



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2013-0031827
 (43) 공개일자 2013년03월29일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 17/02 (2006.01) *H01L 51/54* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2012-7027638
 (22) 출원일자(국제) 2011년02월17일
 심사청구일자 없음
 (85) 번역문제출일자 2012년10월23일
 (86) 국제출원번호 PCT/EP2011/000766
 (87) 국제공개번호 WO 2011/116857
 국제공개일자 2011년09월29일
 (30) 우선권주장
 61/316,619 2010년03월23일 미국(US)

(71) 출원인
메르크 파텐트 게엠베하
 독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
 (72) 발명자
슈퇴셀 필립
 독일 60487 프랑크푸르트 암 마인 조핀슈트라세 30
마이어 헤르만
 독일 72074 튀빙겐 빅토르-레너-슈트라세 44
카스카 윌리엄 씨
 미국 93117 캘리포니아주 골레타 비아 볼자노 991
 (74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 16 항

(54) 발명의 명칭 **유기 전계발광 소자용 재료**

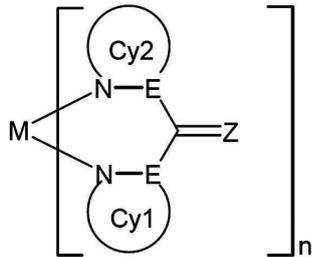
(57) 요약

본 발명은 유기 전계발광 소자용 금속 착물 및 이러한 착물을 함유하는 소자에 관한 것이다.

특허청구의 범위

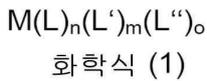
청구항 1

화학식 (2) 의 하부구조 M(L)_n 를 함유하는,



화학식 (2)

화학식 (1) 의 화합물:



[식 중, 사용되는 기호 및 지수는 하기 의미를 갖고,

M 은 전이금속이고;

E 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 sp²-혼성화된 탄소 또는 질소 원자이고;

Z 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 C(R)₂ 또는 NR 이고;

Cy1, Cy2 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 치환되거나 비치환된 헤테로시클 (이는 N 원자를 통해 M 에 배위결합되고, 기 Z 에의 결합을 가질 수 있음) 이고;

R 은 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 H, D, F, CN, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (각 경우에서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, Ge(R²)₂, Sn(R²)₂, -O-, -S-, -NR²-, -(C=O)-, -(C=NR²)-, -P=O(R²)-, SO, SO₂ 또는 -CONR²- 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 F 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 각 경우에서 하나 이상의 비방향족 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 또는 이러한 계들 중 2, 3 또는 4 개의 조합이고; R 은 고리 Cy1 및/또는 Cy2 중 하나 또는 두 개와 함께 또다른 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수 있고;

R² 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이에서 하나 이상의 H 원자는 F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 둘 이상의 인접한 치환기 R² 는 이들이 결합되는 원자와 함께 모노- 또는 폴리시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고;

n 은 1, 2, 또는 3 이고;

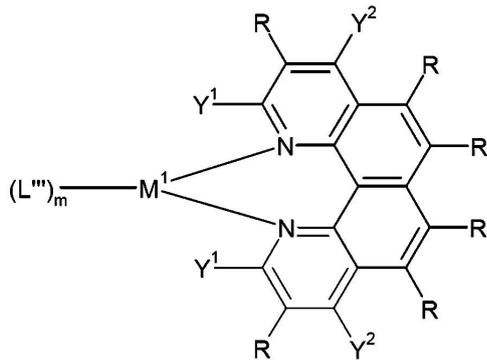
화학식 (1) 에서 리간드 L' 및 L'' 는 동일하거나 상이하고, 리간드 L 에 결합될 수 있는 한자리, 두자리 또는 세자리 킬레이트 리간드로부터 선택되고;

m, o 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 0, 1 또는 2 이고; n + m + o = 2 또는 3 이고;

단, n = 1 이고, L 이 네자리 리간드인 경우 화학식 (2) 는 없거나 하나만의 M-C 결합을 갖고 또는 화학식 (2)

는 네자리 시클릭 리간드를 갖고;

또한, 단 하기 화학식의 화합물이 본 발명으로부터 제외됨:



(식 중, R 은 상기에서 명시된 바와 동일한 의미를 갖고, 또한

M^1 은 전이 금속이고;

Y^1 은 각 경우에서 동일하거나 상이하게 H, 할로젠, 카르복실, 카르복실레이트, 알킬 또는 관능화된 알킬기, OH 또는 아미노기이고;

Y^2 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 H, 할로젠, 알콕시, OH, 니트로 또는 아미노기이고;

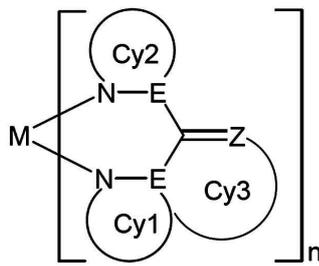
L''' 는 리간드임).

청구항 2

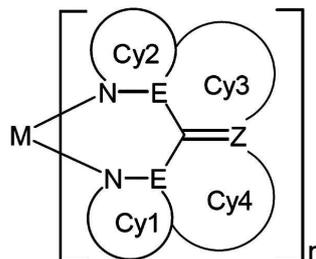
제 1 항에 있어서, Cy1 및 Cy2 가 또한 치환될 수 있는 헤테로방향족기인 화합물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 화학식 (2) 의 부분 구조는 화학식 (3) 또는 (4) 로 표현되는 화합물:



화학식 (3)

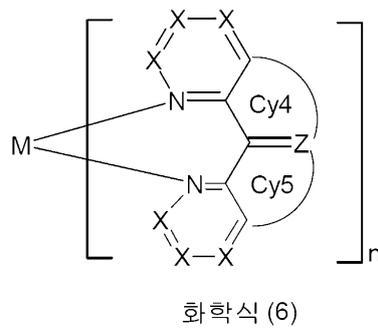
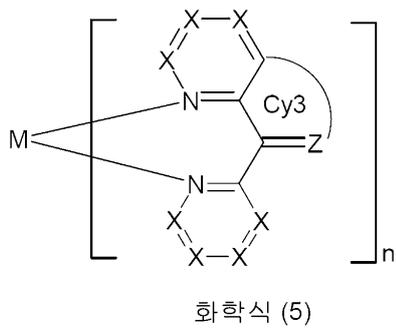


화학식 (4)

[식 중, 기호 및 지수는 제 1 항에서 정의한 바와 동일한 의미를 갖고, 화학식 (3) 에서의 치환기 Z 는 원 Cy3 의 부분이고, Cy1 또는 Cy2 와 함께 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고, 화학식 (4) 에서의 치환기 Z 는 2 개의 원 Cy3 및 Cy4 의 부분이고, Cy1 및 Cy2 와 함께 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성함].

청구항 4

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (2) 의 부분 구조가 화학식 (5) 또는 (6) 으로 표현되는 화합물:



[식 중, 기호 및 지수는 상기에서 정의한 바와 동일한 의미를 갖고:

X 는 최대 2 곳에서 인접한 X 가 N 으로 표현되는 경우 각 경우에서 동일하거나 상이하게 C(R¹) 또는 N 이고;

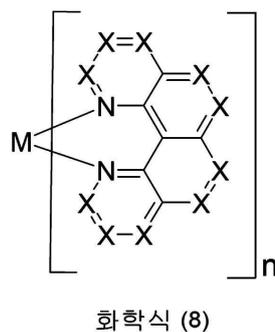
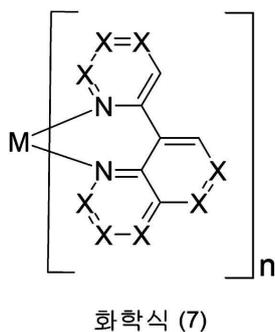
R¹ 은 각 경우에서 동일하거나 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, CNO, NCS, SCN, CF₃, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 시클릭 또는 폴리시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이의 각각은 하나 이상의 기 R² 로 대체될 수 있고, 각 경우에서 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, Ge(R²)₂, Sn(R²)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR², P(=O)(R²), SO, SO₂, NR², O, S 또는 CONR² 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음), 또는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계, 또는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 상기 계의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 두 개 이상의 인접한 치환기 R¹ 은 이들이 결합되는 원자와 함께 모노시클릭 또는 헤테로시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고, 상기 고리계는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있고;

R² 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이에서 하나 이상의 H 원자는 F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 하나 이상의 인접한 치환기 R² 는 이들이 결합되는 원자와 함께 모노- 또는 폴리시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고;

Cy3, Cy4, Cy5 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 이들이 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하도록 선택됨].

청구항 5

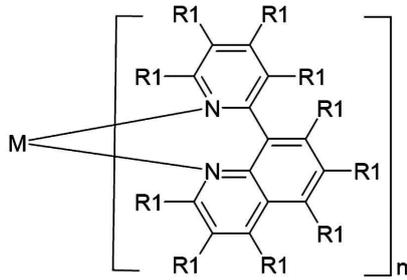
제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (2) 의 부분 구조가 화학식 (7) 또는 (8) 로 표현되는 화합물:



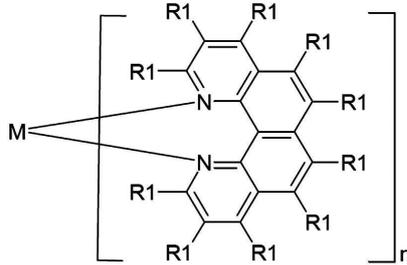
[식 중, 기호 및 지수는 제 1 항 및 제 4 항에서 정의한 바와 동일한 의미를 가짐].

청구항 6

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (2) 의 부분 구조가 화학식 (9) 또는 (10) 로 표현되는 화합물:



청구항 (9)



청구항 (10)

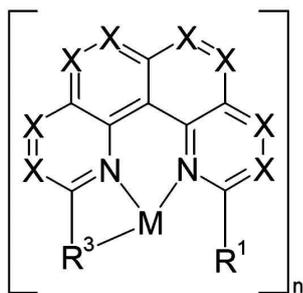
[식 중, 기호 및 지수는 제 1 항 및 제 4 항에서 정의한 바와 동일한 의미를 가짐].

청구항 7

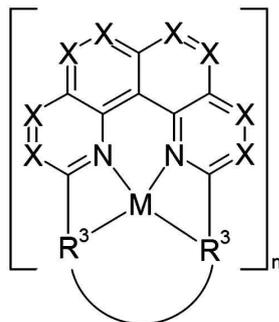
제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서, 금속 M 이 Zr, Hf, Mo, W, Ru, Os, Rh, Ir, Ni, Pd, Pt, Cu, Ag 및 Au, 특히 바람직하게는 Ir, Pt 및 Cu 로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물.

청구항 8

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (2) 의 부분 구조가 화학식 (11) 또는 (12) 로 나타내는 세자리 또는 네자리 리간드인 화합물:



화학식 (11)

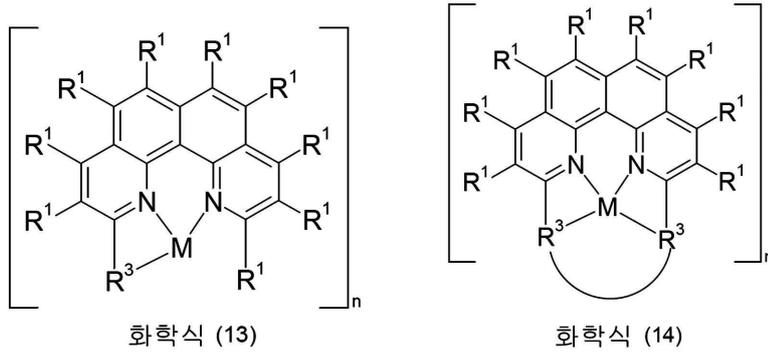


화학식 (12)

[식 중, 기호 및 지수는 제 1 항 및 제 4 항에서 정의된 바와 동일한 의미를 갖고, R³ 는 M 에 배위결합되는 기이고, 5-, 6-, 또는 7-고리 킬레이트가 형성되도록 선택되고, R³ 는 C, N, P, O 또는 S 또는 이들의 조합으로부터 선택되는 공여기를 포함하고; 화학식 (12) 에서의 반원은 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는데 필요한 기를 표현하나, 필수적으로 존재하는 것은 아님].

청구항 9

제 8 항에 있어서, 화학식 (13) 또는 (14) 로부터 선택되는 화합물:



[식 중, 기호 및 지수는 제 1 항 및 제 4 항에서 정의된 바와 동일한 의미를 갖고, R³ 는 바람직하게는 공여기 C, N, P, O 또는 S 또는 이들의 조합을 통해 금속 M 에 결합됨].

청구항 10

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서, 리간드 L' 및 L'' 가 일산화탄소, NO, 이소니트릴, 아민, 포스핀, 포스파이트, 아르신, 스티빈, 질소-함유 헤테로시클릭 화합물, 수소화물, 중수소화물, 할라이드 F, Cl, Br 및 I, 알킬아세틸라이드, 아릴아세틸라이드, 시아나이드, 시아네이트, 이소시아네이트, 티오시아네이트, 이소티오시아네이트, 지방족 또는 방향족 알코올레이트, 지방족 또는 방향족 티오알코올레이트, 아마이드, 카르복실레이트, O²⁻, S²⁻, 니트렌 (이는 R-N=M 형태의 배위결합을 초래하고, R 은 일반적으로 치환기를 나타냄), N³⁻, 디아민, 이민, 디이민, 2 개의 질소 원자를 함유하는 헤테로시클릭 화합물, 디포스핀, 1,3-케토네이트로부터 유도된 1,3-디케토네이트, 3-케토에스테르로부터 유도된 3-케토네이트, 아미노카르복실산으로부터 유도된 카르복실레이트, 살리실이민으로부터 유도된 살리실이미네이트, 디알코올로부터 유도된 디알코올레이트, 디티올로부터 유도된 디티올레이트, 질소-함유 헤테로시클릭 화합물의 보레이트, 금속과 함께 하나 이상의 금속-탄소 결합을 함유하는 시클로금속화된 5-원 고리를 형성하는 두자리 일가음이온성 리간드, η⁵-시클로펜타디에닐, η⁵-펜타메틸시클로펜타디에닐, η⁶-벤젠 또는 η⁷-시클로헵타트리에닐 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있음) 로부터 선택되는 화합물.

청구항 11

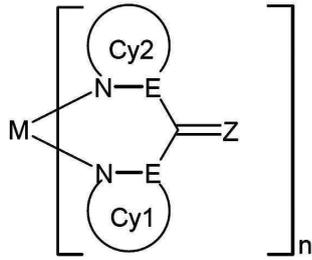
라디칼 R 및 R¹ 의 하나 이상이 올리고머, 중합체 또는 덴드리머에의 결합을 나타내는, 제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 하나 이상을 포함하는 올리고머, 중합체 또는 덴드리머.

청구항 12

전자 부품에서의 제 1 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 용도.

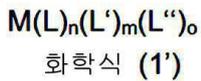
청구항 13

화학식 (2) 의 하부구조 M(L)_n 를 함유하는,



화학식 (2)

화학식 (1') 의 화합물을 포함하는 전자 부품:



[식 중, 사용되는 기호 및 지수는 하기 의미를 갖고,

M 은 전이 금속이고;

E 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 sp²-혼성화된 탄소 또는 질소 원자이고;

Z 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 C(R)₂ 또는 NR 이고;

Cy1, Cy2 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 치환되거나 비치환된 헤테로시클 (이는 N 원자를 통해 M 에 배위결합되고, 기 R 에의 결합을 가질 수 있음) 이고;

R 은 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 H, D, F, CN, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기 (각 경우에서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, Ge(R²)₂, Sn(R²)₂, -O-, -S-, -NR²-, -(C=O)-, -(C=NR²)-, -P=O(R²)-, SO, SO₂ 또는 -CONR²- 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 F 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 각 경우에서 하나 이상의 비방향족 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 또는 이러한 계들 중 2, 3 또는 4 개의 조합이고; R 은 고리 Cy1 및/또는 Cy2 중 하나 또는 두 개와 함께 또다른 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수 있고;

R² 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로-방향족 고리계 (이에서 하나 이상의 H 원자는 F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 둘 이상의 인접한 치환기 R² 는 이들이 결합되는 원자와 함께 모노- 또는 폴리시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고;

n 은 1, 2, 또는 3 이고;

화학식 (1) 에서의 리간드 L' 및 L'' 는 동일하거나 상이하고, 리간드 L 에 결합될 수 있는 한자리, 두자리 또는 세자리 킬레이트 리간드로부터 선택되고;

m, o 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 0, 1 또는 2 이고; n + m + o = 2 또는 3 이고;

단, n = 1 이고, L 이 네자리 리간드인 경우 화학식 (2) 는 없거나 하나만의 M-C 결합을 갖고 또는 화학식 (2) 는 네자리 시클릭 리간드를 가짐].

청구항 14

제 13 항에 있어서, 유기 발광 소자/다이오드 (OLED), 유기 직접 회로 (O-IC), 유기 전계효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 전계 켄칭 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC) 및 유기 레이저 다이오드 (O-laser) 로 이루어진 군으로부터 선택되는 전자 부품.

청구항 15

제 13 항 또는 제 14 항에 있어서, 화학식 (1') 의 화합물이 바람직하게는 케톤, 포스핀 옥시드, 술폭시드, 술폰, 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 인돌로카르바졸 유도체, 아자카르바졸, 양극성 매트릭스 재료, 실란, 아자 보롤, 보로닉 에스테르, 트리아진 유도체 또는 아연 착물로부터 선택되는 매트릭스 재료와 조합하여 발광층에서 발광성 재료로서 사용되고, 및/또는 발광층에서 발광성 화합물용 매트릭스 재료로서 및/또는 정공-차단층에서 정공-차단 재료로서 및/또는 전자-수송층에서 전자-수송 재료로서 및/또는 정공-수송 또는 정공 주입층에서 정공-수송 재료로서 및/또는 엑시톤-차단층에서 전자-차단 또는 엑시톤-차단 재료로서 이용되는 유기 전계발광 소자.

청구항 16

제 1 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 또는 올리고머, 중합체 또는 덴드리머 및 하나 이상의 용매를 포함하는 제형.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 유기 전계발광 소자용 금속 착물 및 금속 착물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

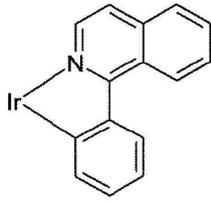
[0002] 유기 반도체를 기능성 재료로서 이용하는 유기 전계발광 소자 (OLED) 의 구조는, 예를 들어 US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 98/27136 에 기재되어 있다. 본원에서 이용되는 발광성 재료는 증가하고 있는 형광 대신 인광을 나타내는 유기-금속 착물이다 (M. A. Baldo *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **1999**, *75*, 4-6).

양자역학적 이유로, 인광성 에미터로서 유기금속 화합물을 사용하여 에너지 및 전력 효율을 4 배까지 증가시킬 수 있다. 그러나, 일반적으로 특히 금속 착물의 안정성, 효율, 작동 전압 및 수명과 관련하여 삼중항 방출을 나타내는 OLED에서 여전히 개선점이 요구된다. 따라서 또다른 개선점이 바람직하다. 또한, 유기 전계발광 소자에서 사용되는 다른 화합물, 예를 들어 매트릭스 재료 및 전자-수송 재료의 경우에서 여전히 개선점이 요구된다.

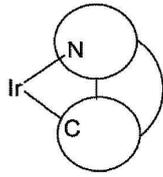
[0003] 선행 기술에 따라, 인광성 OLED 에서 사용되는 삼중항 에미터는 대개 이리듐 착물이다. 착물이 더 높은 열적 안정성을 가져 OLED 의 더 긴 수명을 초래하는 폴리포달 리간드 또는 크립테이트를 함유하는 금속 착물을 이용함으로써 이러한 OLED 에서의 개선이 달성되었다 (WO 04/081017, WO 05/113563, WO 06/008069). 그러나 고-품질 및 장-수명 전계발광 소자, 예를 들어 텔레비전 또는 컴퓨터 모니터에서 이들을 이용할 수 있도록 착물에 있어서의 추가적인 개선이 여전히 바람직하다.

[0004] 금속 착물은 또한 유기 전계발광 소자에서의 다른 기능으로, 예를 들어 전자-수송 재료로서 Alq₃ (알루미늄 트리 스(히드록시퀴놀리네이트)) 또는 삼중항 매트릭스 재료 또는 정공-차단 재료로서 BALq (예를 들어 T. Tsuji *et al.*, *Journal of the Society of Information Display* **2005**, *13*(2), 117-122) 가 이용된다. 또한 고-품질 전계발광 소자에서 이들의 사용을 위해 이러한 재료의 경우에서 또다른 개선이 여전히 필요하다.

[0005] 그러나, 삼중항 방출을 나타내는 OLED 는 여전히 개선이 요구되는 문제를 겪고 있다. 이는 특히 삼중항 에미터 그 자체에 적용된다. 화학식 A 및 화학식 B 의 하부구조로서 이리듐에 배위결합되는 1-페닐이소퀴놀린 리간드를 포함하는 금속 착물에 기초하는 적색 에미터는 문헌 (예를 들어 US 2003/0068526, WO 2003/000661) 으로부터 공지되었다. 본원에서 나타내는 하부구조는 페닐 고리 및 이소퀴놀린 고리 사이의 가교의 부재 (화학식 A) 또는 존재 (화학식 B) 에 있어서 상이하다. 이러한 가교는 헤테로원자로 대체될 수 있는 2-2 개의 알킬 탄소 원자를 포함한다.



화학식 A



화학식 B

) = 2-20 개의 알칼 탄소 원자를 포함하는 가교

[0006]

[0007]

이러한 유형의 화합물은 적색 에미터로서 적합하나, 실제 이러한 화합물의 산업적인 사용이 불가능할 것으로 보이게 하는 일부 중대한 취약점을 가진다:

[0008]

1. 중대한 결함은 상술한 화합물의 낮은 열적 안정성이다. 따라서, 예를 들어 동종리간드 착물 *fac*-트리스(1-페닐이소퀴놀린-C²,N)이리듐(III) (일반적으로 Ir(piq)₃ 로서 지칭됨) 는 분해 없이 승화될 수 없다. 심지어 전형적인 고-진공 조건 ($p < 10^{-7}$ mbar) 하에서, 사용되는 Ir(piq)₃ 의 양의 약 30 중량% 를 차지하는 이리듐-함유 회분뿐만 아니라 관찰되는 1-페닐이소퀴놀린 및 다른 저분자량 화합물의 분리와 함께 이러한 화합물의 상당한 분해가 관찰된다. 이러한 열적 분해는 특별하게는 악영향을 주는 작동 수명과 함께 낮은 재현성을 갖는 소자 특성을 초래한다. 승화에 의한 금속 착물의 정제에 있어서, 또한 분해는 착물의 대량 손실을 초래하기 때문에 열적으로 보다 안정적인 착물을 이용하는 것이 바람직할 것이다.

[0009]

2. 고-품질 및 장-수명 소자에 있어서의 인광성 OLED 의 도입의 방식에서 나타나는 작동 수명은 일반적으로 여전히 낮다.

[0010]

3. 착물은 대개 유기 용매에서 낮은 가용성만을 갖고, 이는 재결정화 또는 크로마토그래피에 의한 효율적인 정제를 보다 더욱 어렵고 불가능하게 한다. 이는 특히 디스플레이의 제조에서 요구되는 바와 같이 상대적으로 대량의 정제에 적용된다.

[0011]

4. 착물은 특히 용액에서 산화-민감성이다. 이러한 화합물의 정제, 저장, 수송 및 가공은 비활성 기체 하에 수행되어야 하고, 이는 매우 산업적으로 비용이 소요되고 따라서 상당한 단점을 나타낸다.

[0012]

특히, 착물의 수명 및 열적 안정성에 있어서의 동시적인 개선이 유리할 것이다. 따라서 상술한 취약점을 겪지 않고, 효율 및 방출 색상에 있어서 공지된 금속 착물과 적어도 동일한 화합물이 필요로 된다.

[0013]

개선된 열적 안정성을 갖는 착물은 WO 04/081017 에 기술되어 있다. 그러나, 이러한 착물의 리간드의 합성은 복잡하여, 보다 용이하게 이용가능한 리간드 및 또는 양호한 전자적 특성 및 열적 안정성을 갖는 착물이 유리할 것이다.

[0014]

따라서, 본 발명의 목적은 유기 전계발광 소자에서 사용하기 위한 신규한 금속 착물을 제공하는 것이다. 금속 착물은 특히 에미터로서, 매트릭스 재료로서, 정공-차단 재료로서, 전자-수송 재료로서 또는 OLED 에서의 다른 기능으로도 사용되는 금속에 좌우되어 이용될 수 있다. 적색-, 녹색- 및 청색-인광성 금속 착물의 경우 여전히 개선을 위한 특별한 필요가 존재한다.

[0015]

일반적으로 사용되고, 하기 도시된 화합물에서 사용되는 5-원 킬레이트 고리 대신에 6-원 킬레이트 고리를 사용하는 특별한 신규 화합물이 OLED 에서 삼중항 에미터로서 우수한 특성을 가진다는 것을 놀랍게도 밝혀내었다.

[0016]

OLED 에서 사용되기 위한 6-원 및 7-원 킬레이트 고리를 갖는 일부 금속 착물이 문헌에 기재되어 있다.

[0017]

EP 1211257 은 6-원 고리 및 비연속적인 공액 리간드계를 갖는 킬레이트 착물의 형성을 초래하는, 페닐 고리 및 피리딘 고리 사이에서 비공액 단위 X, 예를 들어 O, S, CR₂, 등을 갖는 금속 착물을 기술한다. 이러한 착물은 상술한 특허출원의 실시예에서 나타내는 바와 같이 청색 내지 황색-적색 방출을 나타내나, 이는 분명하게 짙은-적색 방출을 발생시키기 위해 적합하지 않고, 이는 리간드의 컨จู게이션의 결핍에 기인할 것일 수 있다. 그러나, 여전히 현재 짙은-적색 방출 및 양호한 전자적 특성 및 높은 열적 안정성을 갖는 화합물의 심각한 부족현상이 존재한다. 부가적으로, 매우 높은 작동 전압이 인용되는 특허 출원에서 기술되는 바와 같은 화합물을 포함하는 발광 다이오드에 대해 요구된다. 따라서, 예를 들어 8 내지 12 V 의 전압은 청색 방출에 대해 보고되어 있다. 이는 상기 출원을 위해 부적합하고, 이는 또다시 리간드의 컨จู게이션의 결핍에 기인한 것일 수 있다. 따라서 이러한 6-원 킬레이트 구조가 어떻게 유익하게 사용될 수 있는지 아는 것은 불가능하

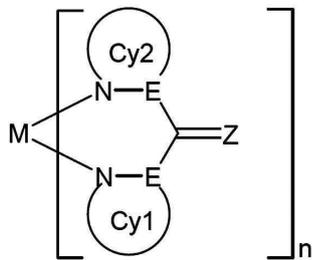
다.

- [0018] JP 2003/342284 는 단위 X 가 더 큰 고리계의 일부인 6-원 킬레이트 고리를 갖는 유사한 착물을 기술하고 있다. 특히, X 는 카르바졸계의 질소 또는 플루오렌의 9 위치에서의 탄소이다. 이는 또다시 이의 리간드가 비공액인 계의 형성을 초래한다. 이러한 이유로 인해 상기에서 기재된 동일한 단점이 본원에서 예상될 수 있다.
- [0019] JP 2004/111193 은 7-원 킬레이트 고리를 갖는 공액 및 비공액 착물을 기술한다.
- [0020] WO 2004/108857 A1 은 세자리- 또는 더 많은 다자리-사슬 구조 리간드를 갖는 금속 착물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 개시하고 있다.
- [0021] WO 2006/061182 A1 은 리간드의 배위결합 원자가 탄소 및 질소인 6-원 킬레이트 고리를 갖는 금속 착물을 개시하고 있다.
- [0022] 부가적으로, 하기에서 보다 상세하게 기술되는 특정 금속 킬레이트 착물이 특히 수명, 효율 및 가열에 대한 안정성과 관련하여 유기 전계발광 소자에서의 상당한 개선을 초래한다는 것을 놀랍게도 밝혀내었다. 이는 특히 녹색- 및 청색-인광성 전계발광 소자에 적용된다. 따라서 본 발명은 유기 전계발광 소자에 사용될 수 있는 특히 적합한 금속 착물에 관한 것이다. 또한 본 발명은 이러한 착물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 관한 것이다.

발명의 내용

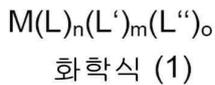
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0023] 본 발명은 화학식 (2) 의 하부구조 M(L)_n 를 함유하는,



화학식 (2)

- [0024]
- [0025] 화학식 (1) 의 화합물을 제공한다:



- [0026] [식 중, 사용되는 기호 및 지수는 하기 의미를 갖고,
- [0027] M 은 전이금속이고;
- [0028] E 는 각 경우에 동일하거나 상이하고, 각 경우에 sp²-혼성화된 탄소 또는 질소 원자이고;
- [0029] Z 는 각 경우에 동일하거나 상이하고, 각 경우에 C(R)₂ 또는 NR 이고;
- [0030] Cy1, Cy2 는 각 경우에 동일하거나 상이하고, 각 경우에 치환되거나 비치환된 헤테로시클 (이는 N 원자를 통해 M 에 배위결합되고, 기 Z 에의 결합을 가질 수 있음) 이고;
- [0031] R 은 각 경우에 동일하거나 상이하고, 각 경우에 H, D, F, CN, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (각 경우에 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, Ge(R²)₂, Sn(R²)₂, -O-, -S-, -NR²-, -(C=O)-, -(C=NR²)-, -P=O(R²)-, SO, SO₂ 또는 -CONR²- 로

대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 F 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기 (이는 각 경우에서 하나 이상의 비방향족 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 또는 이러한 계들 중 2, 3 또는 4 개의 조합이고; R 은 고리 Cy1 및/또는 Cy2 중 하나 또는 두 개와 함께 또다른 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수 있고;

[0033] R² 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이에서 하나 이상의 H 원자는 F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 둘 이상의 인접한 치환기 R² 는 이들이 결합되는 원자와 함께 모노- 또는 폴리시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고;

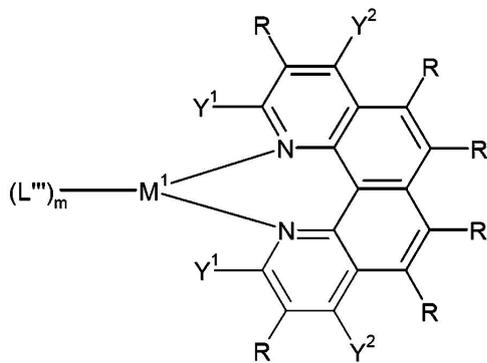
[0034] n 은 1, 2, 또는 3 이고;

[0035] 화학식 (1) 에서 리간드 L' 및 L'' 는 동일하거나 상이하고, 리간드 L 에 결합될 수 있는 한자리, 두자리 또는 세자리 킬레이트 리간드로부터 선택되고;

[0036] m, o 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 0, 1 또는 2 이고; n + m + o = 2 또는 3 이고;

[0037] 단, n = 1 이고, L 이 네자리 리간드인 경우 화학식 (2) 는 없거나 하나만의 M-C 결합을 갖고 또는 화학식 (2) 는 네자리 시클릭 리간드를 갖고;

[0038] 또한, 단 하기 화학식의 화합물이 본 발명으로부터 제외됨:



[0039] (식 중, R 은 상기에서 명시된 바와 동일한 의미를 갖고, 또한

[0041] M¹ 은 전이 금속이고;

[0042] Y¹ 은 각 경우에서 동일하거나 상이하게 H, 할로젠, 카르복실, 카르복실레이트, 알킬 또는 관능화된 알킬기, OH 또는 아미노기이고;

[0043] Y² 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 H, 할로젠, 알콕시, OH, 니트로 또는 아미노기이고;

[0044] L''' 는 리간드임).

[0045] 지수 n, m 및 o 는 금속 M 에서의 배위결합 수가 전체적으로 금속에 따라 이러한 금속에 대한 통상적인 배위결합 수에 해당되도록 선택된다. 전이 금속에 대하여, 이는 대개 금속에 따라 배위결합 수 4, 5 또는 6 이고, 즉 이러한 배위결합 위치가 리간드 L 에 결합되는 또다른 공여기에 의해 포화되지 않는 경우 전이 금속에 대하여 지수 n, m 및 o 가 대개 1, 2 또는 3 이다. 이는 일반적으로 금속 배위결합 화합물이 상이한 배위결합 수를 갖고, 즉 금속 및 금속의 산화 상태에 따라 상이한 수의 리간드를 결합하는 것은 일반적으로 공지되어 있다. 유기금속 화학 또는 배위 화학의 분야에서 당업자의 일반적인 전문 지식은 바람직한 금속의 배위결합 수 및 상이한 산화 상태의 금속 이온을 포함하고, 이는 당업자가 적합한 수의 또다른 리간드를 사용하여 금속 및 이의 산화 상태에 따라, 화학식 (2) 의 리간드의 정확한 구조에 따라 적합한 방식으로 지수 n, m 및 o 를 선택하는 것을 용이하게 할 것이다. 부가적으로, 본 발명에 따른 금속 착물 및/또는 하부구조 M-L_n 은 사용되는 금속의 산화 상태에 따라 충전되거나 방전될 수 있다. 착물이 충전되는 경우, 이는 또한 해당하는 상대

이온을 함유한다.

[0046] 본 발명의 목적을 위해, 아릴기는 6 내지 60 개의 C 원자를 함유하고; 본 발명의 목적을 위해, 헤테로아릴기는 1 내지 59 개의 C 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 갖고, 단 C 원자 및 헤테로원자의 합은 5 이상이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순한 방향족 고리, 즉 벤젠 또는 단순한 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜 등, 또는 축합된 아릴 또는 헤테로아릴기, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 등을 의미하도록 선택된다. 본 발명의 목적을 위해 시클릭 카르벤은 중성 C 원자를 통해 금속에 결합되는 시클릭기이다. 시클릭기는 포화되거나 불포화될 수 있다. 아르듀엔고 카르벤 (Arduengo carbene), 즉 2 개의 질소 원자가 카르벤 C 원자에 결합된 카르벤이 바람직하다. 5-원 아르듀엔고 카르벤 고리 또는 다른 불포화 5-원 카르벤 고리는 마찬가지로 본 발명의 목적을 위해 아릴기로 간주된다.

[0047] 본 발명의 목적을 위해, 방향족 고리계는 고리계에 6 내지 60 개의 C 원자를 함유한다. 본 발명의 목적을 위해, 헤테로방향족 고리계는 고리계에 1 내지 59 개의 C 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 함유하고, 단 C 원자 및 헤테로원자의 합은 5 이상이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 목적을 위해, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계는 아릴 또는 헤테로아릴기만을 필수적으로 함유하는 것은 아니고, 대신 부가적으로 다수의 아릴 또는 헤테로아릴기에, 예를 들어 C, N 또는 O 원자와 같은 비-방향족 단위 (바람직하게는 H 이외의 원자 10 % 미만) 에 의해 연결될 수 있는 계를 의미하는 것이 선택되도록 의도된다. 따라서, 예를 들어 9,9'-스피로비플루오렌, 9,9-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 계가 또한 2 개 이상의 아릴기가, 예를 들어 선형 또는 시클릭 알킬기 또는 실릴기에 의해 연결되는 계와 같은 본 발명의 목적을 위한 방향족 고리계를 의미하는 것이 선택되도록 의도된다.

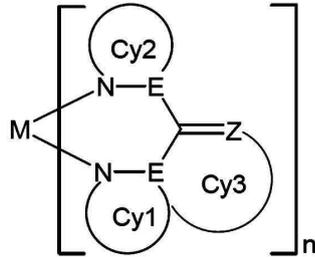
[0048] 본 발명의 목적을 위해, C₁ 내지 C₄₀-알킬기 (부가적으로 이에서 각각의 H 원자 또는 CH₂ 기는 상기 언급한 기로 치환될 수 있음) 는 바람직하게는 라디칼 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, tert-펜틸, 2-펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, s-헥실, tert-헥실, 2-헥실, 3-헥실, 시클로헥실, 2-메틸펜틸, n-헵틸, 2-헵틸, 3-헵틸, 4-헵틸, 시클로헵틸, 1-메틸시클로헥실, n-옥틸, 2-에틸헥실, 시클로옥틸, 1-비시클로-[2.2.2]옥틸, 2-비시클로[2.2.2]옥틸, 2-(2,6-디메틸)옥틸, 3-(3,7-디메틸)옥틸, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸 또는 2,2,2-트리플루오로에틸을 의미하도록 선택된다. 알케닐기는, 예를 들어 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐 또는 시클로옥테닐을 의미하도록 선택된다. 알킬닐기는, 예를 들어 에틸닐, 프로피닐, 부틸닐, 펜틸닐, 헥실닐, 헵틸닐 또는 옥틸닐을 의미하도록 선택된다. C₁- 내지 C₄₀-알콕시기는, 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시 또는 2-메틸부톡시를 의미하도록 선택된다. 5 - 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (각 경우에서 이는 또한 상기에서 언급한 라디칼 R 로 치환될 수 있고, 임의의 바람직한 위치에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리계에 연결될 수 있음) 가, 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 벤즈안트라센, 피렌, 크리센, 페틸렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 비페닐, 비페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인덴노플루오렌, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프족사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이소옥사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페틸렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 푸린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸로부터 유도된 기를 의미하도록 선택된다.

[0049] 본 발명의 목적을 위해, 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 (부가적으로 이에서 각각의 H 원자 또는 CH₂ 기는 상술한 기로 치환될 수 있음) 는 바람직하게는 라디칼 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸,

시클로옥틸, 테트라히드로푸란, 펜타메틸렌 옥시드, 헥사메틸렌 옥시드, 테트라메틸렌 술파이드, 펜타메틸렌 술파이드 등을 의미하도록 선택된다. 폴리시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기는 2 개 이상의 상기 시클릭기가 하나 이상의 결합을 통해 연결되고, 또는 두 개 이상의 상기 기가 함께 축합된 고리계를 형성하는 것을 의미한다. 또한, 바이시클릭, 트리시클릭 또는 폴리시클릭기, 예컨대 비시클로[2.1.1]헥산, 비시클로[2.2.1]헵탄, 비시클로[2.2.2]옥탄, 아다만탄 (트리시클로[3.3.1.1]데칸) 등이 포함된다.

[0050] Cy1 및 Cy2 는 바람직하게는 헤테로방향족기이다. 또한, 또다른 시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리가 또한 Cy1 및 Cy2 에 융합될 수 있고 및/또는 Cy1 및/또는 Cy2 는 물론 또한 치환될 수 있다. 본원에서 바람직한 치환기는 하기에 기술되는 라디칼 R¹ 이다.

[0051] 또다른 구현예에 있어서, 화학식 (2) 의 부분 구조가 화학식 (3) 으로 표현되는 것이 바람직하다:

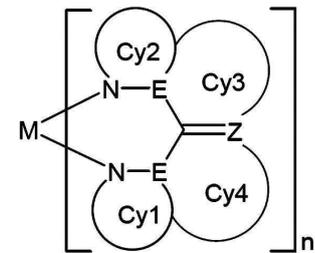


화학식 (3)

[0052]

[0053] [식 중, 기호 및 지수는 상기에서 정의한 바와 동일한 의미를 가짐]. 화학식 (3) 또는 (4) 에서의 치환기 Z 는 원 Cy3 의 일부이고, Cy1 또는 Cy2 와 함께 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성한다.

[0054] 본 발명에 따라 또한 화학식 (2) 의 부분 구조가 화학식 (4) 로 표현되는 것이 바람직하다:



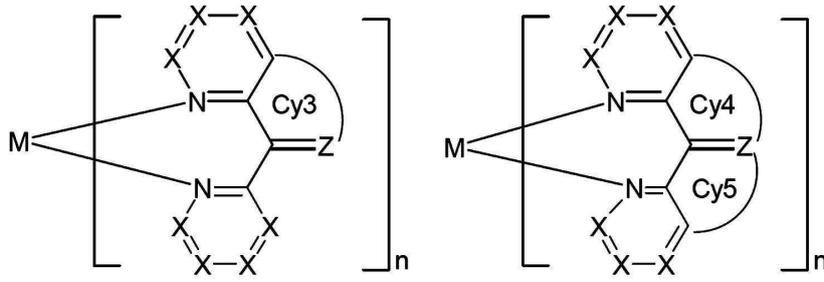
화학식 (4)

[0055]

[0056] [식 중, 기호 및 지수는 상기에서 정의한 바와 동일한 의미를 가짐]. 상기 구현에서 Z 는 2 개의 원 Cy3 및 Cy4 의 일부이고, Cy1 및 Cy2 와 함께 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성한다.

[0057] 기 C=Z 의 결합 차수는 바람직하게는 1 초과 내지 2, 보다 바람직하게는 1.5 내지 2 이다. 2 의 결합 차수는 실제 이중 결합을 의미하고, 한편, 1.5 의 결합차수는 공액 방향족 또는 헤테로방향족계이다.

[0058] 본 발명의 다른 구현예에 있어서, 화학식 (2) 의 부분 구조가 화학식 (5) 또는 (6) 으로 표현되는 것이 바람직하다:



화학식 (5)

화학식 (6)

[0059]

[0060]

[0061]

[0062]

[식 중, 기호 및 지수는 상기에서 정의한 바와 동일한 의미를 갖고,

X 는 최대 2 곳에서 인접한 X 가 N 으로 표현되는 경우 각 경우에서 동일하거나 상이하게 C(R¹) 또는 N 이고;

R¹ 은 각 경우에서 동일하거나 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, CNO, NCS, SCN, CF₃, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 시클릭 또는 폴리시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이의 각각은 하나 이상의 기 R² 로 대체될 수 있고, 각 경우에서 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, Ge(R²)₂, Sn(R²)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR², P(=O)(R²), SO, SO₂, NR², O, S 또는 CONR² 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음), 또는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계, 또는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 상기 계의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 두 개 이상의 인접한 치환기 R¹ 은 이들이 결합되는 원자와 함께 모노시클릭 또는 헤테로시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고, 상기 고리계는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있고;

[0063]

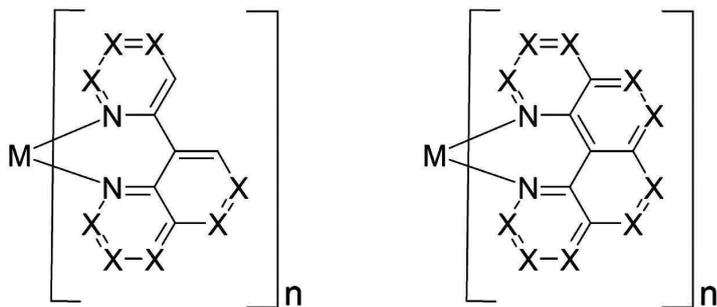
R² 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이에서 하나 이상의 H 원자는 F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 하나 이상의 인접한 치환기 R² 는 이들이 결합되는 원자와 함께 모노- 또는 폴리시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고;

[0064]

Cy3, Cy4, Cy5 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 이들이 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하도록 선택됨].

[0065]

또다른 구현예에 있어서, 화학식 (2) 의 부분 구조가 화학식 (7) 또는 (8) 로 표현되는 것이 바람직하고,



화학식 (7)

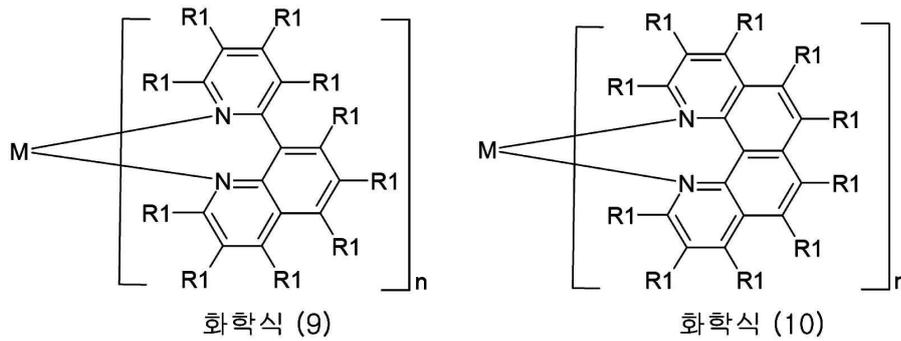
화학식 (8)

[0066]

[0067]

[식 중, 기호 및 지수는 상기에서 정의한 바와 동일한 의미를 가짐].

[0068] 본 발명에 따른 또다른 부분 구조 $M(L)_n$ 은 화학식 (9) 또는 (10) 의 부분 구조이다:



[0069]

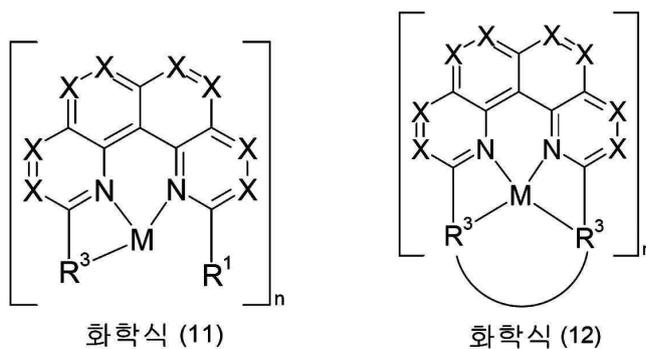
[0070] [식 중, 기호 및 지수는 상기에서 정의한 바와 동일한 의미를 가짐].

[0071] 금속 M 은 바람직하게는 Zr, Hf, Mo, W, Ru, Os, Rh, Ir, Ni, Pd, Pt, Cu, Ag 및 Au, 특히 Ir, Pt 및 Cu 로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0072] 본 발명에 따라 R^1 이 보다 바람직하게는 각 경우에서 동일하거나 상이하고 H, D, F, Br, I, CN, 1 내지 6 개의 C-원자를 갖는 직쇄형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 또는 3 내지 6 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있고, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $R^2C=CR^2$, $C=O$, NR^2 , O 또는 S 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H-원자는 F, Br, I 또는 C_n 으로 대체될 수 있음), 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있음), 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있음), 및 이러한 계의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 둘 이상의 인접한 치환기 R^1 이 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고, 배위결합되는 N-원자에 대한 오르토 위치의 C-원자에서의 라디칼 R^1 은 M 과 함께 고리를 형성할 수 있다.

[0073] 가장 적합한 R^1 은 메틸, 에틸, i-프로필, t-부틸, 페닐, o-/m-/p-비페닐, o-/m-/p- 또는 분지형 테르페닐, 1-/2-나프틸, 2-/3-/4-피리딜 및 디아진으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 디아진은 바람직하게는 피라진, 피리다진 또는 피리미딘 또는 이의 유도체로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0074] 특히 바람직한 구현예에 있어서, 부분 구조 $M(L)_n$ 에서의 리간드 L_n 은 화학식 (11) 또는 (12) 에서 나타내는 세 자리 또는 네자리 리간드이다:

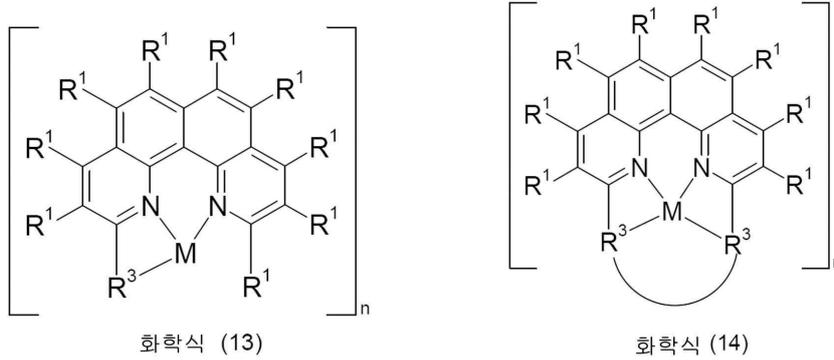


[0075]

[0076] [식 중, 기호 및 지수는 상기에서 정의한 바와 동일한 의미를 갖고, R^3 는 M 에 배위결합되는 기이고, 5-, 6-, 또는 7-고리 킬레이트가 형성되도록 선택되고, R^3 는 C, N, P, O 또는 S 또는 이들의 조합으로부터 선택되는 공여기를 포함하고;

[0077] 화학식 (12) 의 반원은 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는데 필수적인 기를 나타내나, 필수적으로 존재하지 않는다.

[0078] 화학식 (11) 또는 (12) 에 따른 또다른 부분 구조는 화학식 (13) 또는 (14) 로 표현된다:



[0079] [식 중, 기호 및 지수는 상기에서 정의한 바와 동일한 의미를 가짐]. R³ 는 바람직하게는 공여기 C, N, P, O 또는 S 또는 이들의 조합을 통해 금속 M 에 결합된다.

[0081] 바람직한 탄소-함유 공여기 R³ 는 아세틸라이드 및 지방족 또는 방향족 이소니트릴이다.

[0082] 바람직한 질소-함유 공여기 R³ 는 방향족 질소 함유 헤테로시클, 바람직하게는 C₁-C₂₀-알킬기를 함유하는, 특히 바람직하게는 C₁-C₁₀-알킬기를 함유하는, 매우 특히 바람직하게는 C₁-C₄-알킬기를 함유하는 지방족 아민, 지방족 시클릭 아민, 예를 들어 피롤리딘, 피페리딘 또는 모르폴린, 니트릴, 아마이드, 이미드 및 이민 (이의 각각은 기 R 로 치환되거나 비치환될 수 있음) 이다.

[0083] 바람직한 인-함유 공여기 R³ 는 PF₂, P(NR₂)₂ (R⁴ 는 각 경우에서 동일하거나 상이하게 C₁-C₂₀-알킬기 또는 상기에서 정의한 의미의 아릴 또는 헤테로아릴을 나타냄), 알킬-, 아릴-, 또는 혼합된 알킬아릴포스핀, 알킬할로-, 아릴할로- 또는 혼합된 알킬아릴할로포스핀 (할로겐은 각 경우에서 F, Cl, Br 또는 I 일 수 있음), 알킬, 아릴 또는 혼합된 알킬 아릴 포스파이트 또는 포스파방향족 화합물, 예를 들어 포스파벤젠 (이의 각각은 기 R 로 치환되거나 비치환될 수 있음) 이다. 본원에서 알킬기는 바람직하게는 C₁-C₂₀-알킬기, 특히 바람직하게는 C₁-C₁₀-알킬기, 매우 특히 바람직하게는 C₁-C₄-알킬기이다. 아릴기는 또한 헤테로아릴기를 의미하도록 선택된다. 이러한 기는 상기에서 정의한 바와 같다.

[0084] 바람직한 산소-함유 공여기 R³ 는 페놀, 알코올, 알코올레이트, 열린-사슬 또는 시클릭, 지방족 또는 방향족 에테르, 산소 헤테로시클, 예를 들어 푸란, 알데히드, 케톤, 포스핀 옥시드기, 포스페이트, 포르포네이트, 보레이트, 실리케이트, 술폭시드기, 카르복실레이트, 페놀, 페놀레이트, 옥심, 히드록사메이트, β-케토-케토네이트, β-케토 에스테르 및 β-디에스테르 (이의 각각은 기 R 로 치환되거나 비치환되고, 최종-언급된 기는 두자리-킬레이트 리간드를 나타냄) 이다. 이러한 기에서의 알킬기는 바람직하게는 C₁-C₂₀-알킬기, 특히 바람직하게는 C₁-C₁₀-알킬기, 매우 특히 바람직하게는 C₁-C₄-알킬기이다. 아릴기는 또한 헤테로아릴기를 의미하도록 선택된다. 이러한 기는 상기에서 정의한 바와 같다.

[0085] 바람직한 황-함유 공여기 R³ 는 황 헤테로방향족기, 지방족 또는 방향족 티올 및 티올레이트, 열린-사슬 또는 시클릭 티오에테르, 티오카르보닐기, 포스핀 술폜아이드 및 티오카르복실레이트 (이의 각각은 기 R 로 치환되거나 비치환될 수 있음) 이다. 이러한 기에서의 알킬기는 바람직하게는 C₁-C₂₀-알킬기, 특히 바람직하게는 C₁-C₁₀-알킬기, 매우 특히 바람직하게는 C₁-C₄-알킬기이다. 아릴기는 또한 헤테로아릴기를 의미하도록 선택된다. 이러한 기는 상기에서 정의한 바와 같다.

[0086] 두자리-킬레이트 기 R³ 는 또한 이러한 기 중 2 개를 조합함으로써 이러한 공여기로부터 형성될 수 있고, 이는 동일하거나 상이할 수 있고 동일하거나 상이한 공여체 원자를 가질 수 있다. 이러한 기는 또한 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있다. 이러한 유형의 두자리-킬레이트 기의 예는 치환되거나 비치환된 β-케토-케토

네이트, β-케토 에스테르, β-디에스테르, 아미노-카르복실산으로부터 유도된 카르복실레이트, 예를 들어 피리딘-2-카르복실산, 퀴놀린-2-카르복실산, 글리신, 디메틸글리신, 알라닌 또는 디메틸-아미노알라닌, 이미노아세트아세토네이트, 히드록사메이트, 피리딜포스핀, α-포스포노카르복실레이트, 글리콜 에테르, 에테르 알코올레이트, 디알코올로부터 유도된 디알코올레이트, 예를 들어, 에틸렌 글리콜 또는 1,3-프로필렌 글리콜, 디티올로부터 유도된 디티올레이트, 예를 들어 1,2-에틸렌디티올 또는 1,3-프로필렌디티올, 디아민, 예를 들어 에틸렌디아민, 프로필렌디아민 또는 시스- 또는 트랜스-디아미노시클로헥산, 이민, 예를 들어 2-[1-(페닐이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(2-메틸페닐이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(2,6-디-이소-프로필페닐이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(메틸이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(에틸이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(이소-프로필이미노)에틸]피리딘 또는 2-[1-(*tert*-부틸이미노)에틸]피리딘, 디이민, 예를 들어 1,2-비스(메틸이미노)에탄, 1,2-비스(에틸이미노)에탄, 1,2-비스(이소-프로필이미노)에탄, 1,2-비스(*tert*-부틸이미노)에탄, 2,3-비스(메틸이미노)부탄, 2,3-비스(에틸이미노)부탄, 2,3-비스(이소-프로필이미노)부탄, 2,3-비스(*tert*-부틸이미노)부탄, 1,2-비스(페닐이미노)에탄, 1,2-비스(2-메틸페닐이미노)에탄, 1,2-비스(2,6-디-이소-프로필페닐이미노)에탄, 1,2-비스(2,6-디-*tert*-부틸페닐이미노)에탄, 2,3-비스(페닐이미노)부탄, 2,3-비스(2-메틸페닐이미노)부탄, 2,3-비스(2,6-디-이소-프로필페닐이미노)부탄 또는 2,3-비스(2,6-디-*tert*-부틸페닐이미노)부탄, 디포스핀, 예를 들어 비스(디페닐포스포노)메탄, 비스(디페닐포스포노)에탄, 비스(디페닐포스포노)프로판, 비스(디메닐포스포노)메탄, 비스(디메닐포스포노)에탄, 비스(디메닐포스포노)프로판, 비스(디에틸포스포노)메탄, 비스(디에틸포스포노)에탄, 비스(디에틸포스포노)프로판, 비스(*tert*-부틸포스포노)메탄, 비스(*tert*-부틸포스포노)에탄, 비스(*tert*-부틸포스포노)프로판, 살리실아민으로부터 유도된 살리실아미네이트, 예를 들어 메틸살리실아민, 에틸살리실아민 또는 페닐살리실아민 등이다.

- [0087] 리간드 L 은 중성, 양 또는 음전하성이다. 바람직하게는 중성 착물이다.
- [0088] 화학식 (1) 의 화합물에서의 리간드 L' 및 L'' 는 바람직하게는 중성, 일가음이온성, 이가음이온성 또는 삼가음이온성 리간드, 특히 바람직하게는 중성 또는 일가음이온성 리간드이다. 이는 바람직하게는 한자리, 두자리 또는 세자리, 즉 하나, 둘 또는 세 개의 배위결합 위치를 갖는다.
- [0089] 바람직한 중성의, 한자리 리간드는 일산화탄소, NO, 이소니트릴, 예를 들어 *tert*-부틸 이소니트릴, 시클로헥실 이소니트릴, 아다만틸 이소니트릴, 페닐 이소니트릴, 메시틸 이소니트릴, 2,6-디메틸페닐 이소니트릴, 2,6-디-이소-프로필페닐 이소니트릴, 2,6-디-*tert*-부틸페닐 이소니트릴, 아민, 예를 들어 트리메틸아민, 트리에틸아민, 모르폴린, 포스핀, 예를 들어 트리플루오로포스핀, 트리메틸포스핀, 트리시클로헥실포스핀, 트리-*tert*-부틸포스핀, 트리페닐포스핀, 트리스(펜타플루오로페닐)포스핀, 포스파이트, 예를 들어 트리메틸 포스파이트, 트리에틸 포스파이트, 아르신, 예를 들어 트리플루오로아르신, 트리메틸아르신, 트리시클로헥실아르신, 트리-*tert*-부틸아르신, 트리페닐아르신, 트리스(펜타플루오로페닐)아르신, 스티빈, 예를 들어 트리플루오로스티빈, 트리메틸스티빈, 트리시클로헥실스티빈, 트리-*tert*-부틸스티빈, 트리페닐스티빈, 트리스(펜타플루오로페닐)스티빈, 및 질소-함유 헤테로시클릭 화합물, 예를 들어 피리딘, 피리다진, 피라진, 피리미딘, 트리아진으로부터 선택된다.
- [0090] 바람직한 일가음이온성, 한자리 리간드는 수소화물, 중수소화물, 할라이드 F, Cl, Br 및 I, 알킬아세틸라이드, 예를 들어 메틸-C≡C⁻, *tert*-부틸-C≡C⁻, 아릴아세틸라이드, 예를 들어 페닐-C≡C⁻, 시아나이드, 시아네이트, 이소시아네이트, 티오시아네이트, 이소티오시아네이트, 지방족 또는 방향족 알코올레이트, 예를 들어 메탄올레이트, 에탄올레이트, 프로판올레이트, 이소-프로판올레이트, *tert*-부틸레이트, 페놀레이트, 지방족 또는 방향족 티오알코올레이트, 예를 들어 메탄티올레이트, 에탄티올레이트, 프로판티올레이트, 이소-프로판티올레이트, *tert*-티오부틸레이트, 티오펜올레이트, 아미드, 예를 들어 디메틸아미드, 디에틸아미드, 디-이소-프로필아미드, 모르폴라이드, 카르복실레이트, 예를 들어 아세테이트, 트리플루오로아세테이트, 프로피오네이트, 벤조에이트, 및 음이온성 질소-함유 헤테로시클릭 화합물, 예컨대 피롤라이드, 이미다졸라이드, 피라졸라이드로부터 선택된다. 이러한 기에서의 알킬기는 바람직하게는 C₁-C₂₀-알킬기, 특히 바람직하게는 C₁-C₁₀-알킬기, 매우 특히 바람직하게는 C₁-C₄-알킬기이다. 아릴기는 또한 헤테로아릴기를 의미하도록 선택된다. 이러한 기는 상기에서 정의한 바와 같다.
- [0091] 바람직한 이가- 또는 삼가음이온성 리간드는 O²⁻, S²⁻, 니트렌 (이는 R-N=M 형태의 배위결합을 초래하고, R 은 일반적으로 치환기를 나타냄) 또는 N³⁻ 이다.
- [0092] 바람직한 중성의 또는 일가- 또는 이가음이온성 두자리 또는 다자리 리간드는 디아민, 예를 들어, 에틸렌디아민, N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민, 프로필렌디아민, N,N,N',N'-테트라메틸프로필렌디아민, 시스- 또는 트랜스-디아미노시클로헥산, 시스- 또는 트랜스-N,N,N',N'-테트라메틸디아미노시클로헥산, 이민, 예를

들어 2-[1-(페닐이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(2-메틸페닐이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(2,6-디-이소-프로필페닐이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(메틸이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(에틸이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(이소-프로필이미노)에틸]피리딘, 2-[1-(*tert*-부틸이미노)에틸]피리딘, 디이민, 예를 들어, 1,2-비스(메틸이미노)에탄, 1,2-비스(에틸이미노)에탄, 1,2-비스(이소-프로필이미노)에탄, 1,2-비스(*tert*-부틸이미노)에탄, 2,3-비스(메틸이미노)부탄, 2,3-비스(에틸이미노)부탄, 2,3-비스(이소-프로필이미노)부탄, 2,3-비스(*tert*-부틸이미노)부탄, 1,2-비스(페닐이미노)에탄, 1,2-비스(2-메틸페닐이미노)에탄, 1,2-비스(2,6-디-이소-프로필페닐이미노)에탄, 1,2-비스(2,6-디-*tert*-부틸페닐이미노)에탄, 2,3-비스(페닐이미노)부탄, 2,3-비스(2-메틸페닐이미노)부탄, 2,3-비스(2,6-디-이소-프로필페닐이미노)부탄, 2,3-비스(2,6-디-*tert*-부틸페닐이미노)부탄, 두 개의 질소 원자를 함유하는 헤테로시클릭 화합물, 예를 들어, 2,2'-비피리딘, *o*-페난트롤린, 디포스핀, 예를 들어 비스(디페닐포스피노)메탄, 비스(디페닐포스피노)에탄, 비스(디페닐포스피노)프로판, 비스(디메틸포스피노)메탄, 비스(디메틸포스피노)에탄, 비스(디메틸포스피노)프로판, 비스(디에틸포스피노)메탄, 비스(디에틸포스피노)에탄, 비스(디에틸포스피노)프로판, 비스(디-*tert*-부틸포스피노)메탄, 비스(디-*tert*-부틸포스피노)에탄, 비스(*tert*-부틸포스피노)프로판, 1,3-디케톤으로부터 유도된 1,3-디케토네이트, 예를 들어 아세틸 아세톤, 벤조일아세톤, 1,5-디페닐아세틸아세톤, 디벤조일메탄, 비스(1,1,1-트리플루오로아세틸)메탄, 3-케토에스테르로부터 유도된 3-케토네이트, 예를 들어 에틸 아세토아세테이트, 아미노카르복실산으로부터 유도된 카르복실레이트, 예를 들어 피리딘-2-카르복실산, 퀴놀린-2-카르복실산, 글리신, N,N-디메틸글리신, 알라닌, N,N-디메틸아미노알라닌, 살리실아민으로부터 유도된 살리실아미네이트, 예를 들어 메틸살리실아민, 에틸살리실아민, 페닐살리실아민, 디알코올로부터 유도된 디알코올레이트, 예를 들어 에틸렌 글리콜, 1,3-프로필렌 글리콜 및 디티올로부터 유도된 디티올레이트, 예를 들어 1,2-에틸렌디티올, 1,3-프로필렌디티올로부터 선택된다.

[0093] 바람직한 세자리 리간드는 질소-함유 헤테로시클릭 화합물의 보레이트, 예를 들어 테트라키스(1-이미다졸릴) 보레이트 및 테트라키스(1-피라졸릴) 보레이트이다.

[0094] 또한, 금속과 함께 하나 이상의 금속-탄소 결합을 함유하는 시클로금속화된 5-원 고리를 형성하는 두자리 일가 음이온성 리간드가 바람직하다. 이는 특히 유기 전계발광 소자용 인광성 금속 착물의 분야에서 일반적으로 사용되는 바와 같은 리간드, 즉, 페닐피리딘, 나프틸피리딘, 페닐퀴놀린, 페닐이소퀴놀린 등의 유형의 리간드 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있음) 이다. 다양한 이러한 리간드는 인광성 전계발광 소자의 분야에서 당업자에게 공지된 것이고, 이들은 진보적인 단계 없이 화학식 (1) 의 화합물을 위한 리간드 L' 및 L'' 로서 이러한 유형의 또다른 리간드를 선택할 수 있을 것이다.

[0095] 마찬가지로, 바람직한 리간드 L' 및 L'' 는 n^5 -시클로펜타디에닐, n^5 -펜타메틸시클로펜타디에닐, n^6 -벤젠 또는 n^7 -시클로헵타트리에닐 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있음) 이다.

[0096] 리간드는 공액 또는 크로스-공액계 (cross-conjugated system) 이다. 공액계는 하나 이상의 치환기 R 이 고리 Cy1 및/또는 Cy2 와 함께 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 경우 제조된다. 한편, 크로스-공액계는 치환기 R 이 고리 Cy1 및/또는 Cy2 와 함께 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하지 않는 경우, 즉 R 이 Cy1 또는 Cy2 와 함께 지방족 고리계를 형성하거나 또는 전혀 어떠한 고리계를 형성하지 않는 경우 제조된다.

[0097] 본 발명의 특히 바람직한 구현예에 있어서, 리간드계는 단단한 계, 즉 두 개의 치환기 R 이 고리 Cy1 및 고리 Cy2 와 함께 6-원 고리를 형성하는 계이다.

[0098] 본 발명의 또다른 바람직한 구현예에 있어서, 두 개 또는 세 개의 리간드 L 및/또는 L' 및/또는 L'' 가 라디칼 R¹ 을 통해 결합되어 폴리포달 계 또는 크립텐드를 형성할 수 있다. 이러한 경우의 연결은 Cy1 또는 Cy2 에 대한 것일 수 있다.

[0099] 화학식 (2) 의 하부구조를 생성하는 해당되는 리간드 및 또한 리간드 L' 및 L'' 는 유기 합성 분야의 당업자에게 공지된 바와 같은 유기 화학의 종래의 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0100] 본 발명의 금속 착물은 원칙적으로 당업자에게 공지된 다양한 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0101] 이러한 방법은 화학식 (1) 의 본 발명의 화합물을 바람직하게는 99 % 초과 (¹H-NMR 및/또는 HPLC 에 의해 결정됨) 의 고순도로 얻을 수 있게 한다.

[0102] 상기에서 기술된 본 발명의 화합물은 또한 해당하는 공액, 부분적 공액 또는 비공액 올리고머, 중합체 또는 덴

트리머를 제조하기 위한 공-단량체로서 사용될 수 있다. 중합은 바람직하게는 브롬 관능화를 통해 영향받는다. 따라서 이는 특히 폴리플루오렌 (예를 들어 EP 842208 또는 WO 00/22026 에 기술된 바와 같음), 폴리스피로비플루오렌 (예를 들어 EP 707020 또는 EP 894107 에 기술된 바와 같음), 폴리-파라-페닐렌 (예를 들어 WO 92/18552 에 기술된 바와 같음), 폴리디히드로페난트렌 (예를 들어 WO 05/014689 에 기술된 바와 같음), 폴리페난트렌 (예를 들어 비공개 특허 출원 DE 102004020298.2 에 기술된 바와 같음), 폴리인테노플루오렌 (예를 들어 WO 04/041901 및 WO 04/113412 에 기술된 바와 같음), 폴리카르바졸 (예를 들어 WO 04/070772 또는 WO 04/113468 에 기술된 바와 같음), 폴리케톤 (예를 들어 WO 05/040302 에 기술된 바와 같음), 폴리실란 (예를 들어 WO 05/111113 에 기술된 바와 같음) 또는 폴리티오펜 (예를 들어 EP 1028136 에 기술된 바와 같음) 로 공중합될 수 있거나 이러한 유형의 다양한 단위를 포함하는 공중합체로 공중합될 수 있다. 이러한 단위는 측쇄로 또는 중합체의 주쇄로 구성될 수 있거나, 또는 중합체 사슬의 분지화 지점 (예를 들어 WO 06/003000 에 기술된 바와 같음) 또는 중합체 사슬의 말단기를 나타낼 수 있다.

[0103] 따라서 본 발명은 또한 화학식 (1) 의 화합물 (이에서 하나 이상의 치환기 R^1 은 공액, 부분적 공액 또는 비공액 중합체, 올리고머 또는 덴드리머의 합성을 위해 팔라듐 또는 니켈에 의해 촉매화되는 C-C 커플링 반응을 할 수 있는 기입) 의 용도를 제공한다. C-C 커플링 반응을 할 수 있는 치환기는 바람직하게는 Cl, Br, I, O-토실레이트, O-트리플레이트, O-SO₂R², B(OR²)₂ 및 Sn(R²)₃ 로 이루어진 군으로부터, 특히 바람직하게는 Br, O-트리플레이트 및 B(OR²)₂ (R² 는 상기에서 정의한 바와 같고, 두 개 이상의 라디칼 R² 는 또한 함께 고리계를 형성할 수 있음) 로부터 선택된다. 또한, 특히 바람직하게는 금속 M 에 대한 결합과 관련된 파라 위치에서 고리 Cy1 에 결합되는 이러한 기가 바람직하다. 중합을 위한 단량체로서 사용될 수 있는 이러한 금속 착물은 마찬가지로 본 발명의 바람직한 구현예이다.

[0104] C-C 커플링 반응이 가능한 이러한 기가 착물에서 1, 2 또는 3배 또는 그 이상 존재하는지에 좌우되어, 착물은 중합체에서의 말단기를 나타내거나, 이는 선형적으로 중합체 사슬에 혼입되거나, 이는 중합체 사슬의 분지화 지점을 나타낸다. 또한, 착물은 또한 적절하게 치환되는 경우 측쇄 또는 선형 또는 분지형 중합체 사슬일 수 있다.

[0105] 본 발명은 또한 올리고머, 중합체 또는 덴드리머에의 결합을 나타내는 상기에서 정의한 라디칼 R 및 R¹ 중 하나 이상, 바람직하게는 R¹ 을 갖는 화학식 (1) 의 화합물의 하나 이상을 포함하는, 공액 또는 부분적 공액 또는 비공액 올리고머, 중합체 또는 덴드리머를 제공한다. 상기에서 기술된 바와 같은 동일한 바람직한 것이 중합체 또는 덴드리머에서의 화학식 (1) 의 단위에 적용된다.

[0106] 상술한 올리고머, 중합체, 공중합체 및 덴드리머는 유기 용매에서의 양호한 가용성 및 유기 전계발광 소자에서의 높은 효율 및 안정성을 나타낸다. 또한, 이러한 올리고머, 중합체 및 덴드리머는 매우 열적으로 안정하다. 따라서 본 발명은 또한 화학식 (1) 의 착물로부터 중합체, 올리고머 또는 덴드리머의 하나 이상의 결합이 존재하는, 화학식 (1) 의 하나 이상의 화합물을 포함하는 올리고머, 중합체 또는 덴드리머에 관한 것이다. 화학식 (1) 의 화합물의 연결에 좌우되어 착물이 이에 따라 올리고머 또는 중합체의 측쇄를 형성하거나, 주쇄에서 연결된다. 중합체, 올리고머 또는 덴드리머는 공액, 부분적 공액 또는 비공액일 수 있다. 올리고머 또는 중합체는 선형, 분지형 또는 덴드리머형일 수 있다.

[0107] 상기에서 기술된 바와 같은 동일한 바람직한 것이 올리고머, 덴드리머 및 중합체에서의 화학식 (1) 의 반복 단위에 완전히 유사하게 적용된다.

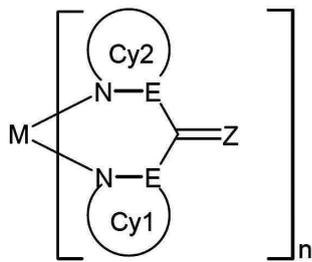
[0108] 올리고머 또는 중합체의 제조를 위해, 본 발명에 따른 단량체는 단독중합되거나 또다른 단량체와 공중합될 수 있다. 화학식 (1) 의 단위가 바람직하게는 0.01 내지 50 몰%, 특히 바람직하게는 0.1 내지 20 몰% 범위의 양으로 존재하는 공중합체가 바람직하다. 중합체 주쇄를 형성하는 적합하고 바람직한 공단량체는 플루오렌 (예를 들어 EP 842208 또는 WO 00/22026 에 따름), 스피로비플루오렌 (예를 들어 EP 707020, EP 894107 또는 WO 06/061181 에 따름), 파라-페닐렌 (예를 들어 WO 92/18552 에 따름), 카르바졸 (예를 들어 WO 04/070772 또는 WO 04/113468 에 따름), 티오펜 (예를 들어 EP 1028136 에 따름), 디히드로페난트렌 (예를 들어 WO 05/014689 에 따름), 시스- 및 트랜스-인테노플루오렌 (예를 들어 WO 04/041901 또는 WO 04/113412 에 따름), 케톤 (예를 들어 WO 05/040302 에 따름), 페난트렌 (예를 들어 WO 05/104264 또는 WO 07/017066 에 따름) 또는 또한 다수의 상기 단위로부터 선택된다. 전체에서 이러한 단위의 비율은 바람직하게는 대략 50 몰% 이상이다. 중합체, 올리고머 및 덴드리머는 또한 또다른 단위, 예를 들어 정공-수송 단위, 특히 트

리아릴아민에 기초한 것, 및/또는 전자-수송 단위를 포함할 수 있다.

[0109] 또한, 본 발명에 따른 금속 착물은 또한 추가로 관능화되거나 이에 따라 확장된 금속 착물로 전환될 수 있다. 본원에서 언급될 수 있는 예는 스프키 방법에 의해 아릴보론산을 사용하거나 하트워-부크발트 방법에 의해 제 1 또는 제 2 아민을 사용하는 관능화이다.

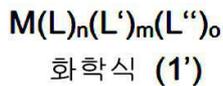
[0110] 화학식 (1) 의 본 발명의 화합물, 올리고머, 중합체, 덴드리머 또는 확장된 화합물이 전자 부품, 예컨대 유기 발광 소자/다이오드 (OLED), 유기 직접 회로 (O-IC), 유기 전계효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 전계 켈칭 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC) 또는 유기 레이저 다이오드 (O-laser) 에서의 활성 성분으로서, 특히 발광성 화합물로서, 가장 바람직하게는 OLED 에서의 삼중항 에미터로서 사용된다.

[0111] 본 발명의 또다른 양태는 따라서 화학식 (2) 의 하부구조 M(L)_n 을 함유하는



화학식 (2)

[0112] 화학식 (1') 의 화합물을 포함하는 전자 부품을 제공한다:
 [0113]



- [0114] [식 중, 사용되는 기호 및 지수는 하기 의미를 갖고,
- [0115] M 은 전이 금속이고;
- [0117] E 는 각 경우에 동등하거나 상이하고, 각 경우에 sp²-혼성화된 탄소 또는 질소 원자이고;
- [0118] Z 는 각 경우에 동등하거나 상이하고, 각 경우에 C(R)₂ 또는 NR 이고;
- [0119] Cy1, Cy2 는 각 경우에 동등하거나 상이하고, 각 경우에 치환되거나 비치환된 헤테로시클 (이는 N 원자를 통해 M 에 배위결합되고, 기 Z 에의 결합을 가질 수 있음) 이고;
- [0120] R 은 각 경우에 동등하거나 상이하고, 각 경우에 H, D, F, CN, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기 (각 경우에 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, Ge(R²)₂, Sn(R²)₂, -O-, -S-, -NR²-, -(C=O)-, -(C=NR²)-, -P=O(R²)-, SO, SO₂ 또는 -CONR²- 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 F 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 각 경우에 하나 이상의 비방향족 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 또는 이러한 계들 중 2, 3 또는 4 개의 조합이고; R 은 고리 Cy1 및/또는 Cy2 중 하나 또는 두 개와 함께 또다른 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수 있고;
- [0121] R² 는 각 경우에 동등하거나 상이하게 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로-방향족 고리계 (이에서 하나 이상의 H 원자는 F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 둘 이상의 인접한 치환기 R² 는 이들이 결합되는 원

자와 함께 모노- 또는 폴리시클릭 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하고;

- [0122] n 은 1, 2, 또는 3 이고;
- [0123] 화학식 (1) 에서의 리간드 L' 및 L'' 는 동일하거나 상이하고, 리간드 L 에 결합될 수 있는 한자리, 두자리 또는 세자리 킬레이트 리간드로부터 선택되고;
- [0124] m, o 는 각 경우에서 동일하거나 상이하고, 각 경우에서 0, 1 또는 2 이고; $n + m + o = 2$ 또는 3 이고;
- [0125] 단, $n = 1$ 이고, L 이 네자리 리간드인 경우 화학식 (2) 는 없거나 하나만의 M-C 결합을 갖고 또는 화학식 (2) 는 네자리 시클릭 리간드를 가짐].
- [0126] 전자 부품은 바람직하게는 유기 발광 소자/다이오드 (OLED), 유기 직접 회로 (O-IC), 유기 전계효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 전계 켄칭 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC) 또는 유기 레이저 다이오드 (O-laser), 특히 유기 발광 소자로부터 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0127] 유기 전계발광 소자 (OLED) 는 캐소드, 애노드 및 하나 이상의 발광층을 포함한다. 이러한 층 이외, 이는 또한 또다른 층, 예를 들어 각 경우에서 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 엑시톤-차단층, 전하-발생층 및/또는 유기 또는 무기 p/n 접합을 포함할 수 있다. 예를 들어, 엑시톤-차단 기능을 갖는 간층은 마찬가지로 2 개의 발광층 사이에 주입될 수 있다. 그러나, 이러한 층의 각각은 필수적으로 존재해야 하는 것은 아니라는 점을 주목해야 한다. 유기 전계발광 소자는 하나의 발광층을 포함할 수 있고, 또는 이는 다수의 발광층을 포함할 수 있고, 이에서 하나 이상의 발광층이 화학식 (1) 의 하나 이상의 화합물을 포함한다. 다수의 발광층이 존재하는 경우, 이는 바람직하게는 전체적으로 다수의 발광 최대값 380 nm 내지 750 nm 을 갖고, 이는 대체로 백색 발광을 초래하고, 즉 형광성 또는 인광성일 수 있는 다양한 발광성 화합물이 발광층에서 사용된다. 3 개의 층이 청색, 녹색 및 황색 또는 적색 발광을 나타내는 3-층 시스템이 특히 바람직하다 (기본 구조에 대해 예를 들어 WO 05/011013 참조).
- [0128] 본 발명의 바람직한 구현예에 있어서, 유기 전계발광 소자는 화학식 (1) 의 화합물 또는 발광층에서 발광성 화합물로서 상기에서 표시된 바람직한 구현예를 포함한다. 이는 특히 금속 M 이 Ir 또는 Pt 인 경우이다.
- [0129] 화학식 (1) 의 화합물이 발광층에서 발광성 화합물로서 사용되는 경우, 이는 하나 이상의 매트릭스 재료와 조합하여 사용되는 것이 바람직하다. 화학식 (1) 의 화합물 및 매트릭스 재료의 혼합물은 에미터 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체로서의 혼합물에 기초하여 1 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 내지 90 부피%, 특히 바람직하게는 3 내지 40 부피%, 특히 5 내지 15 부피% 의 화학식 (1) 의 화합물을 포함한다. 따라서, 혼합물은 에미터 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체로서의 혼합물에 기초하여 99 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 내지 10 부피%, 특히 바람직하게는 97 내지 60 부피%, 특히 95 내지 85 부피% 의 매트릭스 재료를 포함한다.
- [0130] 적합한 매트릭스 재료는 케톤, 포스핀 옥시드, 술폰옥시드 또는 술폰 (예를 들어, WO 04/013080, WO 04/093207, WO 06/005627 또는 WO 2010/006680 에 따름), 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴비페닐) 또는 WO 05/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 08/086851 에 개시된 카르바졸 유도체, WO 07/063754 또는 WO 08/056746 에 따른 인돌로카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 10/136109 또는 비공개 출원 DE 102009031021.5 에 따른 인데노카르바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따른 아자카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 07/137725 에 따른 이극성 매트릭스 재료, 예를 들어 WO 05/111172 에 따른 실란, 예를 들어 WO 06/117052 에 따른 아자보롤 또는 보로닉 에스테르, 예를 들어 WO 2010/015306, WO 07/063754 또는 WO 08/056746 에 따른 트리아진 유도체, 또는 예를 들어 EP 652273 또는 WO 09/062578 에 따른 아연 착물이다.
- [0131] 본 발명의 또다른 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 (1) 의 화합물 또는 상기에서 나타난 바람직한 구현예는 발광층에서의 발광성 화합물을 위한 매트릭스 재료로서 사용된다.
- [0132] 화학식 (1) 의 화합물 또는 상기에서 나타난 바람직한 구현예가 발광층에서의 발광성 화합물을 위한 매트릭스 재료로서 이용되는 경우, 이는 바람직하게는 하나 이상의 인광성 재료 (삼중항 에미터) 와 조합하여 이용된다. 본 발명의 목적을 위해 인광성은 비교적 높은 스핀 다중도의 여기된 상태, 즉 스핀 상태 > 1, 특히 여기된 삼중항 상태 또는 MLCT 혼합 상태로부터의 발광을 의미하도록 선택된다. 본 발명의 목적을 위해, 모든 발광성 전이-금속 착물, 특히 모든 발광성 이리듐, 백금 및 구리 착물이 삼중항 에미터로서 간주되는 것으로 의도된다. 화학식 (1) 의 화합물 또는 상기에서 나타난 바람직한 구현예 및 발광성 화합물의 혼합물은 에미터 및

매트릭스 재료를 포함하는 전체로서의 혼합물에 기초하여 99 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 내지 10 부피%, 특히 바람직하게는 97 내지 60 부피%, 특히 95 내지 85 부피%의 화학식 (1)의 화합물 또는 상기에서 나타난 바람직한 구현예를 포함한다. 따라서, 혼합물은 에미터 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체로서의 혼합물에 기초하여 1 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 내지 90 부피%, 특히 바람직하게는 3 내지 40 부피%, 특히 5 내지 15 부피%의 에미터를 포함한다.

[0133] 적합한 인광성 화합물은 특히 적합한 여기상태에서 바람직하게는 가시 영역에서 발광하고, 부가적으로 20 초과, 바람직하게는 38 초과 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 80 미만의 원자 번호를 갖는 하나 이상의 원자를 함유하는 화합물이다. 사용되는 인광성 에미터는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로튬, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물이다.

[0134] 상기에서 기술된 에미터의 예는 출원 WO 00/70655, WO 01/41512, WO 02/02714, WO 02/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244 또는 WO 09/118087에 공개되어 있다. 또한 상기에서 나타난 화학식 (1)의 화합물 또는 상기에서 나타난 바람직한 구현예가 에미터로서 적합하다. 일반적으로, 인광성 OLED에 대한 선행기술에 따라 사용되고, 유기 전계발광의 분야의 당업자에게 공지된 바와 같은 모든 인광성 착물이 적합하고, 당업자는 진보적인 단계 없이 또다른 인광성 착물을 사용할 수 있을 것이다.

[0135] 본 발명의 또다른 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 (1)의 화합물 또는 상기에서 나타난 바람직한 구현예는 정공-차단층에서의 정공-차단 재료로서 및/또는 전자-수송층에서의 전자-수송 재료로서 이용된다. 발광층은 형광성이거나 인광성일 수 있다.

[0136] 본 발명의 또다른 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 (1)의 화합물 또는 상기에서 나타난 바람직한 구현예는 정공-수송 또는 정공 주입층에서의 정공-수송 재료로서 및/또는 엑시톤-차단층에서의 전자-차단 또는 엑시톤-차단 재료로서 이용된다.

[0137] 또한, 하나 이상의 층이 승화 공정을 사용하여 처리되고, 재료는 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 유닛에서 증착되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 그러나, 또한, 초기 압력이 낮거나 높은, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만인 것이 가능하다.

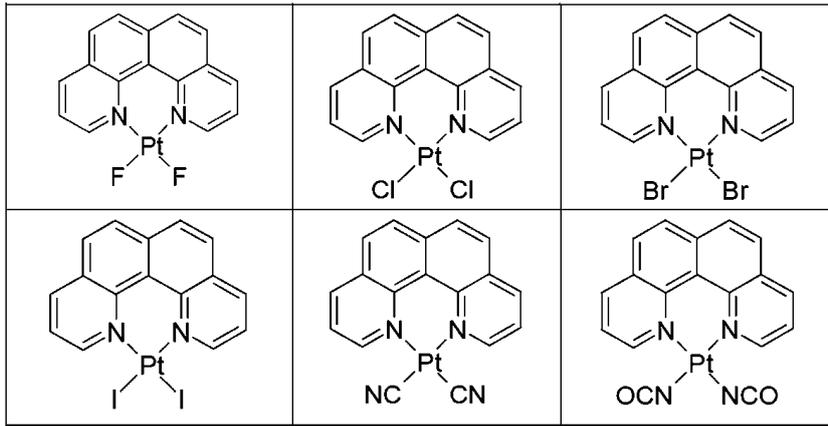
[0138] 마찬가지로 하나 이상의 층이 OVPD (유기 기상 증착) 방법에 의해 또는 캐리어-기체 승화에 의해 적용되고, 재료는 10^{-5} mbar 내지 1 bar의 압력에서 적용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 이러한 방법의 특별한 경우는 OVJP (유기 증기 제트 인쇄) 방법이고, 이의 재료는 노즐을 통해 직접적으로 적용되고 구조화된다 (예를 들어 M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).

[0139] 또한, 하나 이상의 층이, 예를 들어 스핀 코팅과 같은 용액으로부터 제조되거나, 예를 들어 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄 또는 노즐 인쇄, 그러나 특히 바람직하게는 LITI (광 유도 열 이미징, 열전사 인쇄) 또는 잉크-젯 인쇄와 같은 임의의 원하는 인쇄 공정에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 예를 들어 적절한 치환에 의해 얻어지는 가용성 화합물이 이러한 목적을 위해 필요하다.

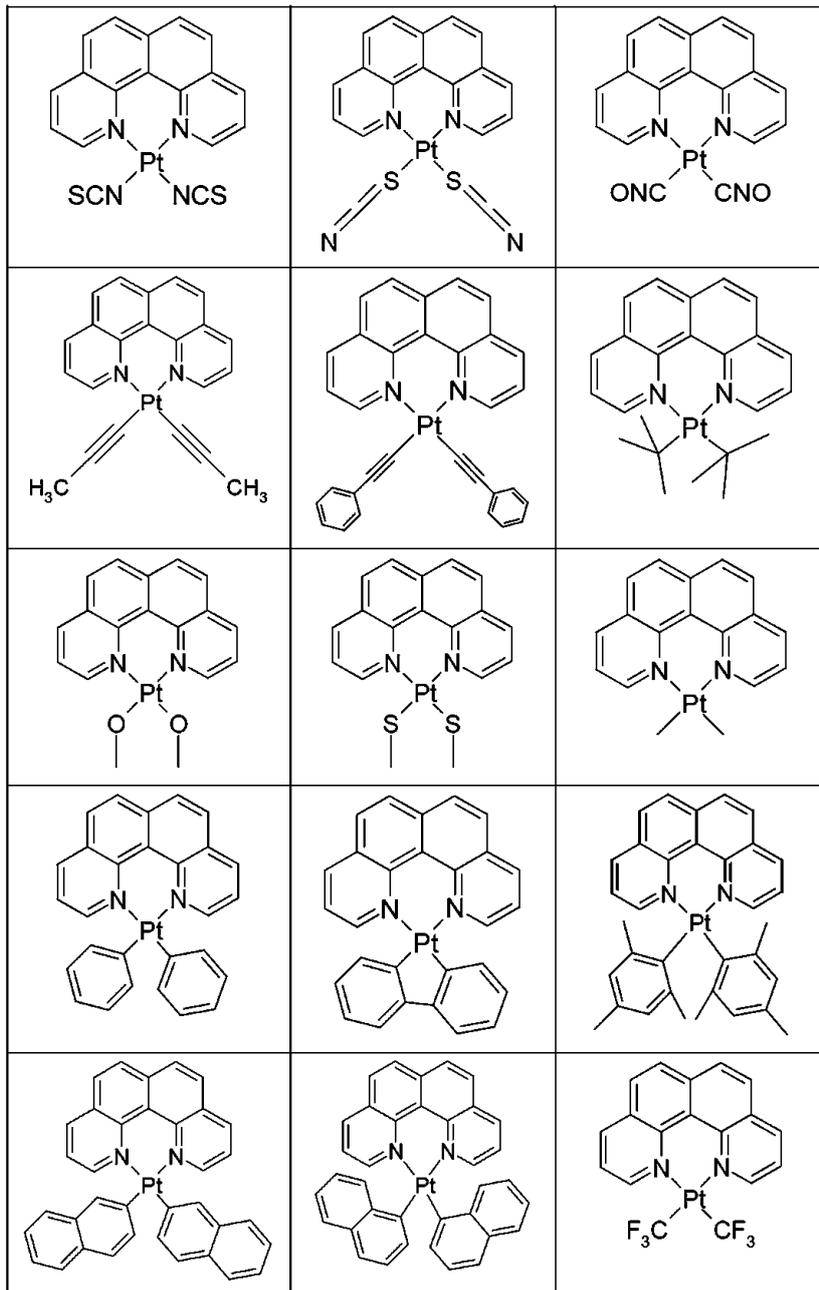
[0140] 이러한 방법은 당업자에게 일반적인 용어로 공지되어 있고, 화학식 (1)의 화합물 또는 상기에서 나타난 바람직한 구현예를 포함하는 유기 전계발광 소자에 대해 문제 없이 이들에 의해 적용될 수 있다.

[0141] 본 발명은 또한 상기에서 정의된 바와 같은 하나 이상의 화합물 또는 올리고머, 중합체 또는 덴드리머 및 하나 이상의 용매를 포함하는 제형, 특히 용액을 포함한다.

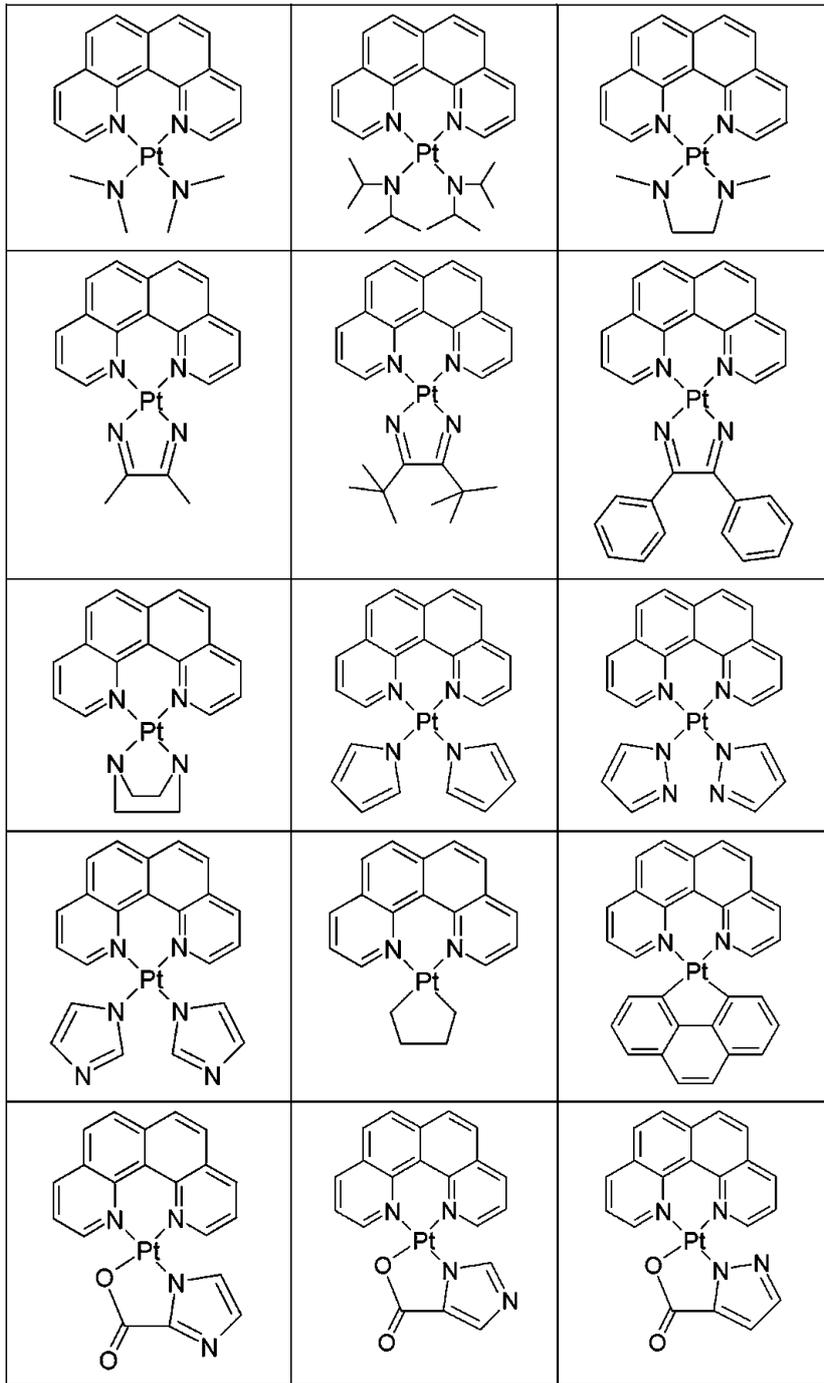
[0142] 본 발명에 따른 부분 구조 $M(L)_n$ 을 위한 예시적인 화합물은 하기 표에서 보여진다:



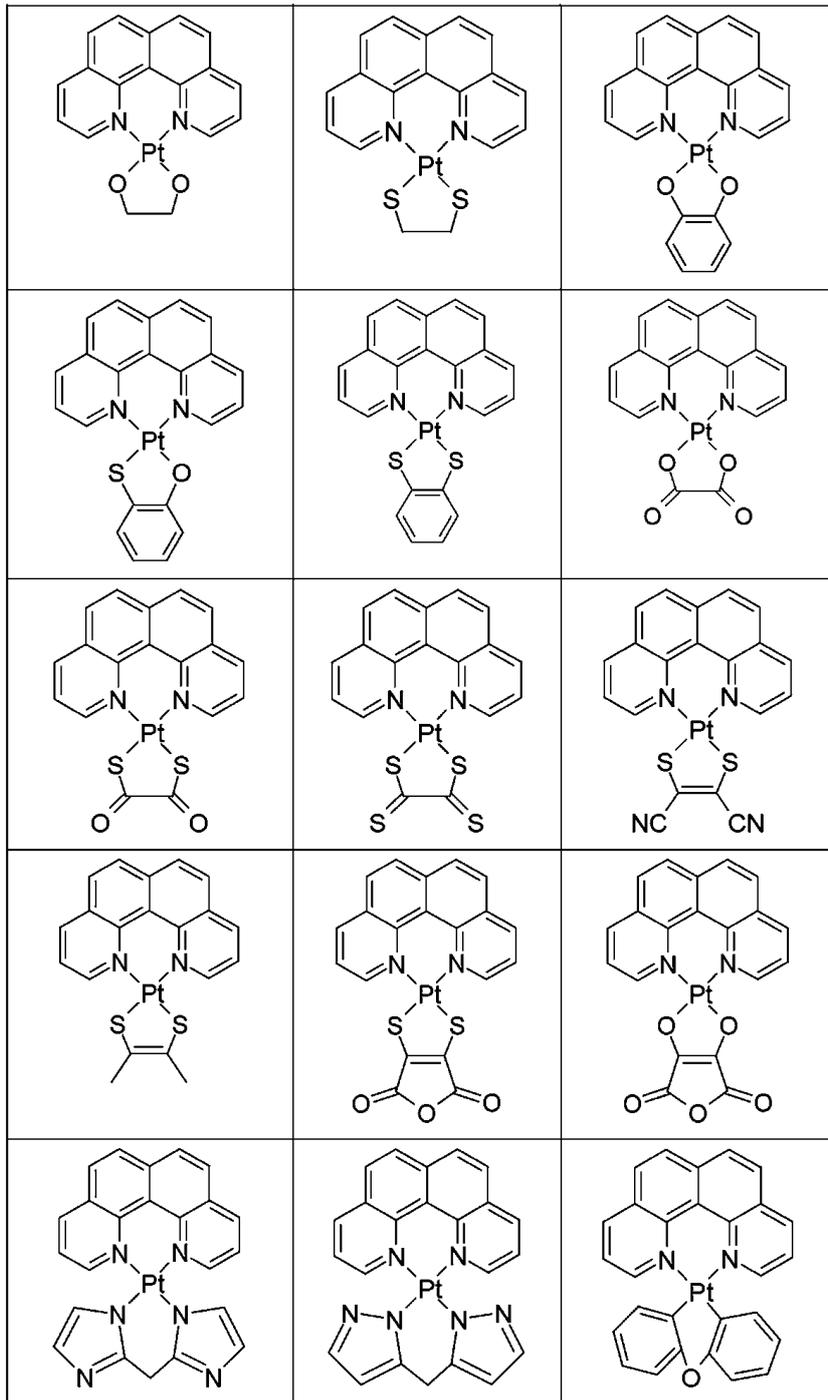
[0143]



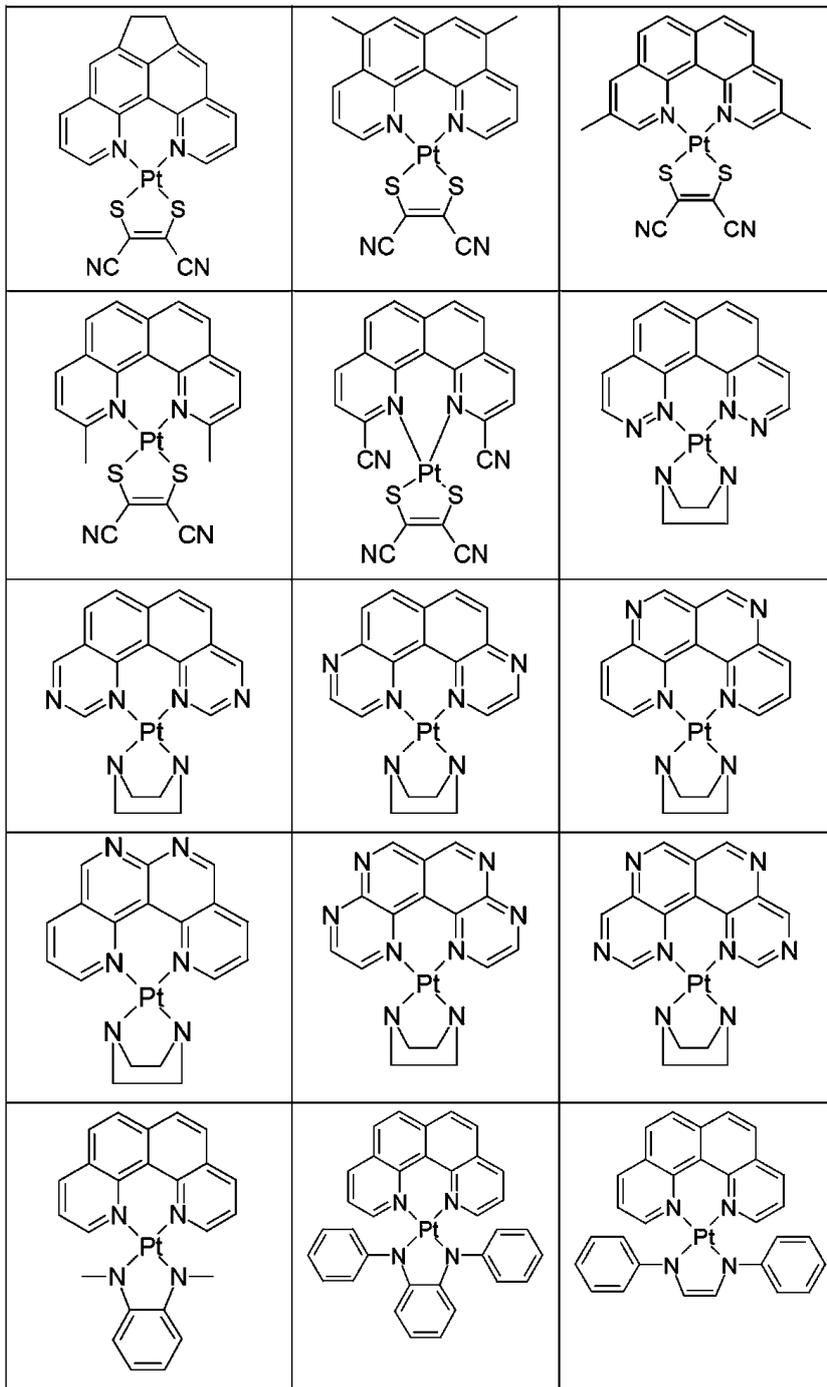
[0144]



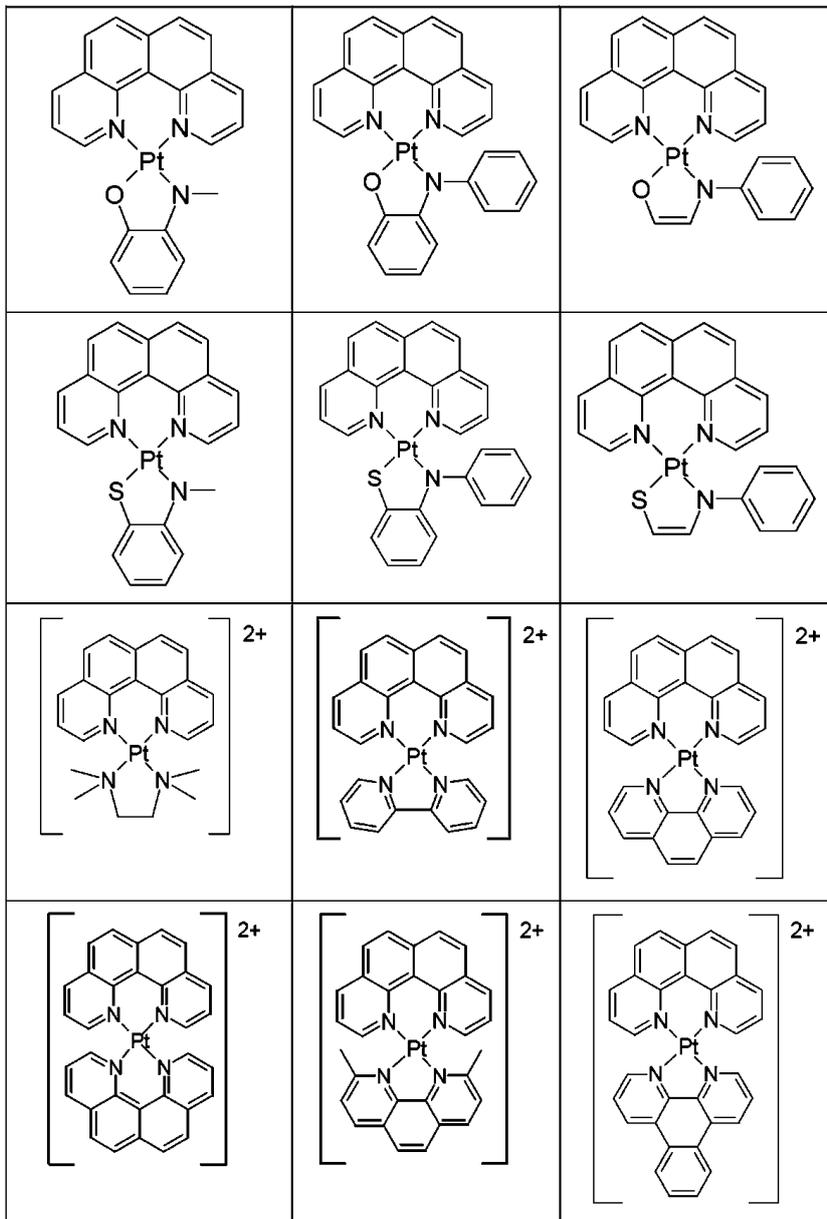
[0145]



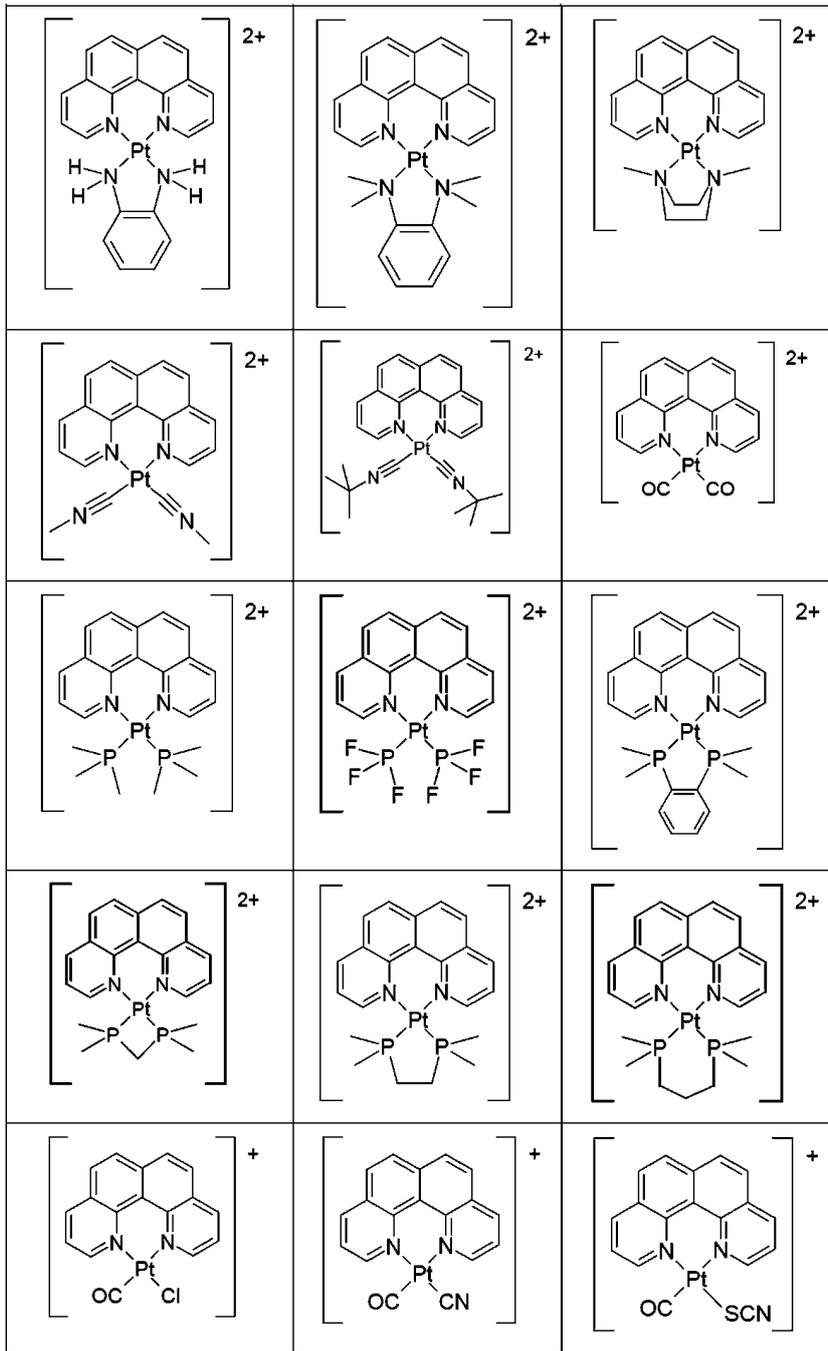
[0146]



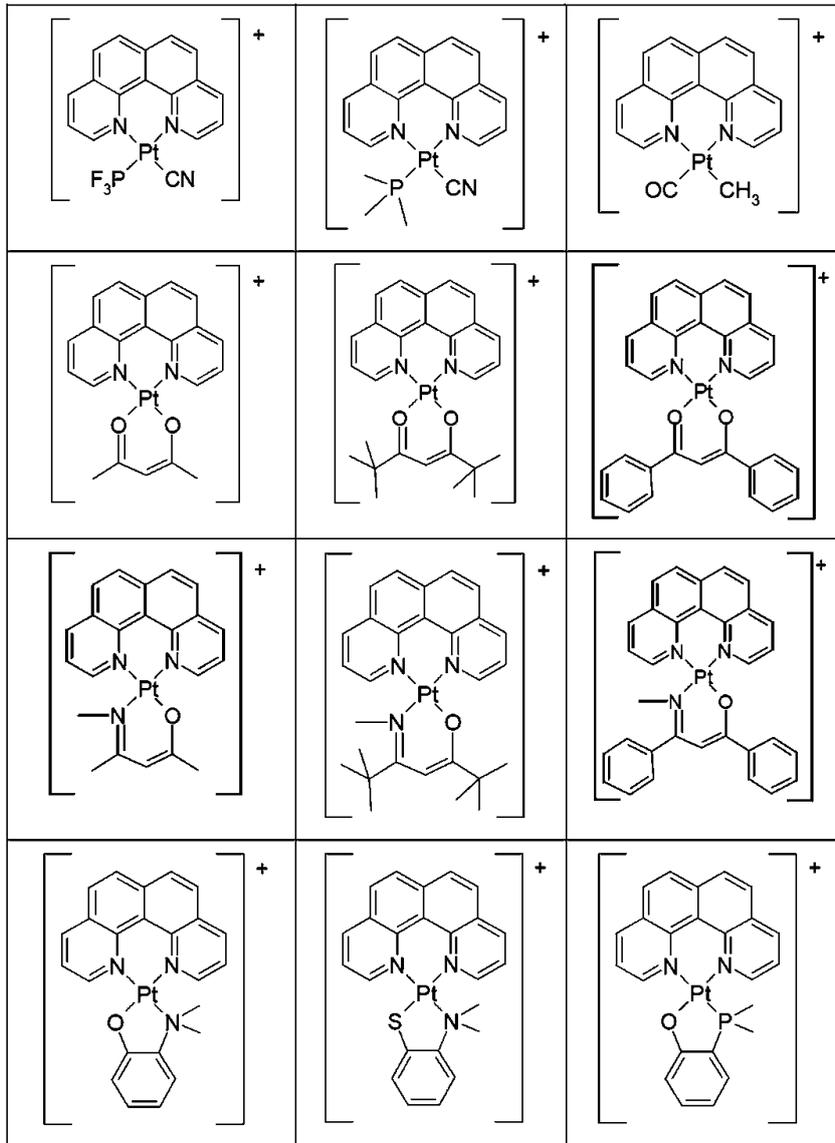
[0147]



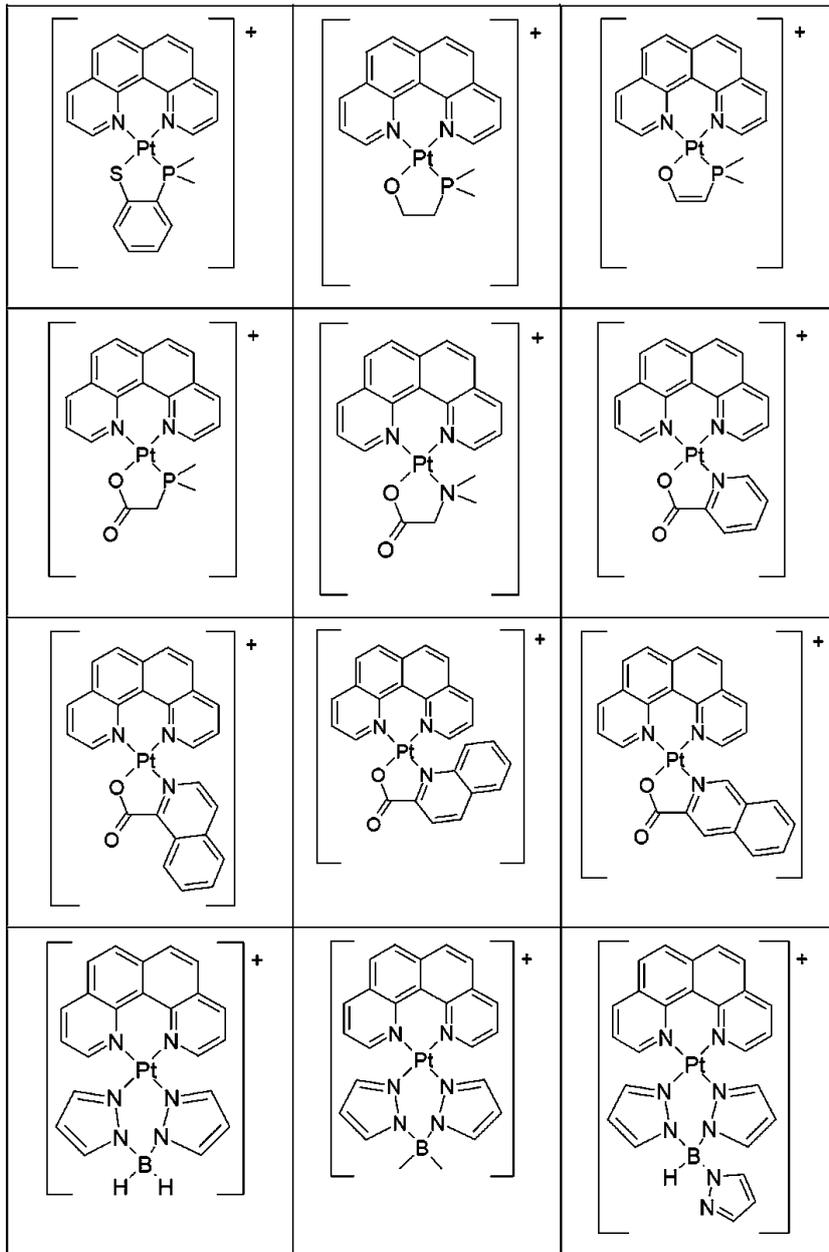
[0148]



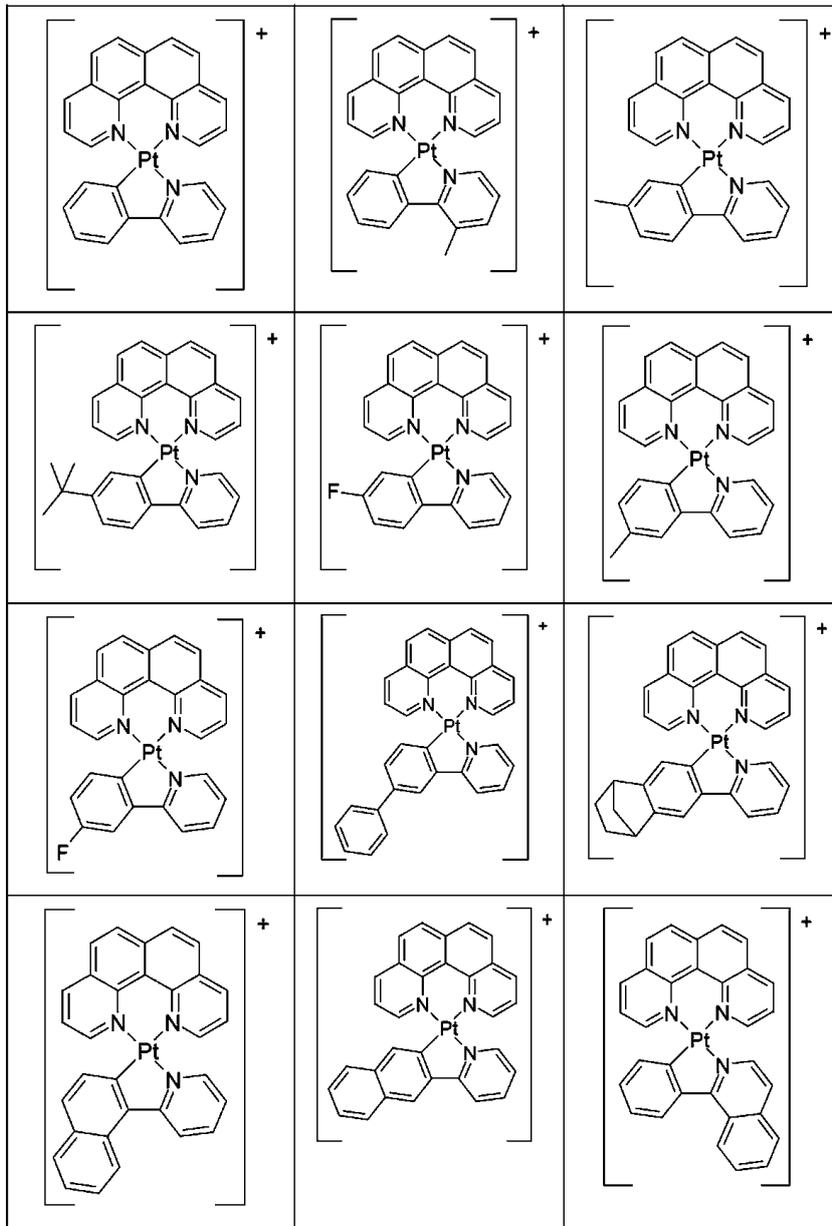
[0149]



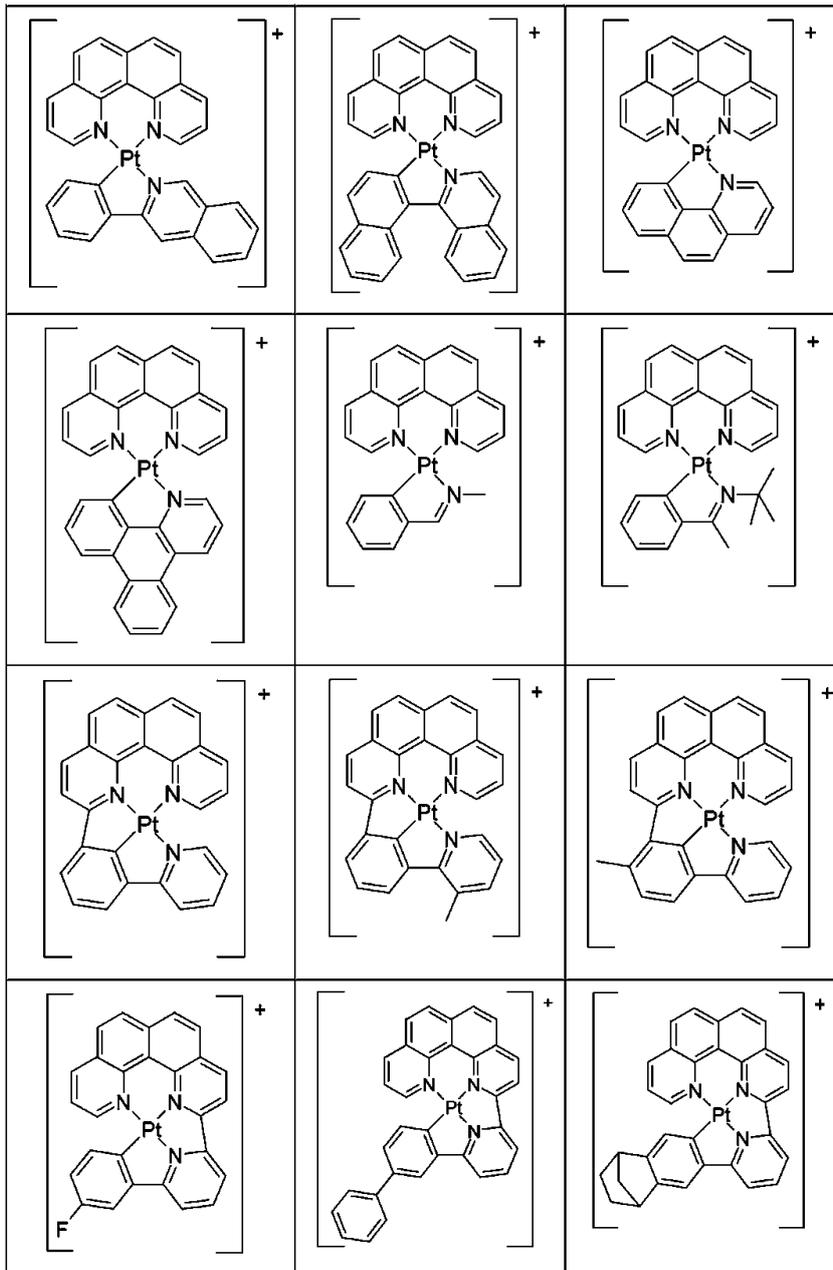
[0150]



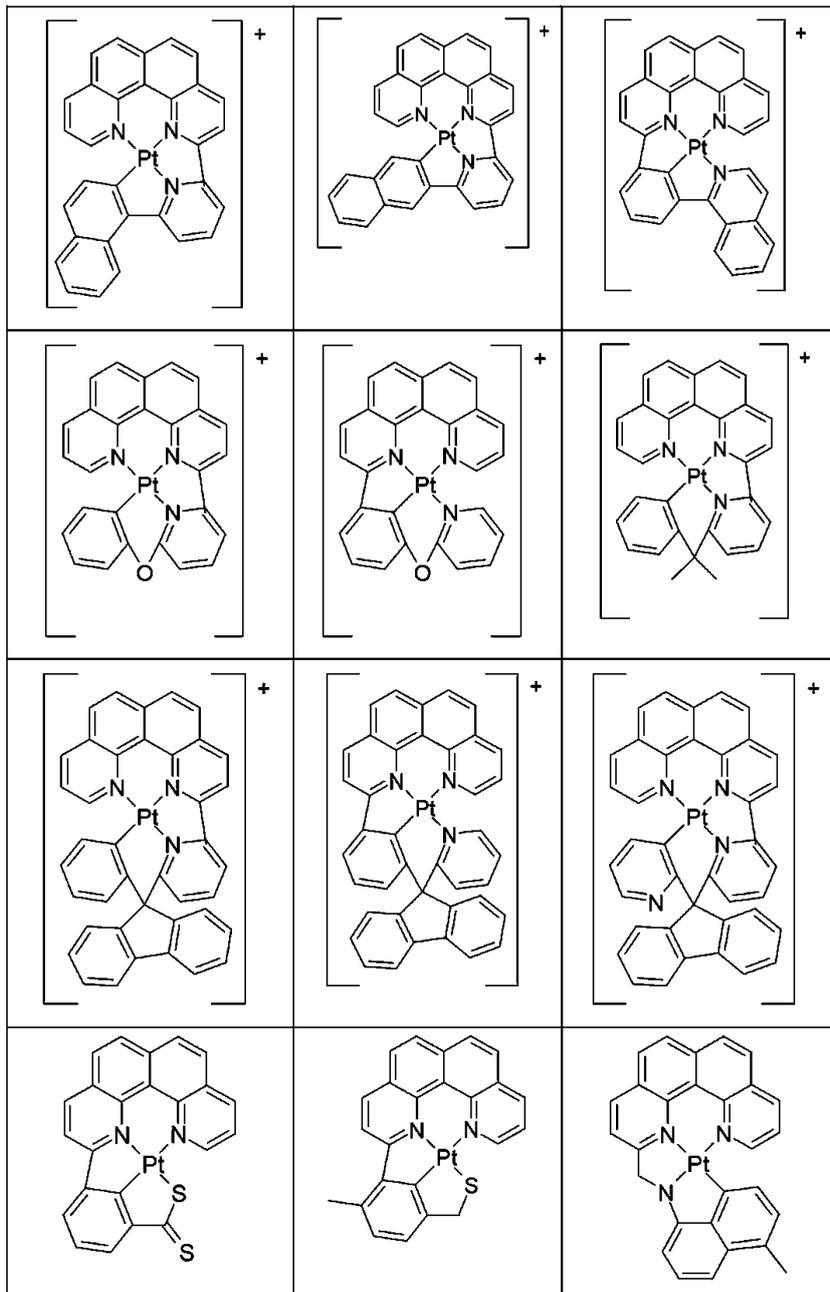
[0151]



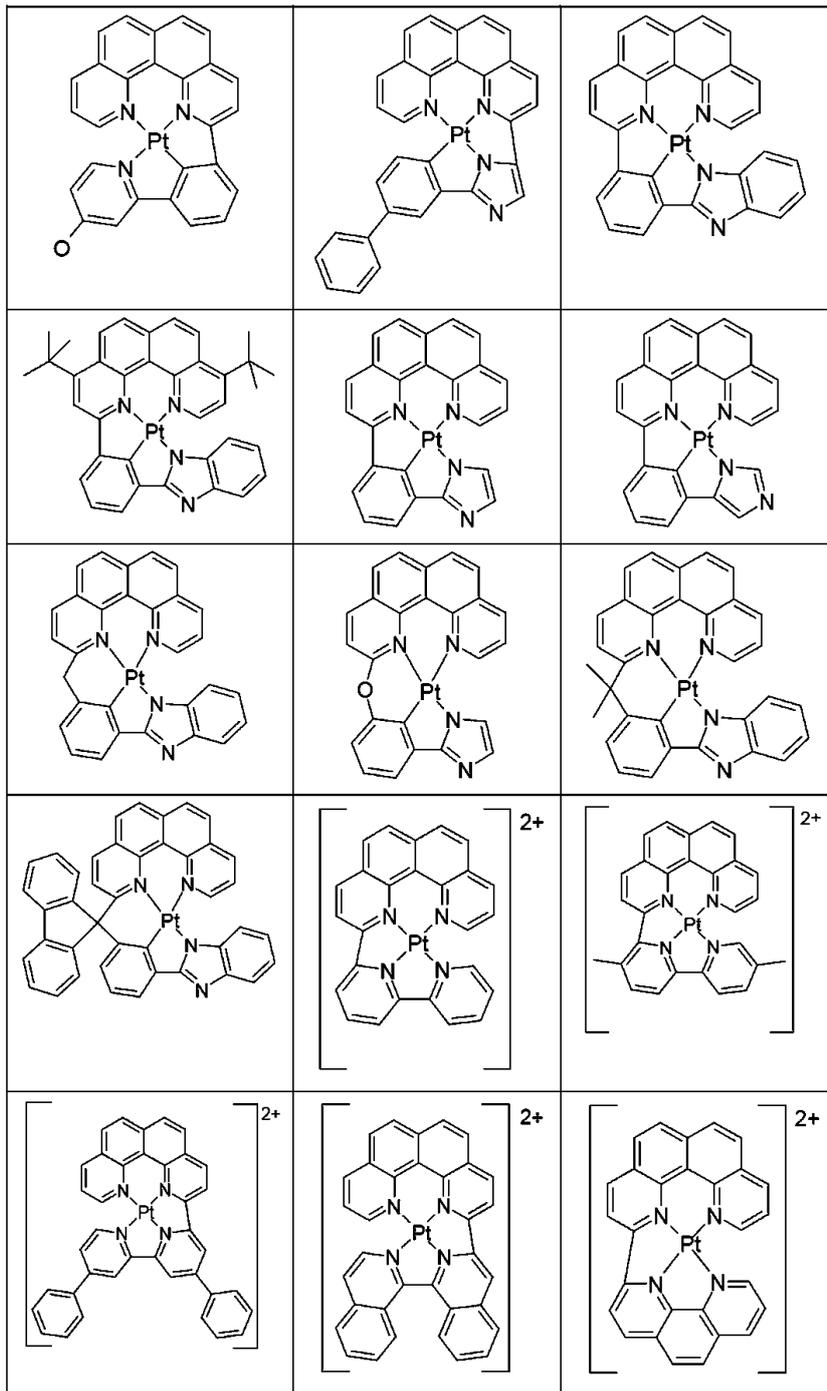
[0152]



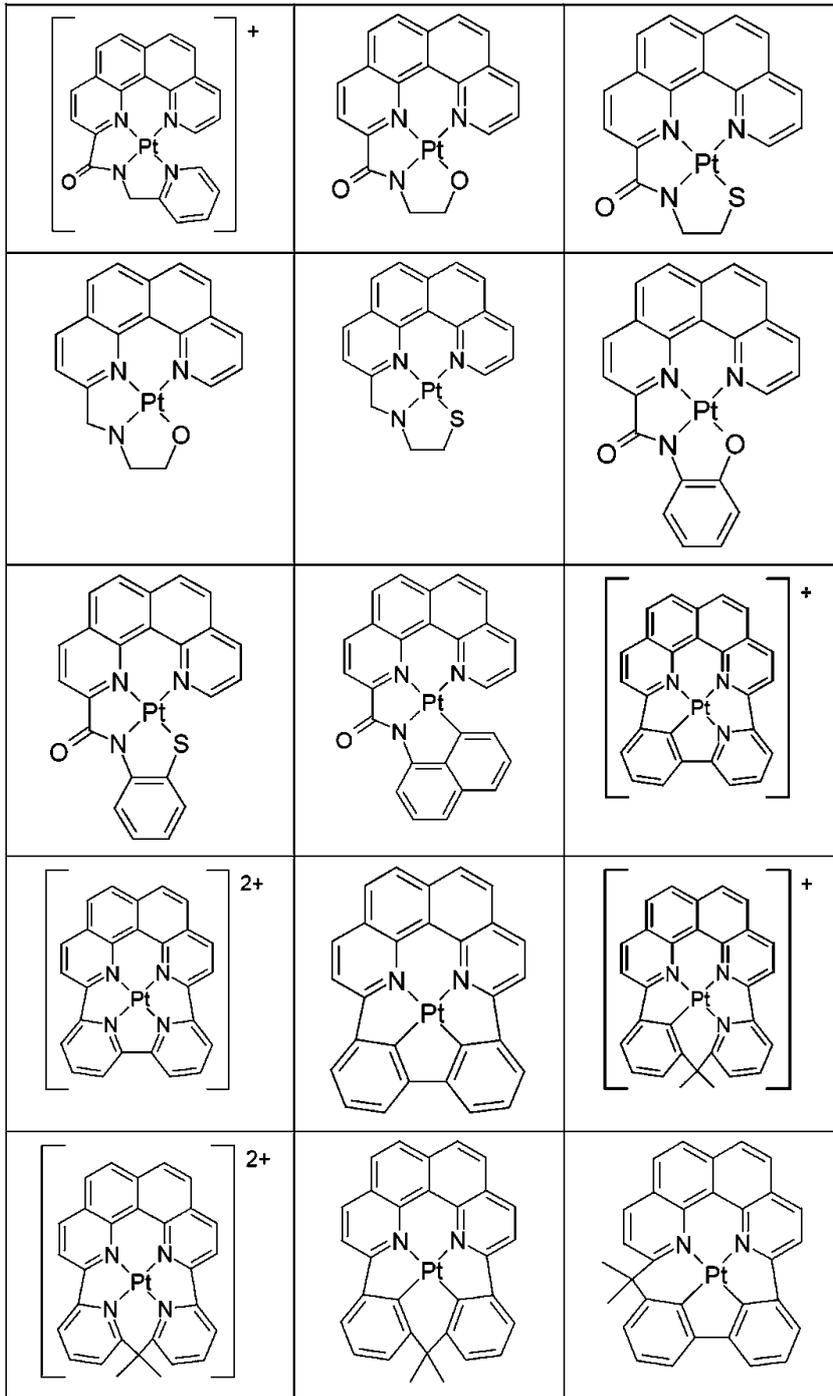
[0153]



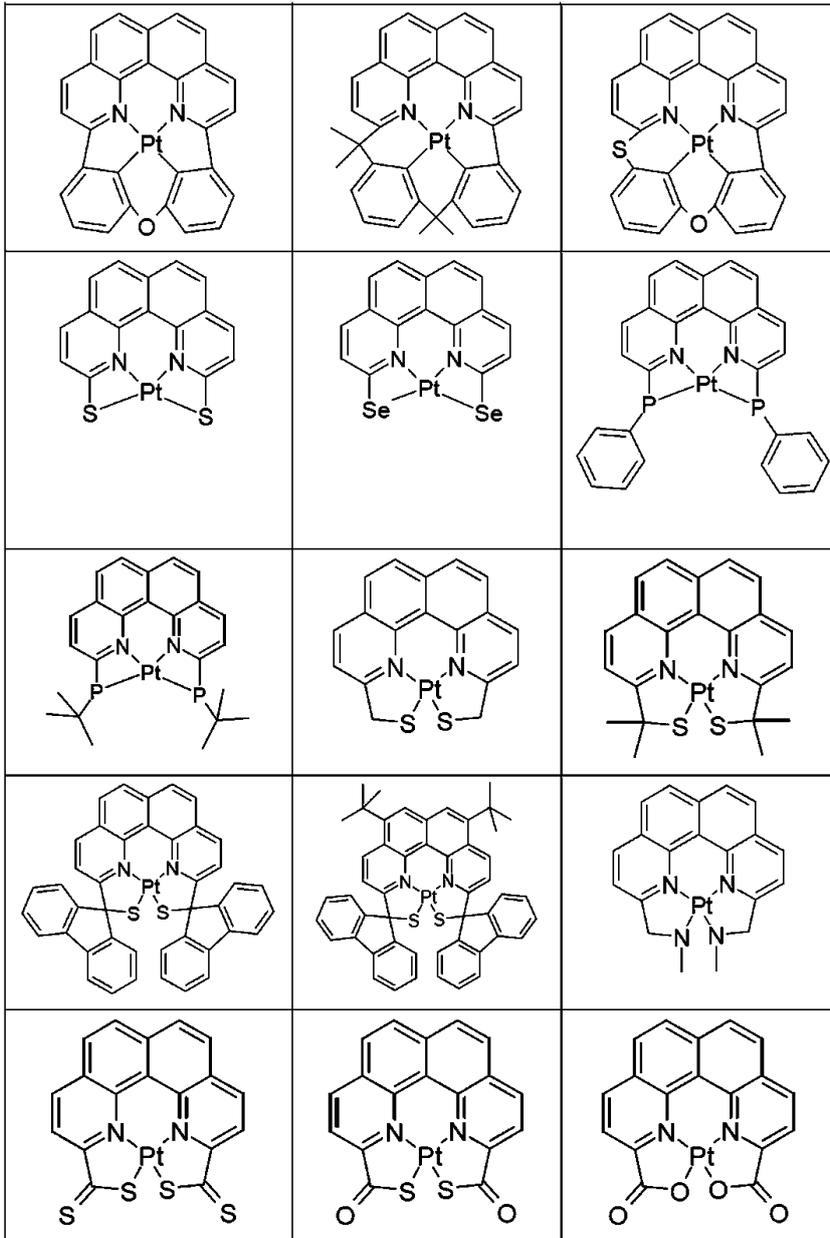
[0154]



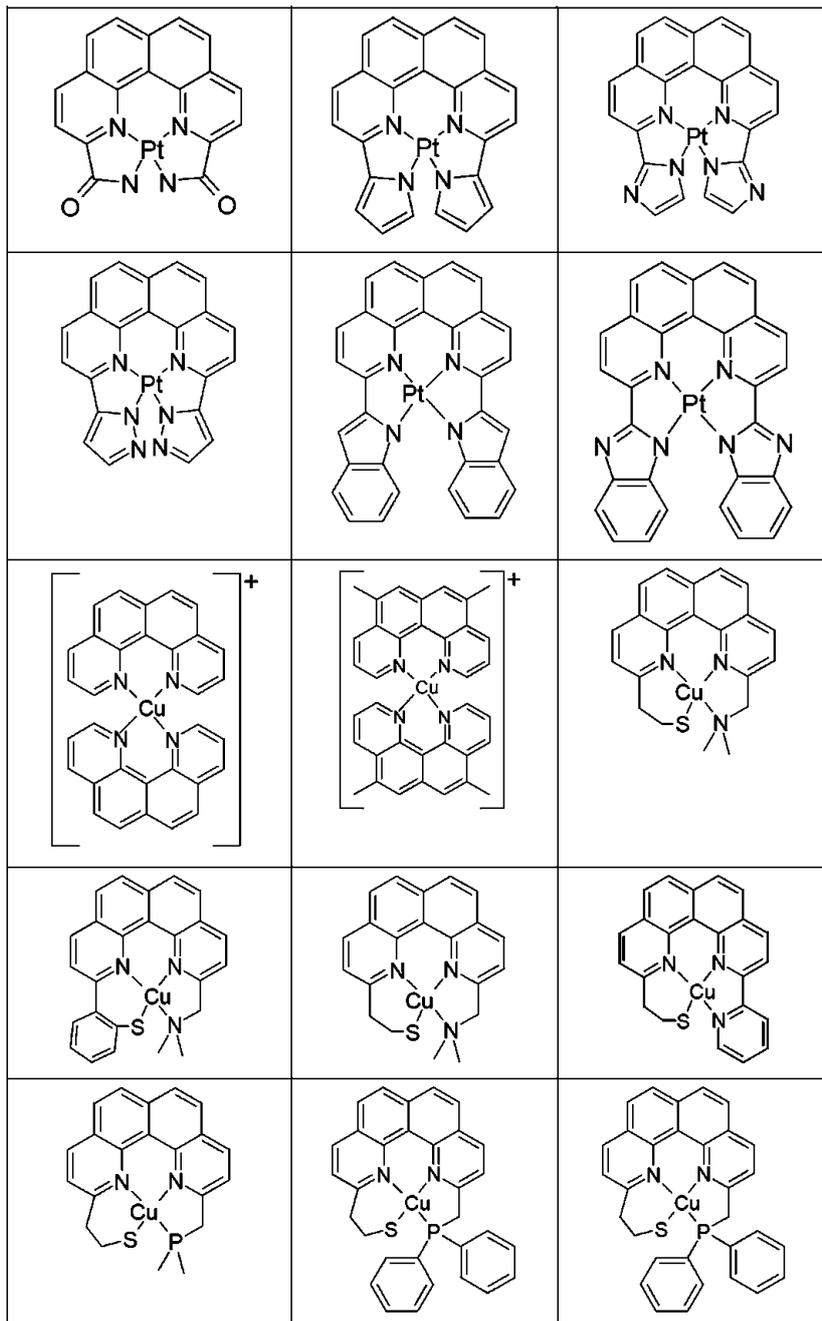
[0155]



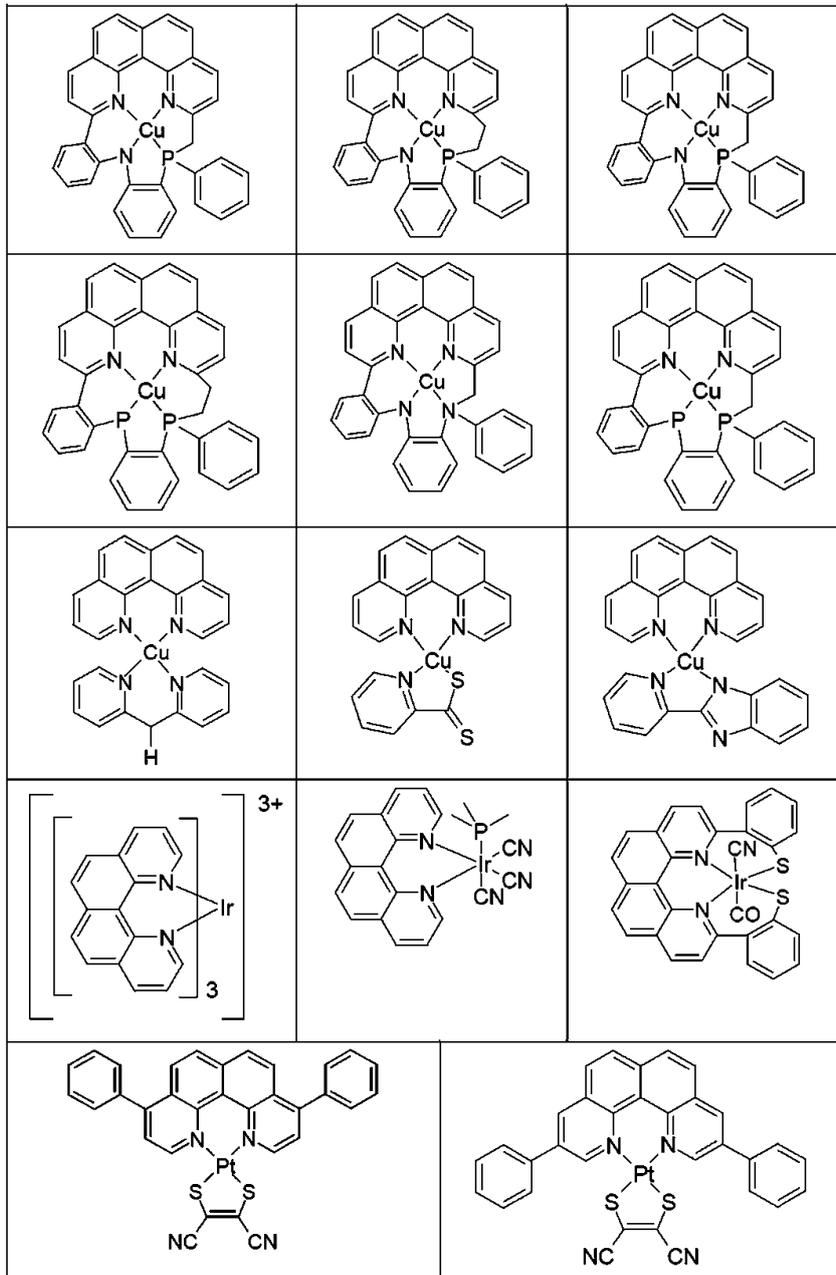
[0156]



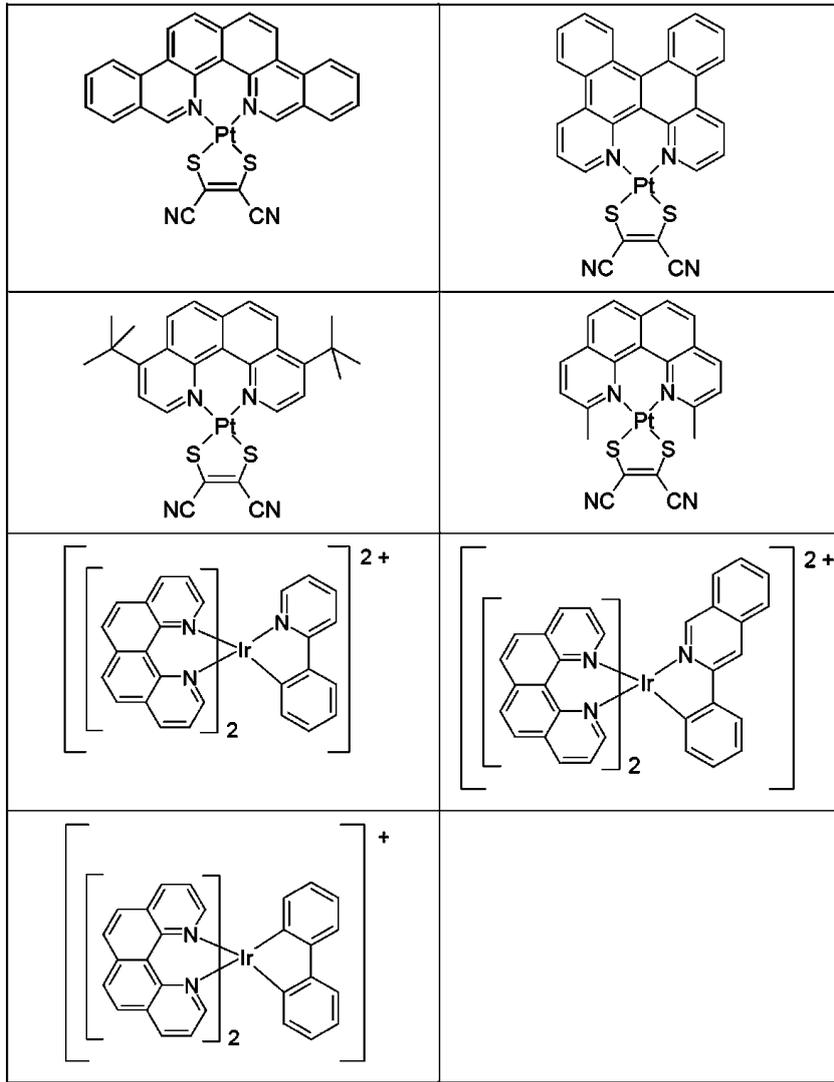
[0157]



[0158]



[0159]



[0160]

[0161]

본 발명의 화합물은 선행기술에 따른 화합물에 비해 하기 장점을 가진다.

[0162]

1. 본 발명의 화합물은 높은 열적 안정성을 가진다. 따라서, 저분자량 화합물은 분해 없이 높은 진공에서 기화될 수 있고, 올리고머, 덴드리머 및 중합체 화합물은 또한 매우 열적으로 안정하여, 소자가 손상 없이 열적으로 처리될 수 있다. 이러한 특성은 OLED의 재현 생산을 위한 기본 전제이고, 특히 작동 수명에 대해 긍정적인 효과를 가진다. 또한, 착물이 소자의 정제 및 생산에 있어서 실질적으로 손실없이 승화될 수 있기 때문에 이러한 희금속의 화합물의 자원-보전적 활용이 가능하다.

[0163]

2. 본 발명의 화합물은 유기 용매에서 양호한 가용성을 나타내고, 이는 종래의 방법, 예컨대 재결정화 또는 크로마토그래피에 의해 이들의 정제를 상당히 용이하게 한다. 따라서 화합물은 코팅 또는 인쇄 기술에 의해 용액으로부터 처리될 수 있다. 또한 장비의 세정 또는 사용되는 새도우 마스크가 결과적으로 상당히 용이하기 때문에 이러한 특성은 기화에 의한 종래 공정에서 유리하다.

[0164]

3. 본 발명에 따른 화합물은 개선된 산화 안정성을 나타내고, 이는 일반적으로 정제 및 이러한 화합물의 취급에 대해 긍정적인 효과를 가진다.

[0165]

4. 본 발명의 화합물은 고순도로 재현가능하게 제조될 수 있고, 배치간 편차를 나타내지 않는다. 따라서 본 발명의 전계발광 소자를 제조하기 위한 산업적인 공정은 보다 상당히 효율적이다.

[0166]

5. 리간드의 합성은 보다 간단하고, WO 04/081017에서의 리간드의 합성 보다 더 적은 단계를 포함한다. 이는 중요한 산업적인 장점이다.

[0167]

본 발명은 하기 실시예에 의해 설명되나 이에 제한되지 않는다. 당업자는 본 발명에 따른 또다른 화합물을 제조하거나 또다른 진보적인 단계 없이 주어진 정보에 기초하여 유기 전자 소자에서 이를 사용할 수 있을 것이

다

[0168]

실시예:

[0169]

실시예 1: 유기 전계발광 소자의 제조 및 특성

[0170]

본 발명에 따른 전계발광 소자는 예를 들어 WO 05/003253 에 기술된 바와 같이 제조될 수 있다.

[0171]

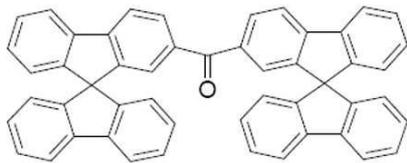
하기 구조를 갖는 OLED 는 상기에서 언급된 일반 공정과 유사하게 제조된다.

정공-주입층 (HIL)	20 nm 의 2,2',7,7'-테트라키스(디-파라-톨릴-아미노)스피로-9,9'-비플루오렌
정공-수송층 (HTL)	20 nm 의 NPB (N-나프틸-N-페닐-4,4'-디아미노비페닐)
전자 차단층 (EBL)	15 nm 의 9,9'-비스-(3,5-디페닐아미노페닐)플루오렌
방출층 (EML)	40 nm 의 호스트 재료: a) 스피로케톤 (SK), 비스(9,9'-스피로비플루오렌-2-일) 케톤 b) 혼합된 매트릭스: 30 % 디아자실롤 + 55 % 케톤 도펀트 1 또는 2: 10 % 내지 15 부피% 도핑; 하기 화합물 참조
정공-차단층 (HBL)	10 nm 의 SK
전자 전도체 (ETL)	20 nm 의 AlQ ₃ (트리스(퀴놀리나토)-알루미늄(III))
캐소드	1 nm 의 LiF, 상부예의 100 nm 의 Al.

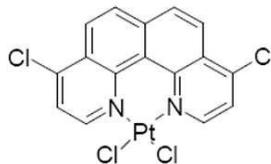
[0172]

SK 의 구조체 및 도펀트 1 은 하기에 분명하게 보여진다.

[0173]

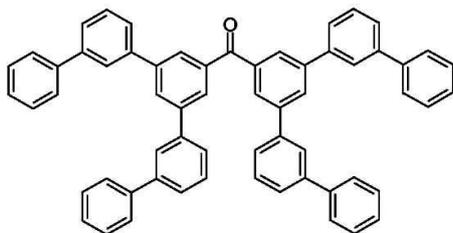


스피로케톤 (SK)
WO 04/093207

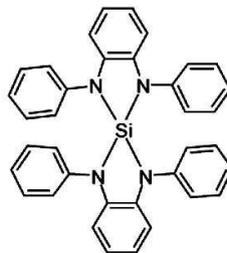


도펀트 1
CAS [374074-96-1]

[0174]



케톤
WO 10/006666



디아자실롤
WO 10/054729

[0175]

[0176]

아직까지 최적화되지 않은 OLED 가 표준 방법에 의해 특정되었고; 이러한 목적을 위해 전계발광 스펙트럼, 휘도의 함수로서의 효율 (cd/A 로 측정됨), 작동 전압 (전류-전압-휘도 특징선 (IUL 특징선) 으로부터 계산함), 및 수명을 결정하였다.

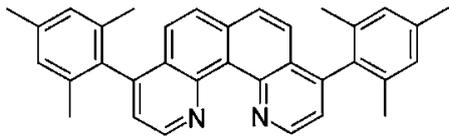
[0177] 표 1: 소자 결과

실시예	EML	1000 cd/m ² 에서의 최대 효율 [cd/A]	1000 cd/m ² 에서의 전압 [V]	CIE (x, y)
1a	a) : 도펀트 1 (10 %)	15.4	4.9	0.32/0.61
1b	a) : 도펀트 1 (15 %)	29.2	4.6	0.33/0.62
1c	b) : 도펀트 2 (15 %)	31.6	4.8	0.18/0.42

[0178]

[0179] 실시예 2: 도펀트 2 의 합성

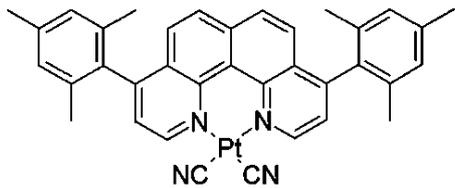
[0180] A) 4,9-비스-(2,4,6-트리메틸페닐)-1-12-디아자-벤조[C]페난트렌



[0181]

[0182] 80 ml 의 디옥산 중의 3.0 g (10 mmol) 의 4,9-디-클로로-1,12-디아자-벤조[C]페난트렌, 6.6 g (40 mmol) 2,4,6-트리메틸-벤젠 보론산, 3.5 g (60 mmol) 플루오르화 칼륨, 142 mg (0.7 mmol) 트리-tert-부틸-포스핀 및 112 g (0.5 mmol) 팔라듐(II)아세테이트의 혼합물을 100 °C 에서 30 시간 동안 교반하였다. 혼합물을 60 °C 로 냉각시키고, 이후 200 ml 의 메탄올:물의 혼합물 (1:1, v:v) 을 적가하였다. 실온에서의 추가 2 시간 동안의 교반 후, 침전물을 여과하고, 50 ml 의 메탄올로 각각 2 회 세척하고, 이후 진공에서 건조시켰다. 미정제 생성물을 300 ml 의 디클로로메탄에서 재용해시키고, 실리카의 짧은 컬럼을 통해 여과하여 잔여 팔라듐을 제거하였다. 디클로로메탄의 제거 후 얻어진 생성물을 DMF 로부터 2 회 재결정화시켰다. 수율: 2.9 g (6.2 mmol) 62 %.

[0183] B) 4,9-비스-(2,4,6-트리메틸페닐)-1-12-디아자-벤조[C]페난트렌-디-시아노-백금(II)



[0184]

[0185] 50 ml DMF 중의 2.3 g (5 mmol) 4,9-비스-(2,4,6-트리메틸페닐)-1-12-디아자-벤조[C]페난트렌 및 1.2 g (5 mmol) Pt(CN)₂ 의 혼합물을 18 시간 동안 환류하여 가열하였다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고 침전물을 여과하고, 메탄올로 세척하고, 이후 진공에서 건조시켰다. 미정제 생성물을 DMSO 로부터 3 회 재결정화시키고, 이후 반복되는 부분 승화에 의해 추가로 정제시켰다 (p app. 10⁻⁶ mbar, T 340-360 °C). 수율: 1.4 g (2 mmol) 39 %.