합물	구조
Ma7	BS26	
Ma8	BS29	
Ma9	BS28	

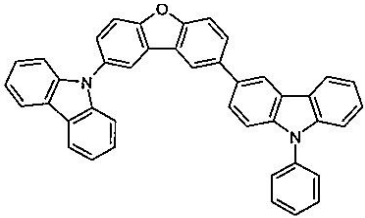
[0678]

[0679] 실시예 26 - **Em1-i**에 대한 매트릭스 물질의 영향:

[0680] ITO -AJ20-1000 - 10중량% MoO<sub>x</sub>과 혼합된 10 nm **Ma1** - 15 중량% **Em1-i** 및 15 중량% **Ma1**과 혼합된 10 nm **Ma10** - 5 nm **Ma1** - 20 중량% **Ma1**와 혼합된 20 nm 전자 전도체 BCP - 1 nm CS<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> - 100 nm Al. 실시예 17과 유사한 방식으로 다이오드의 제조를 수행한다.

[0681] 매트릭스 물질 **Ma10**의 합성이 JP 2009046408, 화합물 B, [0039], p.13에 기재되어 있다.

[0682] **Ma10**



[0683]

표 19

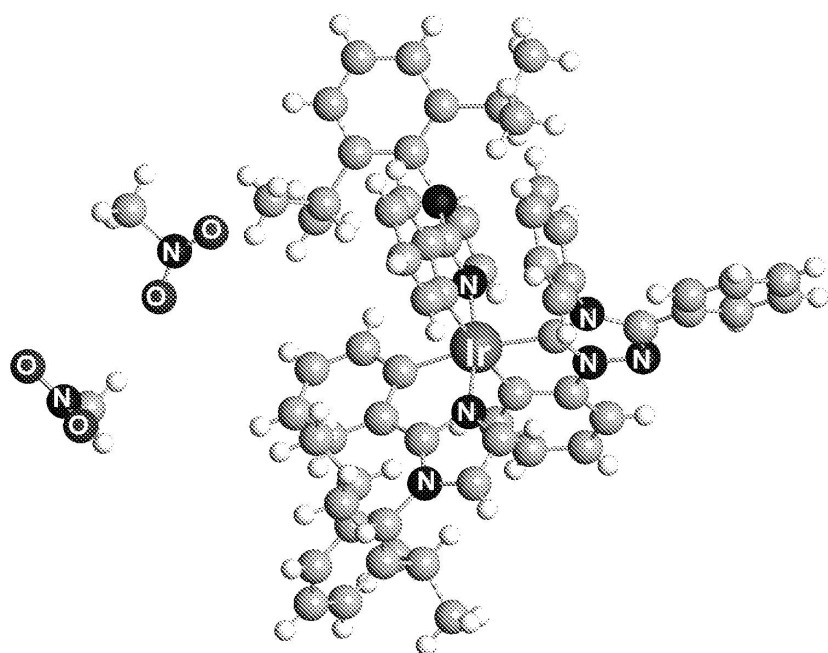
[0684]

매트릭스 MaX	CIE	300 nits에서의 전압(V)
Ma10	0.19/0.35	3.8

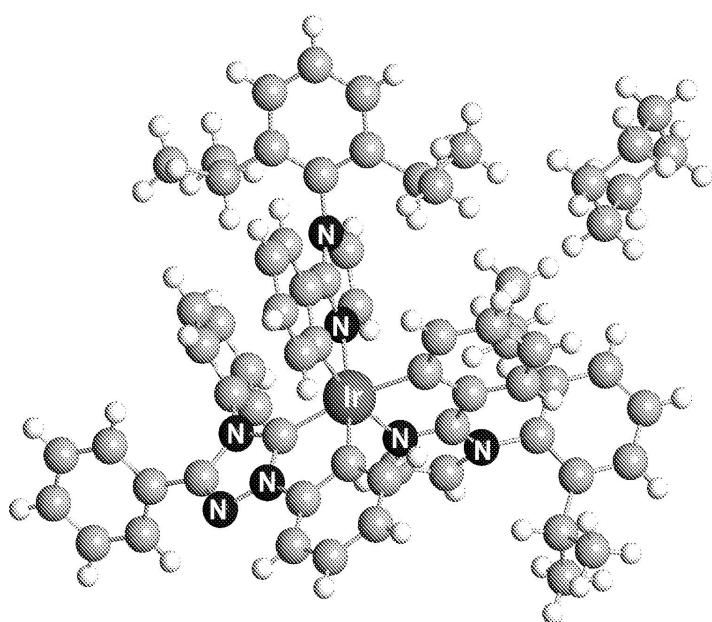


도면

도면1



도면2



도면3

